



Formación para la Investigación Escuela de Física, Facultad de Ciencias Universidad Industrial de Santander Construimos Futuro

DIFERENCIAS FINITAS Y CRITERIO DE ESTABILIDAD

Angela Sofía Barajas Ochoa - 2200018

Escuela de Física Universidad Industrial de Santander Bucaramanga, Colombia

24 de junio de 2022

Índice

1.	Introducción	1
2.	Marco teórico 2.1. Método de diferencias finitas [1]	1 1 2
3.	Moleculas centradas 3.1. Segundo orden	4
4.	Moleculas desbalanceadas hacia la izquierda 4.1. Segundo orden	4
5.	Moleculas desbalanceadas hacia la derecha 5.1. Segundo orden	6
	Esquemas en diferencias finitas 6.1. Esquema Leapfrog	9

1. Introducción

En este informe, lo que se busca hacer es deducir las expresiones de los operadores diferenciales de primer a cuarto orden, teniendo como punto de referencia una serie de moléculas centradas o por el contrario, moléculas desbalanceadas. Para esto se debe realizar una aproximación de las ecuaciones diferenciales, para lo cual se puede emplear el método de diferencias finitas.

2. Marco teórico

2.1. Método de diferencias finitas [1]

Aquí se pueden usar fórmulas de diferencias finitas en puntos de cuadrícula espaciados uniformemente para aproximar las ecuaciones diferenciales. De esta forma, es posible transformar una ecuación diferencial

en un sistema de ecuaciones algebraicas a resolver. Aquí se puede dividir un intervalo [a, b] en n subintervalos iguales de longitud h.

Comúnmente, se suelen usar las fórmulas de diferencias centrales en los métodos de diferencias finitas debido a que producen una mayor precisión. La ecuación diferencial se aplica solo en los puntos de la cuadrícula, y las derivadas primera y segunda son (1) y (2) respectivamente.

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2} = \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} \tag{2}$$

2.2. Discretización del espacio-tiempo

Para aplicar el método de diferencias finitas se debe discretizar el espacio, y para esto se puede realizar una malla tal como se ve en la figura 1.

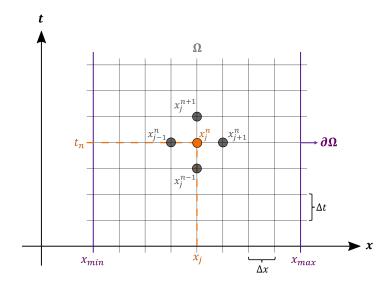


Figura 1: Discretización del espacio-tiempo por medio de una malla

Teniendo esto en cuenta es posible aplicar el teorema de Taylor para expandir en serie la función alrededor de 4 puntos distintos con pequeños diferenciales de distancia y de tiempo, Δx y Δt tal como se ve en la figura 1. Con esto ya se pueden definir los puntos desde los cuales se expandirá la función. Para esto se van a tomar 3 distintos casos, para una molécula centralizada, y para una molécula desbalanceada tanto para la izquierda como para la derecha.

3. Moleculas centradas

3.1. Segundo orden

$$f(x_j^n) = f(x_j^n) \tag{3}$$

$$f(x_{j+1}^n) = f(x_j^n) + \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) + O(\Delta x^3)$$
(4)

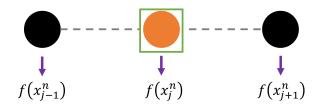


Figura 2: Molécula centralizada

$$f(x_{j-1}^n) = f(x_j^n) - \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) - O(\Delta x^3)$$
 (5)

 \rightarrow Al restar 4-5

$$f(x_{j+1}^n) - f(x_{j-1}^n) = 2\Delta x f'(x_j^n) + O(\Delta x^3)$$

$$f'(x_j^n) = \frac{f(x_{j+1}^n) - f(x_{j-1}^n)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$
 (6)

 \rightarrow Al sumar 4+5

$$f(x_{i+1}^n) + f(x_{i-1}^n) = 2f(x_i^n) + \Delta x^2 f''(x_i^n) + O(\Delta x^4)$$

$$f''(x_j^n) = \frac{f(x_{j+1}^n) + f(x_{j-1}^n) - 2f(x_j^n)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$
 (7)

3.2. Cuarto orden

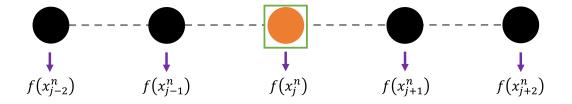


Figura 3: Molécula centralizada

$$f(x_j^n) = f(x_j^n) \tag{8}$$

$$f(x_{j+1}^n) = f(x_j^n) + \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) + \frac{\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5)$$
(9)

$$f(x_{j+2}^n) = f(x_j^n) + 2\Delta x f'(x_j^n) + 2\Delta x^2 f''(x_j^n) + \frac{4\Delta x^3}{3} f'''(x_j^n) + \frac{2\Delta x^4}{3} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5)$$
(10)

$$f(x_{j-1}^n) = f(x_j^n) - \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) - \frac{\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) - O(\Delta x^5)$$
(11)

$$f(x_{j-2}^n) = f(x_j^n) - 2\Delta x f'(x_j^n) + 2\Delta x^2 f''(x_j^n) - \frac{4\Delta x^3}{3} f'''(x_j^n) + \frac{2\Delta x^4}{3} f^{IV}(x_j^n) - O(\Delta x^5)$$
(12)

 \rightarrow Se realiza una matriz tal que las columnas corresponden a $\Delta x f'$, $\Delta x^2 f''$, $\Delta x^3 f'''$, $\Delta x^4 f^{IV}$ respectivamente. De la misma forma a, b, c, d, e corresponden a 8, 9, 10, 11, 12 respectivamente.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & a \\ 1 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{24} & b \\ 1 & 2 & 2 & \frac{4}{3} & \frac{2}{3} & c \\ 1 & -1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{24} & d \\ 1 & -2 & 2 & -\frac{4}{3} & \frac{2}{3} & e \end{pmatrix}$$

Al reducir la matriz por medio de wolfram se obtiene

$$f'(x_j^n) = \frac{8f(x_{j+1}^n) - f(x_{j+2}^n) - 8f(x_{j-1}^n) + f(x_{j-2}^n)}{12\Delta x} + O(\Delta x^4)$$
(13)

$$f''(x_j^n) = \frac{-30f(x_j^n) + 16f(x_{j+1}^n) - f(x_{j+2}^n) + 16f(x_{j-1}^n) - f(x_{j-2}^n)}{12\Delta x^2} + O(\Delta x^4)$$
 (14)

$$f'''(x_j^n) = \frac{-2f(x_{j+1}^n) + f(x_{j+2}^n) + 2f(x_{j-1}^n) - f(x_{j-2}^n)}{2\Delta x^3} + O(\Delta x^4)$$
(15)

$$f^{IV}(x_j^n) = \frac{6f(x_j^n) - 4f(x_{j+1}^n) + (x_{j+2}^n) - 4f(x_{j-1}^n) + f(x_{j-2}^n)}{\Delta x^4} + O(\Delta x^4)$$
(16)

4. Moleculas desbalanceadas hacia la izquierda

4.1. Segundo orden

$$f(x_i^n) = f(x_i^n) \tag{17}$$

$$f(x_{j+1}^n) = f(x_j^n) + \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) + O(\Delta x^3)$$
(18)

$$f(x_{j+2}^n) = f(x_j^n) + 2\Delta x f'(x_j^n) + \frac{4\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) + O(\Delta x^3)$$
(19)

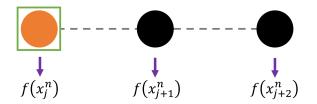


Figura 4: Molécula desbalanceada hacia la izquierda

 \rightarrow Al restar (4)·18-19

$$4 \cdot f(x_{j+1}^n) - f(x_{j+2}^n) = 3f(x_j^n) + 2\Delta x f'(x_j^n) + 3O(\Delta x^3)$$

$$f'(x_j^n) = \frac{4f(x_{j+1}^n) - f(x_{j+2}^n) - 3f(x_j^n)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$
(20)

 \rightarrow Al restar (2)·18-19

$$2 \cdot f(x_{i+1}^n) - f(x_{i+2}^n) = f(x_i^n) - \Delta x^2 f''(x_i^n) + O(\Delta x^4)$$

$$f''(x_j^n) = \frac{f(x_{j+2}^n) - 2f(x_{j+1}^n) + f(x_j^n)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$
 (21)

4.2. Cuarto orden

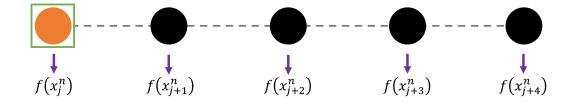


Figura 5: Molécula desbalanceada hacia la izquierda

$$f(x_j^n) = f(x_j^n) \tag{22}$$

$$f(x_{j+1}^n) = f(x_j^n) + \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) + \frac{\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5)$$
 (23)

$$f(x_{j+2}^n) = f(x_j^n) + 2\Delta x f'(x_j^n) + 2\Delta x^2 f''(x_j^n) + \frac{4\Delta x^3}{3} f'''(x_j^n) + \frac{2\Delta x^4}{3} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5)$$
 (24)

$$f(x_{j+3}^n) = f(x_j^n) + 3\Delta x f'(x_j^n) + \frac{9\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) + \frac{27\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{81\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5)$$
 (25)

$$f(x_{j+4}^n) = f(x_j^n) + 4\Delta x f'(x_j^n) + \frac{16\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) + \frac{64\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{256\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5)$$
 (26)

 \rightarrow Se realiza una matriz tal que las columnas corresponden a $\Delta x f'$, $\Delta x^2 f''$, $\Delta x^3 f'''$, $\Delta x^4 f^{IV}$ respectivamente. De la misma forma a, b, c, d, e corresponden a 22, 23, 24, 25, 26 respectivamente.

$$\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & a \\
1 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{24} & b \\
1 & 2 & 2 & \frac{4}{3} & \frac{2}{3} & c \\
1 & 3 & \frac{9}{2} & \frac{9}{2} & \frac{27}{8} & d \\
1 & 4 & 8 & \frac{32}{3} & \frac{32}{3} & e
\end{pmatrix}$$

Al reducir la matriz por medio de wolfram se obtiene

$$f'(x_j^n) = \frac{-25f(x_j^n) + 48f(x_{j+1}^n) - 36f(x_{j+2}^n) + 16f(x_{j+3}^n) - 3f(x_{j+4}^n)}{12\Delta x} + O(\Delta x^4)$$
(27)

$$f''(x_j^n) = \frac{35f(x_j^n) - 104f(x_{j+1}^n) + 114f(x_{j+2}^n) - 56f(x_{j+3}^n) + 11f(x_{j+4}^n)}{12\Delta x^2} + O(\Delta x^4)$$
(28)

$$f'''(x_j^n) = \frac{-5f(x_j^n) + 18f(x_{j+1}^n) - 24f(x_{j+2}^n) + 14f(x_{j+3}^n) - 3f(x_{j+4}^n)}{2\Delta x^3} + O(\Delta x^4)$$
(29)

$$f^{IV}(x_j^n) = \frac{f(x_j^n) - 4f(x_{j+1}^n) + 6f(x_{j+2}^n) - 4f(x_{j+3}^n) + f(x_{j+4}^n)}{\Delta x^4} + O(\Delta x^4)$$
(30)

5. Moleculas desbalanceadas hacia la derecha

5.1. Segundo orden

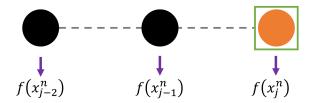


Figura 6: Molécula desbalanceada hacia la derecha

$$f(x_i^n) = f(x_i^n) \tag{31}$$

$$f(x_{j-1}^n) = f(x_j^n) - \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) - O(\Delta x^3)$$
(32)

$$f(x_{i-2}^n) = f(x_i^n) - 2\Delta x f'(x_i^n) + 2\Delta x^2 f''(x_i^n) - O(\Delta x^3)$$
(33)

 \rightarrow Al restar $(4) \cdot 23 - 24$

$$4f(x_{j-1}^n) - f(x_{j-2}^n) = 3f(x_j^n) - 2\Delta x f'(x_j^n) + \Delta x^2 f''(x_j^n) + O(\Delta x^3)$$

$$f'(x_j^n) = \frac{f(x_{j-2}^n) - 4f(x_{j-1}^n) + 3f(x_j^n)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$
(34)

 \rightarrow Al restar $(2) \cdot 23 - 24$

$$2f(x_{i-1}^n) - f(x_{i-2}^n) = f(x_i^n) - \Delta x^2 f''(x_i^n) + O(\Delta x^4)$$

$$f''(x_j^n) = \frac{f(x_{j-2}^n) - 2f(x_{j-1}^n) + f(x_j^n)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$
(35)

5.2. Cuarto orden

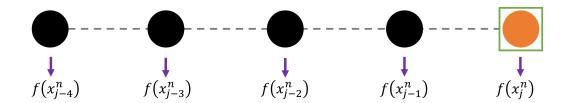


Figura 7: Molécula desbalanceada hacia la derecha

$$f(x_i^n) = f(x_i^n) \tag{36}$$

$$f(x_{j-1}^n) = f(x_j^n) - \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) - \frac{\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5)$$
(37)

$$f(x_{j-2}^n) = f(x_j^n) - 2\Delta x f'(x_j^n) + 2\Delta x^2 f''(x_j^n) - \frac{4\Delta x^3}{3} f'''(x_j^n) + \frac{2\Delta x^4}{3} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5)$$
(38)

$$f(x_{j-3}^n) = f(x_j^n) - 3\Delta x f'(x_j^n) + \frac{9\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) - \frac{27\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{81\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5)$$
(39)

$$f(x_{j-4}^n) = f(x_j^n) - 4\Delta x f'(x_j^n) + \frac{16\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) - \frac{64\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{256\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5)$$
(40)

 \rightarrow Se realiza una matriz tal que las columnas corresponden a $\Delta x f'$, $\Delta x^2 f''$, $\Delta x^3 f'''$, $\Delta x^4 f^{IV}$ respectivamente. De la misma forma a, b, c, d, e corresponden a 36, 37, 38, 39, 40 respectivamente.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & a \\ 1 & -1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{24} & b \\ 1 & -2 & 2 & -\frac{4}{3} & \frac{2}{3} & c \\ 1 & -3 & \frac{9}{2} & -\frac{9}{2} & \frac{27}{8} & d \\ 1 & -4 & 8 & -\frac{32}{3} & \frac{32}{3} & e \end{pmatrix}$$

Al reducir la matriz por medio de wolfram se obtiene

$$f'(x_j^n) = \frac{25f(x_j^n) - 48f(x_{j+1}^n) + 36f(x_{j+2}^n) - 16f(x_{j+3}^n) + 3f(x_{j+4}^n)}{12\Delta x} + O(\Delta x^4)$$
(41)

$$f''(x_j^n) = \frac{35f(x_j^n) - 104f(x_{j+1}^n) + 114f(x_{j+2}^n) - 56f(x_{j+3}^n) + 11f(x_{j+4}^n)}{12\Delta x^2} + O(\Delta x^4)$$
(42)

$$f'''(x_j^n) = \frac{5f(x_j^n) - 18f(x_{j+1}^n) + 24f(x_{j+2}^n) - 14f(x_{j+3}^n) + 3f(x_{j+4}^n)}{2\Delta x^3} + O(\Delta x^4)$$
(43)

$$f^{IV}(x_j^n) = \frac{f(x_j^n) - 4f(x_{j+1}^n) + 6f(x_{j+2}^n) - 4f(x_{j+3}^n) + f(x_{j+4}^n)}{\Delta x^4} + O(\Delta x^4)$$
(44)

6. Esquemas en diferencias finitas

Ahora se especificarán dos tipos de esquemas en diferencias finitas, el esquema Leapfrog y el Lax-Wendroff haciendo uso de un criterio conocido como criterio de estabilidad. Dicho criterio está basado en un análisis de Von-Neumann el cual no toma en cuenta las condiciones de frontera; este criterio me relaciona un punto de la malla con 45; en donde k es el número de onda, n la variación temporal, j la variación espacial y ξ es el factor de amplificación, de la siguiente manera

$$u_j^n = \xi^n e^{ikx_j} \tag{45}$$

El criterio también plantea que para que un sistema sea estable este debe cumplir que:

$$|\xi|^2 \le 1 \tag{46}$$

Para todos estos procesos es importante tener en cuenta la condición de Courant-Friedrich-Lewy, que me establece que para un α se cumple $|\alpha| \leq 1$, siendo α una representación de $\frac{v\Delta t}{\Delta x}$, expresión que se encontrará muy seguido al momento de realizar los esquemas.

6.1. Esquema Leapfrog

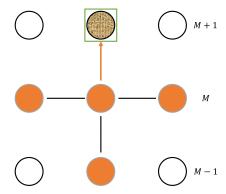


Figura 8: Malla de tres niveles de tiempo, dos de ellos necesarios para obtener la solución para un punto ubicado en M+1

Para este esquema se escogerán dos niveles de tiempo como lo muestra la figura 8, de esta forma se obtiene la siguiente expresión:

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - \alpha(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + O(\Delta t^3, \Delta x^2 \Delta t)$$
(47)

De forma que en 47 se puede sustituir teniendo en cuenta la expresión 45 de la siguiente manera:

$$\xi^{n+1}e^{ikx_j} = \xi^{n-1}e^{ikx_j} - \alpha(\xi^n e^{ikx_{j+1}} - \xi^n e^{ikx_{j-1}})$$

$$\xi = \xi^{-1} - \alpha (e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}) = \xi^{-1} - i\alpha sin(k\Delta x)$$

$$\xi^2 - 1 + 2i\alpha\xi\sin(k\Delta x) = 0$$

Como la expresión finalmente quedó reducida en una ecuación cuadrática se puede hacer uso de la fórmula cuadrática para obtener el valor de ξ , obteniendo entonces el siguiente resultado:

$$\xi = -i\alpha sin(k\Delta x) \pm \sqrt{1 - \alpha^2 sen^2(k\Delta x)}$$
(48)

Con esto ya es posible guiarnos con lo planteado en el criterio de estabilidad, el cual me dice que si la norma de ξ al cuadrado es menor o igual a 1 es estable, tal como se definió en la ecuación 46. Como estamos trabajando en variable compleja entonces $|\xi|^2 = \xi \xi^*$ por lo que obtenemos lo siguiente:

$$|\xi|^2 = 1\tag{49}$$

Con esto se puede concluir entonces que teniendo en cuenta el criterio de estabilidad el sistema por medio del esquema de Leapfrog es estable. Sin embargo, para usar este esquema hay que saber los valores de u_j^{n+1} y u_j^n , por lo que se creó otro esquema, el cual será descrito a continuación.

6.2. Esquema Lax-Wendroff

Para poder llegar a la expresión correspondiente al esquema Lax-Wendroff es necesario primero hacer uso del esquema Lax-Friedrich, luego evaluar las cantidades y finalmente usar el esquema Leapfrog teniendo en cuenta que en ambos esquemas se realizarán saltos de $\frac{\Delta t}{2}$ (ver figura 9).

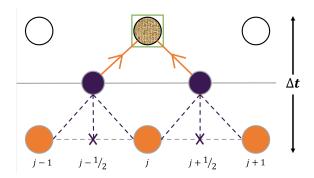


Figura 9: Malla con dos niveles temporales, se hace uso de los puntos ubicados en la mitad entre cada punto de la malla.

Primero haciendo uso del esquema Lax-Friedrich tenemos

$$u_{j\pm 1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left(u_j^n + u_{j\pm 1}^n \right) \mp \frac{\alpha}{2} \left(u_{j\pm 1}^n + u_j^n \right)$$
 (50)

Ahora haciendo uso del esquema Leapfrog tenemos

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \alpha \left(u_{j+1/2}^{n+1/2} - u_{j-1/2}^{n+1/2} \right)$$
 (51)

Entonces reemplazando 50 y 51, obtenemos la siguiente expresión:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\alpha}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{\alpha^2}{2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$
(52)

De forma que 52 se puede sustituir por medio de la expresión 45 de la siguiente manera:

$$\xi^{n+1}e^{ikx_j} = \xi^n e^{ikx_j} - \frac{\alpha}{2} (\xi^n e^{ikx_{j+1}} - \xi^n e^{ikx_{j-1}}) + \frac{\alpha^2}{2} (\xi^n e^{ikx_{j+1}} - 2\xi^n e^{ikx_j} + \xi^n e^{ikx_{j-1}})$$

$$\xi = 1 - \frac{\alpha}{2} (e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}) + \frac{\alpha^2}{2} (e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x})$$

$$\xi = 1 - \alpha^2 + \alpha^2 cos(k\Delta x) - i\alpha sen(k\Delta x)$$

Con esto nos podemos guiar de nuevo con lo planteado en el criterio de estabilidad (46), y como estamos trabajando en variable compleja entonces:

$$|\xi|^2 = 1 - 2\alpha^2, \quad \alpha \le 1$$

$$|\xi|^2 \le 1 \tag{53}$$

De acuerdo a esto, se puede concluir que teniendo en cuenta el criterio de estabilidad, el sistema por medio del esquema de Lax-Wendroff es estable e incluso más estable que el esquema Leapfrog.

Referencias

[1] Q. Kong and T. Siauw. Python programming and numerical methods a guide for engineers and scientists, chapter 23. Academic press, 2021.