



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

Física Computacional

DIFERENCIAS FINITAS DE SEGUNDO Y CUARTO ORDEN

Brayan Rodolfo Barajas Ochoa - 2170688

*Escuela de Física
Universidad Industrial de Santander
Bucaramanga, Colombia*

Índice

1. Introducción	1
1.1. Discretización del espacio-tiempo	1
2. Aproximación de segundo orden	2
2.1. Moléculas centradas	2
2.2. Molécula desbalanceada hacia la izquierda	3
2.3. Molécula desbalanceada hacia la derecha	4
3. Aproximación de cuarto orden	4
3.1. Molécula centrada	4
3.2. Molécula desbalanceada hacia la izquierda	6
3.3. Molécula desbalanceada hacia la derecha	7
4. Cálculo de estabilidad para esquemas en diferencias finitas	8
4.1. Esquema Leapfrog	9
4.2. Esquema Lax-Wendroff	9

1. Introducción

1.1. Discretización del espacio-tiempo

Para aplicar el método de diferencias finitas se realiza una discretización del espacio-tiempo tal como se muestra en la figura 1, por medio de una malla.

El método de diferencias finitas hace uso de las series de Taylor para expandir función alrededor de n cantidad de puntos distintos con pequeños diferenciales de distancia y de tiempo, Δx y Δt respectivamente, como se ve en la figura 1. La función se expande a partir de un determinado punto; sin embargo, se pueden presentar varios casos: molécula centralizada, molécula desbalanceada a la izquierda y a la derecha.

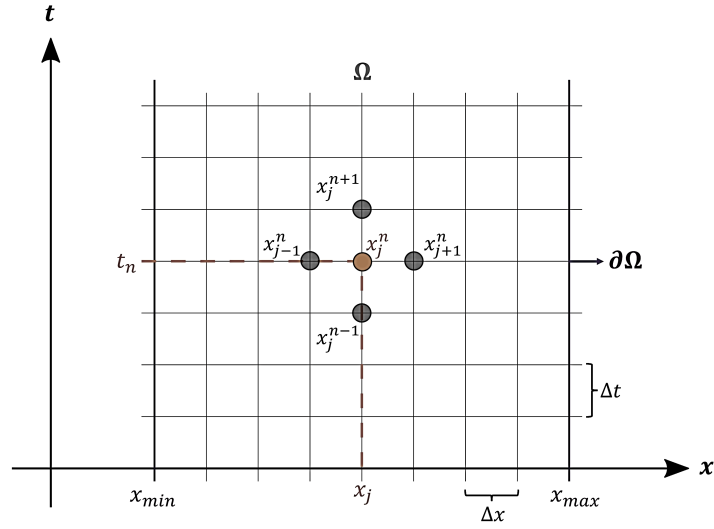


Figura 1: Discretización del espacio-tiempo.

2. Aproximación de segundo orden

2.1. Moléculas centradas

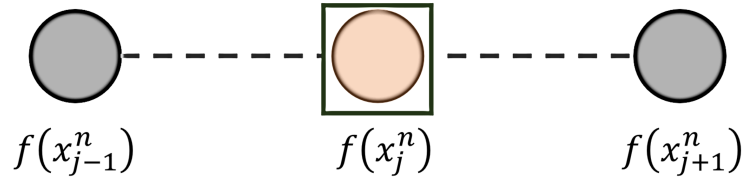


Figura 2: Molécula centrada

$$f(x_j^n) = f(x_j^n) \quad (1)$$

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

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

→ Restando 2-3

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

→ Sumando 2+3

$$f(x_{j+1}^n) + f(x_{j-1}^n) = 2f(x_j^n) + \Delta x^2 f''(x_j^n) + O(\Delta x^4) \quad (5)$$

2.1: Aproximación de segundo orden para molécula centrada.

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

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

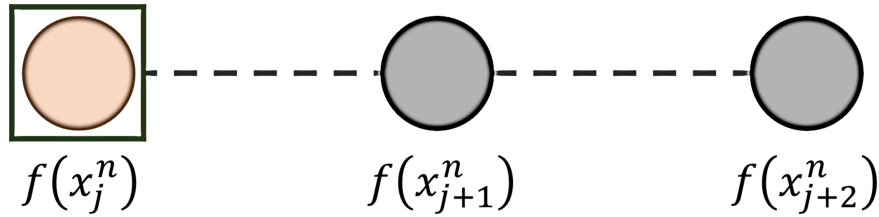
2.2. Molécula desbalanceada hacia la izquierda

Figura 3: Molécula desbalanceada hacia la izquierda

$$f(x_j^n) = f(x_j^n) \quad (8)$$

$$f(x_{j+1}^n) = f(x_j^n) + \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) + O(\Delta x^3) \quad (9)$$

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

→ Restando (4)·9-10

$$4 \cdot f(x_{j+1}^n) - f(x_{j+2}^n) = 3f(x_j^n) + 2\Delta x f'(x_j^n) + 3O(\Delta x^3) \quad (11)$$

→ Restando (2)·9-10

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

2.2: Aproximación de segundo orden para molécula a la izquierda.

$$f'(x_j^n) = \frac{4f(x_{j+1}^n) - f(x_{j+2}^n) - 3f(x_j^n)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (13)$$

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

2.3. Molécula desbalanceada hacia la derecha

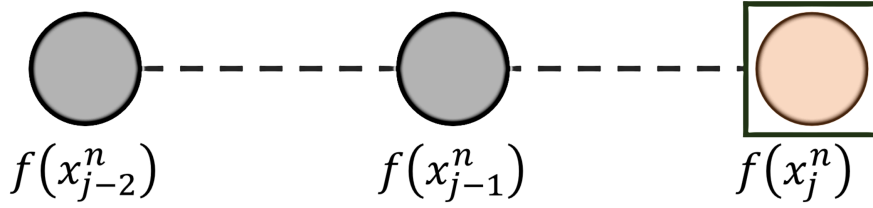


Figura 4: Molécula desbalanceada hacia la derecha

$$f(x_j^n) = f(x_j^n) \quad (15)$$

$$f(x_{j-1}^n) = f(x_j^n) - \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) - O(\Delta x^3) \quad (16)$$

$$f(x_{j-2}^n) = f(x_j^n) - 2\Delta x f'(x_j^n) + 2\Delta x^2 f''(x_j^n) - O(\Delta x^3) \quad (17)$$

→ Restando (4) · 32 – 33

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

→ Restando (2) · 32 – 33

$$2f(x_{j-1}^n) - f(x_{j-2}^n) = f(x_j^n) - \Delta x^2 f''(x_j^n) + O(\Delta x^4) \quad (19)$$

2.3: Aproximación de segundo orden para molécula a la derecha.

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

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

3. Aproximación de cuarto orden

3.1. Molécula centrada

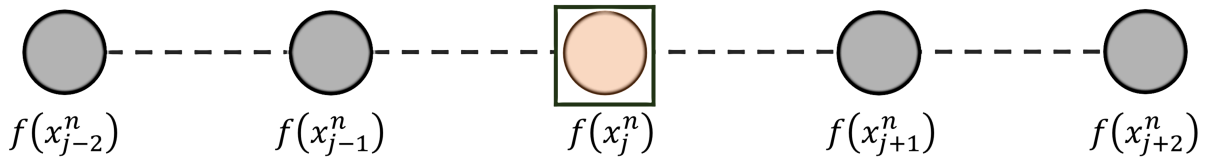


Figura 5: Molécula centrada

$$f(x_j^n) = f(x_j^n) \quad (22)$$

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

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

$$f(x_{j-1}^n) = f(x_j^n) - \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) - \frac{\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) - O(\Delta x^5) \quad (25)$$

$$f(x_{j-2}^n) = f(x_j^n) - 2\Delta x f'(x_j^n) + 2\Delta x^2 f''(x_j^n) - \frac{4\Delta x^3}{3} f'''(x_j^n) + \frac{2\Delta x^4}{3} f^{IV}(x_j^n) - O(\Delta x^5) \quad (26)$$

→ 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.

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & a \\ 1 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{24} & b \\ 1 & 2 & 2 & \frac{4}{3} & \frac{2}{3} & c \\ 1 & -1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{24} & d \\ 1 & -2 & 2 & -\frac{4}{3} & \frac{2}{3} & e \end{array} \right)$$

Al resolver el sistema utilizando wolfram, se obtiene:

3.1: Aproximación de cuarto orden para molécula centrada.

$$f'(x_j^n) = \frac{8f(x_{j+1}^n) - f(x_{j+2}^n) - 8f(x_{j-1}^n) + f(x_{j-2}^n)}{12\Delta x} + O(\Delta x^4) \quad (27)$$

$$f''(x_j^n) = \frac{-30f(x_j^n) + 16f(x_{j+1}^n) - f(x_{j+2}^n) + 16f(x_{j-1}^n) - f(x_{j-2}^n)}{12\Delta x^2} + O(\Delta x^4) \quad (28)$$

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

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

3.2. Molécula desbalanceada hacia la izquierda

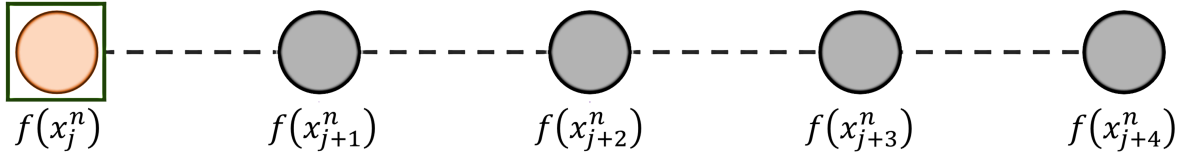


Figura 6: Molécula desbalanceada hacia la izquierda

$$f(x_j^n) = f(x_j^n) \quad (31)$$

$$f(x_{j+1}^n) = f(x_j^n) + \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) + \frac{\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5) \quad (32)$$

$$f(x_{j+2}^n) = f(x_j^n) + 2\Delta x f'(x_j^n) + 2\Delta x^2 f''(x_j^n) + \frac{4\Delta x^3}{3} f'''(x_j^n) + \frac{2\Delta x^4}{3} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5) \quad (33)$$

$$f(x_{j+3}^n) = f(x_j^n) + 3\Delta x f'(x_j^n) + \frac{9\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) + \frac{27\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{81\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5) \quad (34)$$

$$f(x_{j+4}^n) = f(x_j^n) + 4\Delta x f'(x_j^n) + \frac{16\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) + \frac{64\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{256\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5) \quad (35)$$

→ 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 [31](#), [32](#), [33](#), [34](#), [35](#) respectivamente.

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & a \\ 1 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{24} & b \\ 1 & 2 & 2 & \frac{4}{3} & \frac{2}{3} & c \\ 1 & 3 & \frac{9}{2} & \frac{9}{2} & \frac{27}{8} & d \\ 1 & 4 & 8 & \frac{32}{3} & \frac{32}{3} & e \end{array} \right)$$

Al resolver el sistema por medio de wolfram se obtiene:

3.2: Aproximación de cuarto orden para molécula a la izquierda.

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

$$f''(x_j^n) = \frac{35f(x_j^n) - 104f(x_{j+1}^n) + 114f(x_{j+2}^n) - 56f(x_{j+3}^n) + 11f(x_{j+4}^n)}{12\Delta x^2} + O(\Delta x^4) \quad (37)$$

$$f'''(x_j^n) = \frac{-5f(x_j^n) + 18f(x_{j+1}^n) - 24f(x_{j+2}^n) + 14f(x_{j+3}^n) - 3f(x_{j+4}^n)}{2\Delta x^3} + O(\Delta x^4) \quad (38)$$

$$f^{IV}(x_j^n) = \frac{f(x_j^n) - 4f(x_{j+1}^n) + 6f(x_{j+2}^n) - 4f(x_{j+3}^n) + f(x_{j+4}^n)}{\Delta x^4} + O(\Delta x^4) \quad (39)$$

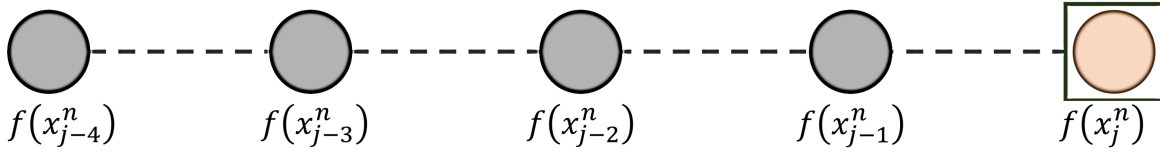
3.3. Molécula desbalanceada hacia la derecha

Figura 7: Molécula desbalanceada hacia la derecha

$$f(x_j^n) = f(x_j^n) \quad (40)$$

$$f(x_{j-1}^n) = f(x_j^n) - \Delta x f'(x_j^n) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) - \frac{\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5) \quad (41)$$

$$f(x_{j-2}^n) = f(x_j^n) - 2\Delta x f'(x_j^n) + 2\Delta x^2 f''(x_j^n) - \frac{4\Delta x^3}{3} f'''(x_j^n) + \frac{2\Delta x^4}{3} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5) \quad (42)$$

$$f(x_{j-3}^n) = f(x_j^n) - 3\Delta x f'(x_j^n) + \frac{9\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) - \frac{27\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{81\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5) \quad (43)$$

$$f(x_{j-4}^n) = f(x_j^n) - 4\Delta x f'(x_j^n) + \frac{16\Delta x^2}{2} f''(x_j^n) - \frac{64\Delta x^3}{6} f'''(x_j^n) + \frac{256\Delta x^4}{24} f^{IV}(x_j^n) + O(\Delta x^5) \quad (44)$$

→ 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 40, 41, 42, 43, 44 respectivamente.

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & a \\ 1 & -1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{24} & b \\ 1 & -2 & 2 & -\frac{4}{3} & \frac{2}{3} & c \\ 1 & -3 & \frac{9}{2} & -\frac{9}{2} & \frac{27}{8} & d \\ 1 & -4 & 8 & -\frac{32}{3} & \frac{32}{3} & e \end{array} \right)$$

Al resolver el sistema por medio de Wolfram, se obtiene:

3.3: Aproximación de cuarto orden para molécula a la derecha.

$$f'(x_j^n) = \frac{25f(x_j^n) - 48f(x_{j+1}^n) + 36f(x_{j+2}^n) - 16f(x_{j+3}^n) + 3f(x_{j+4}^n)}{12\Delta x} + O(\Delta x^4) \quad (45)$$

$$f''(x_j^n) = \frac{35f(x_j^n) - 104f(x_{j+1}^n) + 114f(x_{j+2}^n) - 56f(x_{j+3}^n) + 11f(x_{j+4}^n)}{12\Delta x^2} + O(\Delta x^4) \quad (46)$$

$$f'''(x_j^n) = \frac{5f(x_j^n) - 18f(x_{j+1}^n) + 24f(x_{j+2}^n) - 14f(x_{j+3}^n) + 3f(x_{j+4}^n)}{2\Delta x^3} + O(\Delta x^4) \quad (47)$$

$$f^{IV}(x_j^n) = \frac{f(x_j^n) - 4f(x_{j+1}^n) + 6f(x_{j+2}^n) - 4f(x_{j+3}^n) + f(x_{j+4}^n)}{\Delta x^4} + O(\Delta x^4) \quad (48)$$

4. Cálculo de estabilidad para esquemas en diferencias finitas

Ahora se especificarán dos tipos de esquemas en diferencias finitas, el esquema Leapfrog y el Lax-Wendroff junto con su criterio de estabilidad, el cual está basado en un análisis de Von-Neumann sin considerar las condiciones de frontera; este criterio relaciona un punto de la malla con 49; 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:

$$u_j^n = \xi^n e^{ikx_j} \quad (49)$$

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

$$|\xi|^2 \leq 1 \quad (50)$$

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

4.1. Esquema Leapfrog

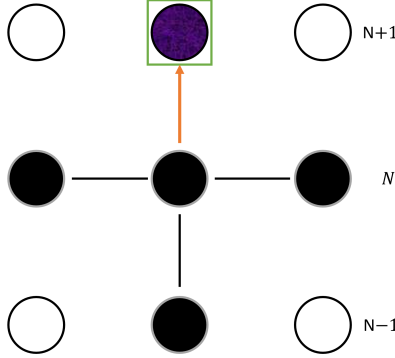


Figura 8: Malla de tres niveles de tiempo, requiriendo dos niveles anteriores para obtener la solución para un punto ubicado en $M + 1$

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

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - \alpha(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + O(\Delta t^3, \Delta x^2 \Delta t) \quad (51)$$

De forma que en 51 se puede sustituir teniendo en cuenta la expresión 49 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:

$$\xi = -i\alpha \sin(k\Delta x) \pm \sqrt{1 - \alpha^2 \sin^2(k\Delta x)} \quad (52)$$

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 50. Como estamos trabajando en variable compleja entonces $|\xi|^2 = \xi \xi^*$ por lo que obtenemos lo siguiente:

$$|\xi|^2 = 1 \quad (53)$$

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

4.2. 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).

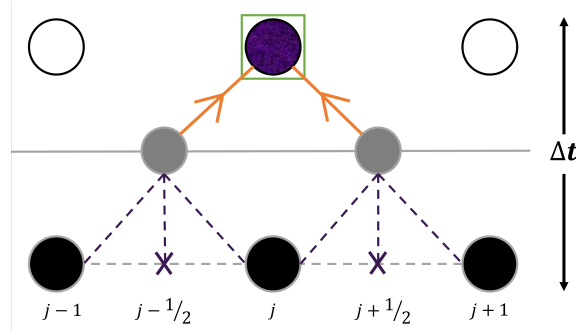


Figura 9: Malla con dos niveles temporales, se hace uso de los puntos ubicados en la mitad entre cada punto de la malla.

- Primero haciendo uso del esquema Lax-Friedrich se tiene:

$$u_{j\pm 1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2} (u_j^n + u_{j\pm 1}^n) \mp \frac{\alpha}{2} (u_{j\pm 1}^n + u_j^n) \quad (54)$$

- Ahora haciendo uso del esquema Leapfrog se tiene:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \alpha (u_{j+1/2}^{n+1/2} - u_{j-1/2}^{n+1/2}) \quad (55)$$

Entonces reemplazando 54 y 55, se obtiene la siguiente expresión:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\alpha}{2} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{\alpha^2}{2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (56)$$

De forma que 56 se puede sustituir por medio de la expresión 49 de la siguiente manera:

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

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

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

Con esto nos podemos guiar de nuevo con lo planteado en el criterio de estabilidad (50), obteniendo:

$$|\xi|^2 = 1 - 2\alpha^2, \quad 0 < \alpha \leq 1$$

$$|\xi|^2 \leq 1 \quad (57)$$

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 para $0 < \alpha \leq 1$.