

METODOS DE DIFERENCIAS FINITAS

CI71D Modelación Numérica en Ingeniería Hidráulica y Ambiental

Profs. C. Espinoza y Y. Niño

Semestre Primavera 2001

1. INTRODUCCION

En este capítulo se desarrolla el concepto básico, y las técnicas necesarias, para la formulación de una representación de diferencias finitas. En este enfoque, el problema en un dominio continuo se "discretiza" de tal manera que las variables dependientes existen sólo en puntos discretos. Las derivadas se aproximan mediante diferencias, lo que da origen a una representación algebraica de las ecuaciones diferenciales parciales (EDPs). De esta manera, un problema de cálculo se transforma en uno de álgebra matricial.

La naturaleza del sistema algebraico resultante depende del carácter del problema original. Problemas en equilibrio resultan generalmente en un sistema de ecuaciones algebraicas que deben ser resueltos simultáneamente a través del dominio de solución, en conjunto con las condiciones de borde especificadas. Problemas temporales dan origen a ecuaciones algebraicas que deben ser resueltas secuencialmente.

2. DIFERENCIAS FINITAS

Uno de los primeros pasos o etapas para establecer un esquema de diferencias finitas para la resolución de una EDP es el reemplazo del dominio continuo del problema original por una malla o grilla de diferencias finitas. A modo de ejemplo, supongamos que deseamos resolver una EDP para la cual $u(x, y)$ es la variable dependiente en el dominio rectangular $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$. En este caso podemos establecer una grilla tal que $u(x, y)$ se reemplaza por $u(i \cdot \Delta x, j \cdot \Delta y)$ o $u_{i,j}$. De esta manera, si observamos la Figura 1 y nos fijamos que la posición $u_{i,j}$ corresponde a $u(x_0, y_0)$ podemos escribir:

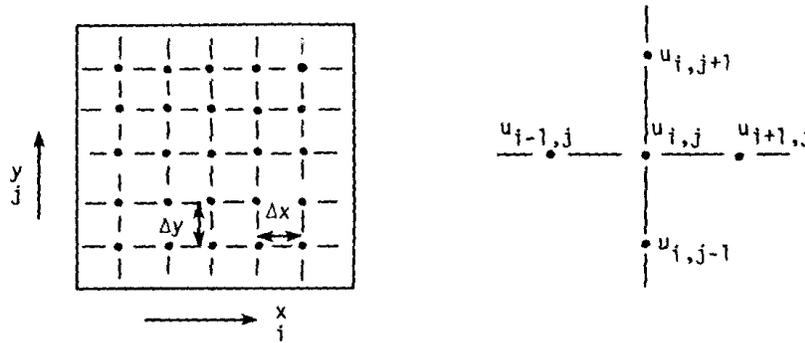
$$\begin{aligned}u_{i+1,j} &= u(x_0 + \Delta x, y_0) & u_{i-1,j} &= u(x_0 - \Delta x, y_0) \\u_{i,j+1} &= u(x_0, y_0 + \Delta y) & u_{i,j-1} &= u(x_0, y_0 - \Delta y)\end{aligned}$$

La idea de una representación de diferencias finitas para una derivada puede ser introducida recordando la definición de la derivada de la función $u(x, y)$ en la posición $x=x_0$ y $y=y_0$:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x_0, y_0} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x_0 + \Delta x, y_0) - u(x_0, y_0)}{\Delta x} \quad (1)$$

La aproximación de diferencias puede ser escrita de una manera más formal a través del uso de una expansión en serie de Taylor. Al desarrollar una expansión en serie de Taylor para $u(x_0 + \Delta x, y_0)$ en torno a (x_0, y_0) se obtiene:

Figura 1
Típica Grilla de Diferencias Finitas



$$\begin{aligned}
 u(x_0 + \Delta x, y_0) = u(x_0, y_0) + \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} \cdot \Delta x + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_0, y_0} \cdot \frac{(\Delta x)^2}{2!} + \dots + \\
 + \frac{\partial^{n-1} u}{\partial x^{n-1}} \Big|_{x_0, y_0} \cdot \frac{(\Delta x)^{n-1}}{(n-1)!} + \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \Big|_{\xi, y_0} \cdot \frac{(\Delta x)^n}{n!}
 \end{aligned} \tag{2}$$

con:

$$x_0 \leq \xi \leq x_0 + \Delta x$$

en donde el último término se denomina el “resto de la expansión”. De esta manera, podemos formar la diferencia “hacia adelante” reordenando la ecuación (2):

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} = \frac{u(x_0 + \Delta x, y_0) - u(x_0, y_0)}{\Delta x} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_0, y_0} \cdot \frac{\Delta x}{2!} - \dots \tag{3}$$

Cambiando a una notación indicial tenemos:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + \text{Error de Truncación} \tag{4}$$

El error de truncación (*E.T.*) es la diferencia entre la derivada parcial y su representación como diferencia finita. El comportamiento límite del error de truncación puede ser caracterizado utilizando la notación de orden (*O*), con lo que podemos escribir:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x) \tag{5}$$

donde $O(\Delta x)$ tiene un significado bien preciso, de tal manera que al escribir lo anterior se está indicando que:

$$|E.T.| \leq K \cdot |\Delta x| \quad \text{para } \Delta x \rightarrow 0$$

Un número infinito de representaciones de diferencias finitas puede ser encontrado para la derivada de u . Por ejemplo, si expandimos “hacia atrás”:

$$u(x_0 - \Delta x, y_0) = u(x_0, y_0) - \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_0 \cdot \Delta x + \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_0 \cdot \frac{(\Delta x)^2}{2!} + \dots + \left. \frac{\partial^{n-1} u}{\partial x^{n-1}} \right|_0 \cdot \frac{(\Delta x)^{n-1}}{(n-1)!} + \left. \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right|_{\xi} \cdot \frac{(\Delta x)^n}{n!} \quad (6)$$

podemos obtener la representación de diferencias “hacia atrás”:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (7)$$

Si restamos las ecuaciones (2) y (6), y reordenamos, podemos obtener la diferencia central:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2 \cdot \Delta x} + O(\Delta x)^2 \quad (8)$$

Si sumamos las ecuaciones (2) y (6), y reordenamos, podemos obtener una aproximación central para la segunda derivada:

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2 \cdot u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2 \quad (9)$$

En muchas aplicaciones prácticas es conveniente utilizar operadores de diferencias para representar los esquemas de diferencias finitas cuando formas particulares son usadas en forma repetitiva. De esta forma se puede definir el operador “hacia adelante” como:

$$\Delta_x u_{i,j} = u_{i+1,j} - u_{i,j} \quad (10)$$

De esta manera, es posible escribir la aproximación para la primera derivada de u en la dirección x como:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x) = \frac{\Delta_x u_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (11)$$

En forma similar es posible definir el operador “hacia atrás” como:

$$\nabla_x u_{i,j} = u_{i,j} - u_{i-1,j} \quad (12)$$

Con lo que la primera derivada de u se puede escribir como:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + O(\Delta x) = \frac{\nabla_x u_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (13)$$

Un resumen con distintos operadores de diferencias finitas se presenta en la Tabla 1, mientras que en la Tabla 2 se presentan aproximaciones de diferencias finitas en una dimensión.

Tabla 1
Definición de Operadores de Diferencias Finitas

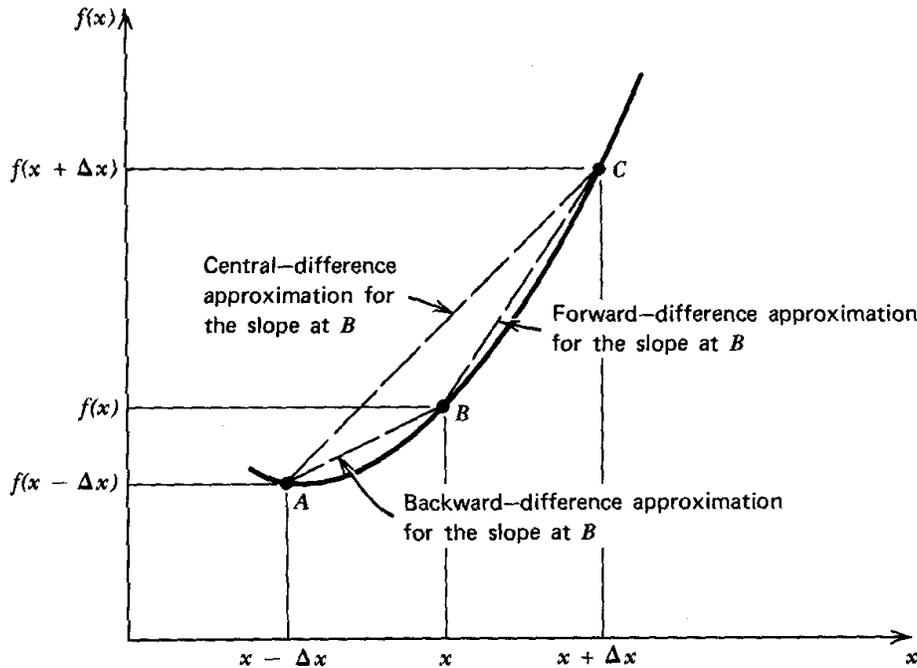
Operador	Símbolo	Representación
Diferencia hacia adelante	Δ	$\Delta_x u_{i,j} = u_{i+1,j} - u_{i,j}$
Diferencia hacia atrás	∇	$\nabla_x u_{i,j} = u_{i,j} - u_{i-1,j}$
Diferencia Central	δ	$\delta_x u_{i,j} = u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j}$
Desplazamiento	E	$E_x u_{i,j} = u_{i+1,j}$
Promedio	μ	$\mu_x u_{i,j} = \frac{u_{i+1/2,j} + u_{i-1/2,j}}{2}$
Diferenciación	D	$D_x u_{i,j} = \left. \frac{du}{dx} \right _{i,j}$

Tabla 2
Aproximaciones de Diferencias Finitas en 1D

Derivada	Aproximación de Diferencias Finitas	Orden del Error
$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right _i$	$\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$	$O(\Delta x)$
	$\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}$	$O(\Delta x)$
	$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2 \cdot \Delta x}$	$O(\Delta x)^2$
	$\frac{-u_{i+2} + 4 \cdot u_{i+1} - 3 \cdot u_i}{12 \cdot \Delta x}$	$O(\Delta x)^2$
	$\frac{-u_{i+2} + 8 \cdot u_{i+1} - 8 \cdot u_{i-1} + u_{i-2}}{12 \cdot \Delta x}$	$O(\Delta x)^3$
$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right _i$	$\frac{u_{i+1} - 2 \cdot u_i + u_{i-1}}{(\Delta x)^2}$	$O(\Delta x)^2$
	$\frac{-u_{i+2} + 16 \cdot u_{i+1} - 30 \cdot u_i + 16 \cdot u_{i-1} - u_{i-2}}{12 \cdot (\Delta x)^2}$	$O(\Delta x)^4$
$\left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right _i$	$\frac{u_{i+2} - 2 \cdot u_{i+1} + 2 \cdot u_{i-1} - u_{i-2}}{2 \cdot (\Delta x)^3}$	$O(\Delta x)^2$
$\left. \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right _i$	$\frac{u_{i+2} - 4 \cdot u_{i+1} + 6 \cdot u_i - 4 \cdot u_{i-1} + u_{i-2}}{(\Delta x)^4}$	$O(\Delta x)^2$

La Figura 2 muestra un esquema con la interpretación geométrica de las aproximaciones de diferencias finitas hacia adelante, hacia atrás y central.

Figura 2
Interpretación Geométrica de Derivadas



3. METODOS PARA OBTENER ECUACIONES DE DIFERENCIAS FINITAS

3.1 Series de Taylor

Supongamos que deseamos encontrar una representación de diferencias finitas para la derivada de la variable u con respecto a x , con un error de truncación de $O(\Delta x)^2$, usando a lo más los valores para $u_{i-2,j}$, $u_{i-1,j}$ y $u_{i,j}$. Con estas restricciones y objetivo es lógico utilizar expansiones en serie de Taylor para $u_{i-2,j}$ y $u_{i-1,j}$, expandiendo en torno a $u_{i,j}$:

$$u_{i-2,j} = u_{i,j} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} \cdot (2 \cdot \Delta x) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{i,j} \cdot \frac{(2 \cdot \Delta x)^2}{2!} - \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{\xi} \cdot \frac{(2 \cdot \Delta x)^3}{3!} + \dots \quad (14)$$

$$u_{i-1,j} = u_{i,j} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} \cdot \Delta x + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{i,j} \cdot \frac{(\Delta x)^2}{2!} - \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{\xi} \cdot \frac{(\Delta x)^3}{3!} + \dots \quad (15)$$

Un enfoque formal para obtener la formulación deseada requiere que las ecuaciones (14) y (15) sean multiplicadas por los parámetros a y b , respectivamente. Si posteriormente agregamos ambas ecuaciones obtenemos:

$$\begin{aligned}
a \cdot u_{i-2,j} + b \cdot u_{i-1,j} &= (a+b) \cdot u_{i,j} - \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} \cdot [(2 \cdot \Delta x) \cdot a + \Delta x \cdot b] + \\
&+ \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{i,j} \cdot \left[\frac{(2 \cdot \Delta x)^2}{2!} \cdot a + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \cdot b \right] - \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right|_{i,j} \cdot \left[\frac{(2 \cdot \Delta x)^3}{3!} \cdot a + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \cdot b \right] + \dots
\end{aligned} \tag{16}$$

Si desarrollamos esta ecuación obtenemos:

$$\begin{aligned}
a \cdot u_{i-2,j} + b \cdot u_{i-1,j} &= (a+b) \cdot u_{i,j} - \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} \cdot [2 \cdot a + b] \cdot \Delta x + \\
&+ \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{i,j} \cdot \left[2 \cdot a + \frac{b}{2} \right] \cdot (\Delta x)^2 - \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right|_{i,j} \cdot \left[\frac{4}{3} \cdot a + \frac{b}{6} \right] \cdot (\Delta x)^3 + \dots
\end{aligned} \tag{17}$$

Para obtener una aproximación como la requerida debemos imponer dos condiciones:

$$2 \cdot a + b = 1$$

$$2 \cdot a + \frac{b}{2} = 0$$

con lo cual se obtiene que $a = -1/2$ y $b = 2$. Si reemplazamos en la ecuación (17) y despejamos se tiene:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i-2,j} - 4 \cdot u_{i-1,j} + 3 \cdot u_{i,j}}{2 \cdot \Delta x} - \frac{1}{3} \cdot \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right|_{i,j} (\Delta x)^2 + \dots \tag{18}$$

lo que finalmente se puede escribir como:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i-2,j} - 4 \cdot u_{i-1,j} + 3 \cdot u_{i,j}}{2 \cdot \Delta x} + O(\Delta x)^2 + \dots \tag{19}$$

la que cumple con el objetivo y restricciones impuestas para su desarrollo.

3.2 Ajuste Polinomial

Muchas aplicaciones de ajuste polinomial son utilizadas comúnmente en problemas de fluidos y transporte de contaminantes. En algunos casos esta técnica se utiliza para desarrollar la representación completa de una EDP; sin embargo, es más comúnmente utilizada para el manejo de condiciones de borde.

Consideremos el problema de aproximar mediante diferencias finitas la ecuación de Laplace en dos dimensiones:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 \quad (20)$$

Supongamos que la relación de la temperatura, T, con las coordenadas x e y pueden ser expresados por un polinomio de grado dos, i.e.:

$$T(x, y_0) = a + b \cdot x + c \cdot x^2 \quad (21)$$

Por conveniencia, supongamos que el punto de coordenadas (i,j) se ubica en la posición x=0, y que Δx es constante. Con esto podemos escribir:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{i,j} = b$$

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{i,j} = 2 \cdot c$$

Los coeficientes a, b, y c pueden ser evaluados en términos de la temperatura en puntos específicos sobre una grilla regular, con separación Δx. Para hacer eso debemos tomar algunas decisiones acerca de puntos sobre la grilla. Por ejemplo supongamos que estamos trabajando con los puntos (i-1,j), (i,j), (i+1,j) los que se encuentran ubicados en las posiciones x=-Δx, x=0 y x=Δx, respectivamente. De esta manera obtenemos:

$$T(i-1, j) = T_{i-1,j} = a - b \cdot \Delta x + c \cdot (\Delta x)^2$$

$$T(i, j) = T_{i,j} = a$$

$$T(i+1, j) = T_{i+1,j} = a + b \cdot \Delta x + c \cdot (\Delta x)^2$$

Lo que permite escribir:

$$b = \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{T_{i+1,j} - T_{i-1,j}}{2 \cdot \Delta x} \quad (22)$$

$$c = \frac{1}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{T_{i+1,j} - 2 \cdot T_{i,j} + T_{i-1,j}}{2 \cdot (\Delta x)^2}$$

con lo que se puede escribir para la segunda derivada de T con respecto a x:

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{T_{i+1,j} - 2 \cdot T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} \quad (23)$$

4. REPRESENTACIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES POR DIFERENCIAS FINITAS

4.1 Error de Truncación

Como punto de partida en este estudio del error de truncación (*E.T.*) consideremos la ecuación de difusión:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (24)$$

Si utilizamos un esquema de diferencias hacia adelante para la derivada temporal y un esquema de diferencias centrales para la segunda derivada, podemos escribir la ecuación anterior como:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \alpha \cdot \frac{u_{i+1}^n - 2 \cdot u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (25)$$

Sin embargo, de la sección anterior debemos recordar que las aproximaciones hacia adelante y central tenían asociados errores de truncación de órdenes $O(h)$ y $O(h)^2$, respectivamente, donde h es la discretización correspondiente a la aproximación utilizada. Si incluimos el efecto del error de truncación debemos escribir:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} - \alpha \cdot \frac{u_{i+1}^n - 2 \cdot u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} + O(\Delta t) + O(\Delta x)^2 \quad (26)$$

En este caso el error de truncación es igual a: $O(\Delta t) + O(\Delta x)^2$ o también $O(\Delta t, (\Delta x)^2)$. El error de truncación asociado con todas las derivadas en una EDP debería ser obtenido por expansión alrededor del mismo punto (n : tiempo e i : espacio, en el ejemplo anterior).

El esquema de diferencias finitas presentado en la ecuación (24) se conoce comúnmente como *esquema explícito simple* para la Ecuación de Difusión. Un esquema *explícito* es aquel en el cual el término desconocido de la ecuación puede ser evaluado en término de otras cantidades conocidas. La ecuación (24) puede además ser escrita como un *esquema implícito*:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \alpha \cdot \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2 \cdot u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} \quad (27)$$

Al igual que el esquema explícito la aproximación (27) tiene un error de truncación $O(\Delta t, (\Delta x)^2)$.

4.2 Consistencia

La consistencia de una EDP se relaciona con el grado en el cual la representación de diferencias finitas aproxima a la EDP original. De acuerdo a la ecuación 3) la diferencia entre la derivada original y su aproximación de diferencias finitas se define como el error de truncación.

La representación por diferencias finitas de una EDP se dice consistente si se puede mostrar que la diferencia entre ambas desaparece en el caso que el tamaño de la grilla de aproximación, Δx , y el intervalo de tiempo, Δt , se reduce, i.e.:

$$\lim_{grilla \rightarrow 0} (EDP - EDF) = \lim_{grilla \rightarrow 0} (E.T.) = 0 \quad (28)$$

Un ejemplo de un esquema que no es consistente corresponde a la aproximación de DuFort-Frankel para la ecuación de Difusión, la que se puede escribir como:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \alpha \cdot \frac{u_{i+1}^n - u_i^{n+1} - u_i^{n-1} + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (29)$$

y que posee un error de truncación del tipo $O\left((\Delta t)^2, (\Delta x)^2, \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2\right)$. Este método funciona en forma correcta si se cumple que:

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right) = 0$$

Sin embargo, si ambos valores de discretización Δx y Δt se aproximan a cero a una tasa tal que:

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right) = \gamma$$

el esquema de DuFort-Frankel es consistente no con la ecuación de difusión, sino con la ecuación de tipo hiperbólico:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \alpha \cdot \gamma^2 \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (30)$$

4.3 Estabilidad

Estabilidad numérica es un concepto que se aplica en un sentido estricto sólo a problemas transientes. Un esquema numérico es estable si los errores de cualquier origen (redondeo, truncación, representación) no crecen desde un período transiente al siguiente. En un punto siguiente de este apunte se describe en mayor detalle un análisis de estabilidad para esquemas numéricos que aproximan EDP lineales.

4.4 Convergencia para Problemas Transientes

En forma general se tiene que si un esquema de aproximación es consistente y estable, es también convergente. En este sentido se tiene que en el caso que la grilla de aproximación se refina, la solución de la ecuación de diferencias finitas (EDF) se aproxima a la solución de la EDP original.

Teorema de Equivalencia de Lax. Si se tiene un problema de valor inicial que se encuentra "bien puesto", y además se tiene una aproximación de diferencias finitas que es consistente, si dicho esquema es estable su solución converge hacia la solución del problema real.

4.5 Errores de Redondeo y Discretización

Cualquier solución numérica, incluyendo algunas veces una solución analítica exacta a una EDP, puede ser afectada debido al número finito de dígitos en las operaciones aritméticas. Estos errores se denominan de redondeo y aparecen debido a las aproximaciones que se hacen en cada cálculo sucesivo dentro de cualquier esquema numérico de solución.

Los errores de discretización son causados por el reemplazo de un problema continuo por uno discreto y se define como la diferencia entre la solución exacta de la EDP y la solución exacta de la aproximación de diferencias finitas

5. ANALISIS DE ESTABILIDAD

5.1 Aspectos generales

Una aproximación de diferencias finitas a una EDP puede ser consistente, pero su solución no necesariamente puede converger a la solución real de la EDP. El teorema de Equivalencia de Lax establece que un método numérico que es consistente debe además estable, con lo que en definitiva se garantiza convergencia.

La estabilidad de una aproximación numérica no tiene relación con la EDP misma, sino más bien con los problemas de aproximación y oscilaciones que pueden ocurrir al llevar a cabo operaciones aritméticas que se requieren para resolver las ecuaciones de diferencias finitas.

Como punto de partida para el desarrollo de un análisis de estabilidad, consideremos una aproximación explícita para la ecuación de difusión:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (31)$$

la que puede ser escrita como:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \alpha \cdot \frac{u_{i+1}^n - 2 \cdot u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (32)$$

y resuelta para la incógnita u_i^{n+1} como:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \alpha \cdot \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \cdot (u_{i+1}^n - 2 \cdot u_i^n + u_{i-1}^n) \quad (33)$$

la cual se puede simplificar mediante la definición de un parámetro adimensional, que por simplicidad denotaremos r :

$$r = \frac{\alpha \cdot \Delta t}{(\Delta x)^2}$$

con lo que se puede escribir:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + r \cdot (u_{i+1}^n - 2 \cdot u_i^n + u_{i-1}^n) \quad (34)$$

Supongamos que la solución exacta de esta ecuación, la que se obtiene mediante el uso de un computador con precisión infinita, se denomina D . De igual forma, denominemos N a la solución numérica de dicha ecuación, la que se obtiene con un computador real. Si la solución analítica de la EDP se denomina A , podemos escribir lo siguiente:

$$\text{Error de Discretización} = A - D$$

$$\text{Error de Redondeo} = N - D$$

La estabilidad de un método numérico se analiza examinando el crecimiento del error a medida que los cálculos se van efectuando, de tal manera que lo que se analiza es como cambia el Error de Redondeo. O'Brien et al. (1951) examinaron este problema en gran detalle y luego de plantearse algunas situaciones tipo concluyeron lo siguiente:

- ¿Cuál es el efecto del error de redondeo global?
 - Si crece esto conduce a una inestabilidad de tipo fuerte.
 - Si decrece o no crece esto conduce a una estabilidad fuerte.
- ¿Cuál es el efecto del error de redondeo individual (iteración a iteración)?
 - Si crece esto conduce a una condición de inestabilidad de tipo débil.
 - Si decrece o no crece esto conduce a una condición de estabilidad débil.

Las dos situaciones anteriores llevaron a plantear la búsqueda de condiciones de estabilidad a través de métodos que se concentran en analizar estabilidad local o débil, y con esto asegurar una estabilidad fuerte o completa. Uno de los métodos más utilizados es el basado en un análisis de series de Fourier, también conocido como Análisis de von Neumann. En forma adicional se tiene el método matricial que es una extensión del anterior.

5.2 Análisis de Fourier o von Neumann

5.2.1 Ecuación de Difusión

Consideremos la ecuación de diferencias finitas planteada para la ecuación de Difusión presentada en la ecuación (34). Sea ξ una representación del error de redondeo, el cual permite escribir:

$$N = D + \xi \quad (35)$$

la solución numérica calculada debiera satisfacer la ecuación de diferencias presentada en (34), de tal manera que al sustituir la solución (35) en la ecuación de diferencias se obtiene:

$$D_i^{n+1} + \xi_i^{n+1} = D_i^n + \xi_i^n + r \cdot (D_{i+1}^n + \xi_{i+1}^n - 2 \cdot D_i^n - 2 \cdot \xi_i^n + D_{i-1}^n + \xi_{i-1}^n) \quad (36)$$

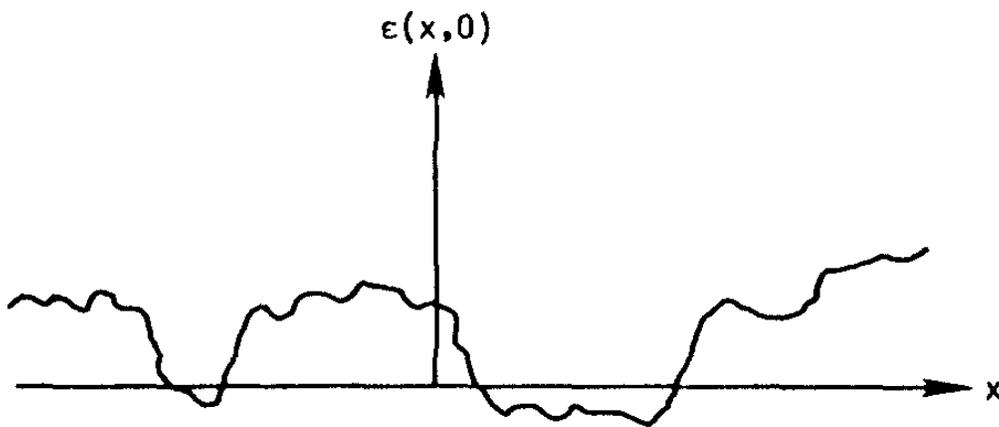
Dado que la solución exacta D debe satisfacer la ecuación de diferencias, es posible escribir lo siguiente para el error de redondeo:

$$\xi_i^{n+1} = \xi_i^n + r \cdot (\xi_{i+1}^n - 2 \cdot \xi_i^n + \xi_{i-1}^n) \quad (37)$$

En este caso, la solución exacta D y el error de redondeo ξ deben satisfacer la misma ecuación de diferencias. Esto significa que tanto el error de redondeo como la solución numérica poseen las mismas propiedades de crecimiento a través del tiempo. Cualquiera perturbación de los valores de entrada en la iteración n será prevenida de crecer sin cota en el caso de un esquema numérico estable, o crecerá aún más en el caso de un esquema numérico inestable.

Consideremos una distribución del error en un tiempo cualquiera sobre la grilla de discretización. En la Figura 3 se muestra un ejemplo de la distribución del error para $t=0$.

Figura 3
Distribución Inicial del Error



Supongamos que el error puede ser escrito como una serie de Fourier de la forma:

$$\xi(x, t) = \sum_m b_m(t) \cdot e^{I \cdot k_m \cdot x} \quad (38)$$

donde el período de la frecuencia fundamental ($m=1$) se supone igual a $2 \cdot L$. Para el caso de que el intervalo L está en unidades de longitud se puede escribir el número de onda como:

$$k_m = \frac{m \cdot \pi}{L} \quad m = 0, 1, 2, \dots, M$$

donde M es el número de intervalos de longitud Δx contenidos en el intervalo L . En la ecuación (38), el término $b_m(t)$ se conoce como la amplitud del error y $k_m \cdot x$ es el ángulo de fase.

Dado que la ecuación de diferencias presentada en (37) es lineal es posible concentrarse en el comportamiento de un único término de la serie de Fourier que describe al error, lo que permite limitar el análisis. En este caso consideremos el término:

$$\xi_i^n = b_m(n \cdot \Delta t) \cdot e^{I \cdot k_m \cdot i \cdot \Delta x} = b_m(n) \cdot e^{I \cdot k_m \cdot i \cdot \Delta x} \quad (39a)$$

el cual puede ser escrito para los otros términos en la ecuación (27):

$$\xi_i^{n+1} = b_m((n+1) \cdot \Delta t) \cdot e^{I \cdot k_m \cdot i \cdot \Delta x} = b_m(n+1) \cdot e^{I \cdot k_m \cdot i \cdot \Delta x} \quad (39b)$$

$$\xi_{i-1}^n = b_m(n \cdot \Delta t) \cdot e^{I \cdot k_m \cdot (i-1) \cdot \Delta x} = b_m(n) \cdot e^{I \cdot k_m \cdot (i-1) \cdot \Delta x} \quad (39c)$$

$$\xi_{i+1}^n = b_m(n \cdot \Delta t) \cdot e^{I \cdot k_m \cdot (i+1) \cdot \Delta x} = b_m(n) \cdot e^{I \cdot k_m \cdot (i+1) \cdot \Delta x} \quad (39d)$$

Al sustituir los términos (39) en la ecuación (37) se tiene, luego de simplificar por el término $e^{I \cdot k_m \cdot i \cdot \Delta x}$, la siguiente expresión:

$$b_m(n+1) = b_m(n) + r \cdot b_m(n) \cdot (e^{I \cdot k_m \cdot \Delta x} - 2 + e^{-I \cdot k_m \cdot \Delta x}) \quad (40)$$

la que puede ser simplificada aún más como:

$$b_m(n+1) = b_m(n) \cdot \left(1 - 2 \cdot r \cdot \left(1 - \frac{e^{I \cdot k_m \cdot \Delta x} + e^{-I \cdot k_m \cdot \Delta x}}{2} \right) \right) \quad (41)$$

Si recordamos la identidad trigonométrica:

$$\cos(\theta) = \frac{e^{I \cdot \theta} + e^{-I \cdot \theta}}{2}$$

la ecuación (29) se puede escribir como:

$$b_m(n+1) = b_m(n) \cdot (1 - 2 \cdot r \cdot (1 - \cos(k_m \cdot \Delta x))) = b_m(n) \cdot G \quad (42)$$

donde G se conoce como el Factor de Amplificación, es decir, que la amplitud de una componente arbitraria de la serie de Fourier para el error se multiplica por este factor en cada iteración temporal. Para el esquema de diferencias finitas explícito planteado en la ecuación (34) el factor de amplificación es:

$$G = \frac{b_m(n+1)}{b_m(n)} = 1 - 2 \cdot r \cdot (1 - \cos(k_m \cdot \Delta x)) \quad (43)$$

Al sustituir la ecuación (43) en la expresión (39b) se puede mostrar que:

$$\xi_i^{n+1} = G \cdot \xi_i^n \quad (44)$$

lo que permite identificar una condición necesaria para que el método numérico sea estable. En efecto, la ecuación (44) muestra que entre iteraciones sucesivas el error se modifica de acuerdo a un factor G . Si este factor es inferior a 1 se asegura que el error no crezca entre iteraciones sucesivas. De esta manera surge el criterio de estabilidad siguiente:

$$|G| \leq 1$$

la que se conoce como condición de Von Neumann.

En el caso particular de la ecuación (43) es posible utilizar otra identidad trigonométrica para reducir aún más dicha expresión:

$$\text{sen}^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1 - \cos \theta}{2}$$

Al reemplazar dicha identidad en la ecuación (43) se obtiene:

$$G = \frac{b_m(n+1)}{b_m(n)} = 1 - 4 \cdot r \cdot \text{sen}^2 \left(\frac{k_m \cdot \Delta x}{2} \right) = 1 - 4 \cdot r \cdot \text{sen}^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \quad (45)$$

en donde el producto $\beta = k_m \cdot \Delta x$ se conoce como el parámetro de frecuencia. Si tomamos la expresión para el Factor de Amplificación como una función del ángulo de fase, y se considera diferentes valores del parámetro r , es posible tener una idea gráfica de la convergencia del esquema explícito. La Figura 4 muestra un esquema que ilustra el resultado anterior, lo que permite estudiar la estabilidad del método explícito para la ecuación de difusión.

Al analizar la Figura 4 es posible observar que el método sería estable sólo para algunos valores de r (0.2 y 0.4), mientras que para los otros valores se violaría dicha condición. Este gráfico nos indica que el método es condicionalmente estable, i.e. sólo para algunos valores de r sería estable. Analicemos con mayor detención la condición de estabilidad:

$$|G| = \left| 1 - 4 \cdot r \cdot \text{sen}^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \right| \leq 1 \quad (46)$$

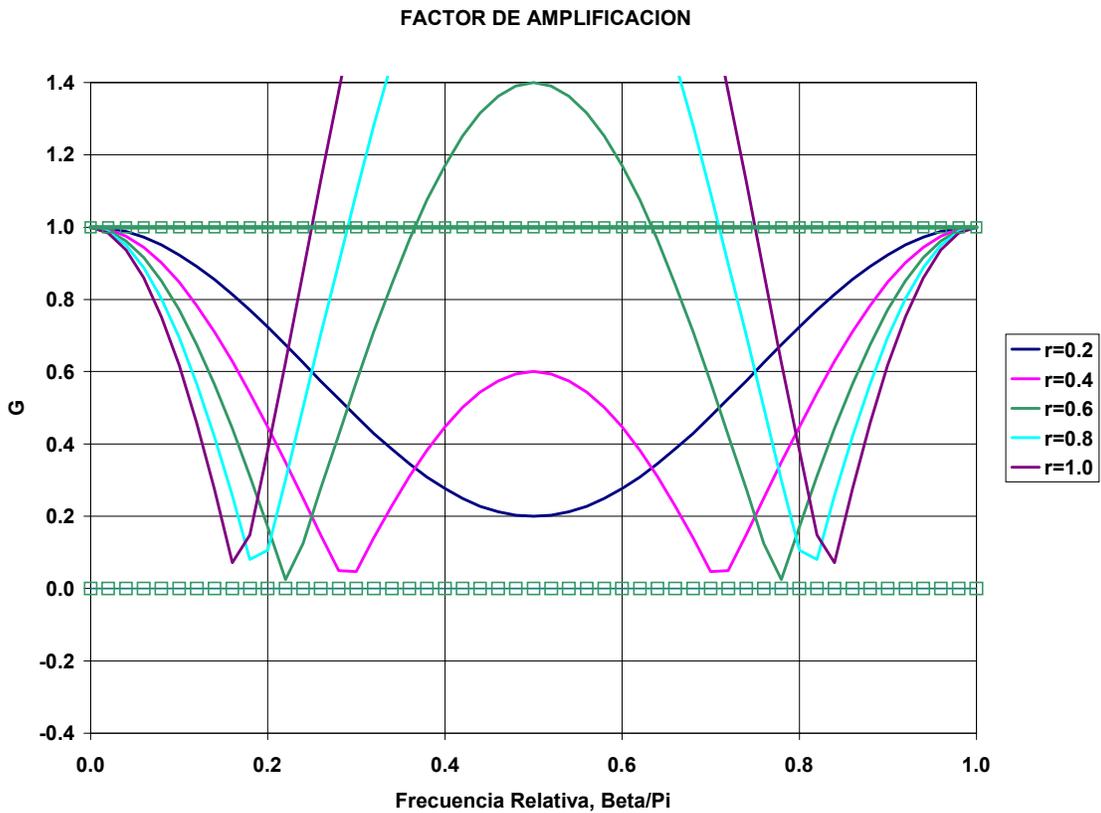
lo que se puede escribir como:

$$-1 \leq 1 - 4 \cdot r \cdot \text{sen}^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \leq 1 \quad (47)$$

Al evaluar la desigualdad en la ecuación (47) tenemos dos posibilidades. La primera posibilidad da origen a:

$$1 - 4 \cdot r \cdot \text{sen}^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \leq 1 \quad (48)$$

Figura 4
Factor de Amplificación Esquema de Diferencias Finitas Explícito
Ecuación de Difusión



lo que permite obtener:

$$4 \cdot r \cdot \text{sen}^2\left(\frac{\beta}{2}\right) \geq 0 \quad (49)$$

lo que es siempre verdadero. La segunda posibilidad da origen a:

$$1 - 4 \cdot r \cdot \text{sen}^2\left(\frac{\beta}{2}\right) \geq -1 \quad (50)$$

lo que permite obtener:

$$4 \cdot r \cdot \text{sen}^2\left(\frac{\beta}{2}\right) \leq 2 \quad (51)$$

que se puede desarrollar finalmente a:

$$r \leq \frac{1}{2 \cdot \text{sen}^2\left(\frac{\beta}{2}\right)} \quad (52)$$

Pero dado que $\text{sen}^2\left(\frac{\beta}{2}\right)$ varía entre 0 y 1, se tiene la condición de estabilidad para el método explícito:

$$r = \frac{\alpha \cdot \Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2} \quad (53)$$

lo que indica que hay una relación entre el intervalo de simulación Δt , el tamaño de la grilla Δx y el parámetro α que permite que el método sea estable.

5.2.2 Ecuación de Onda o de Advección

Consideremos la ecuación de onda o de transporte por advección en una dimensión:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \cdot \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (54)$$

donde c es la velocidad de traslación de onda. Lax (1954) propone el siguiente método de primer orden para resolver esta ecuación:

$$u_i^{n+1} = \frac{u_{i+1}^n + u_{i-1}^n}{2} + \frac{c \cdot \Delta t}{\Delta x} \cdot \left(\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2} \right) \quad (55)$$

Si al igual que en caso anterior se considera una expansión en serie de Fourier para el error de truncación descrito por la ecuación (38) es posible seguir el mismo procedimiento anterior para obtener la siguiente expresión para el factor de amplificación:

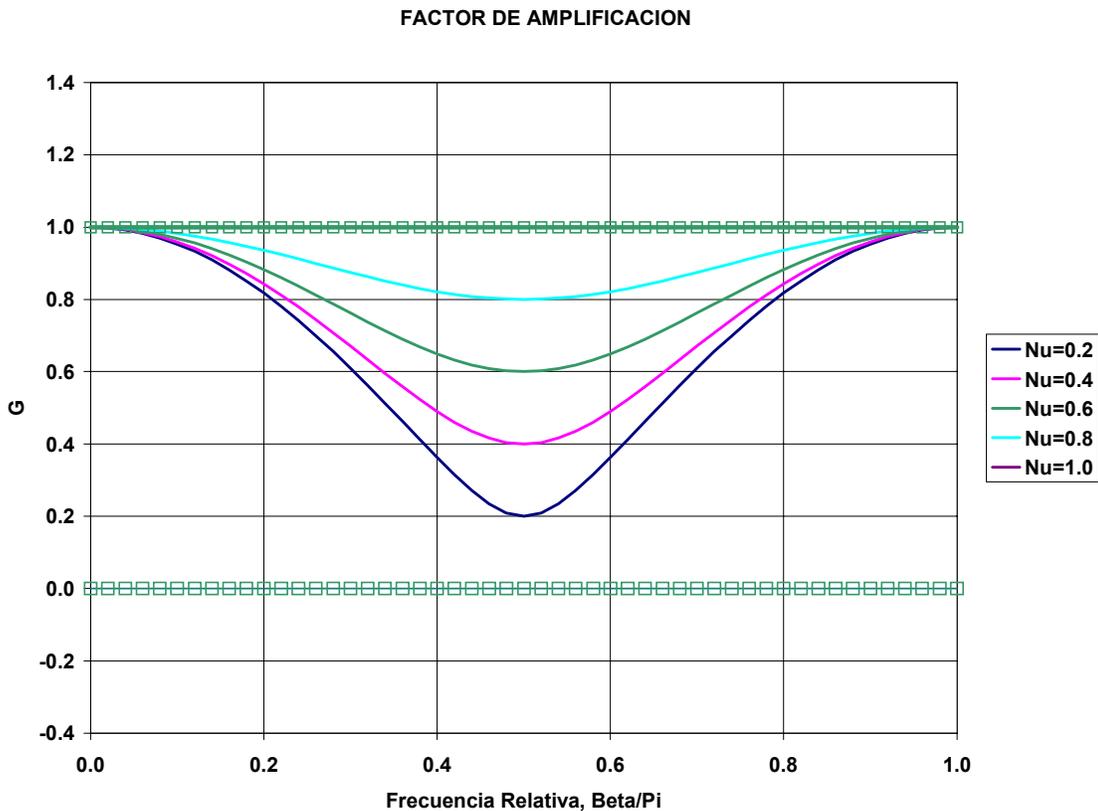
$$G = \frac{b_m(n+1)}{b_m(n)} = \cos(k_m \cdot \Delta x) - I \cdot v \cdot \text{sen}(k_m \cdot \Delta x) \quad (56)$$

donde $v = \frac{c \cdot \Delta t}{\Delta x}$ se conoce como el número de Courant. La condición de estabilidad para este método establece:

$$|G| = |\cos(k_m \cdot \Delta x) - I \cdot v \cdot \text{sen}(k_m \cdot \Delta x)| = \sqrt{\cos^2(\beta) + v^2 \cdot \text{sen}^2(\beta)} \leq 1 \quad (57)$$

Si tomamos la expresión para el Factor de Amplificación como una función del ángulo de fase, y se considera diferentes valores del parámetro v , es posible tener una idea gráfica de la convergencia del esquema Lax. La Figura 5 muestra un esquema que ilustra el resultado anterior, lo que permite estudiar la estabilidad del método Lax para la ecuación de onda con transporte puramente advectivo.

Figura 5
Factor de Amplificación Esquema de Diferencias Finitas Lax
Transporte Advectivo

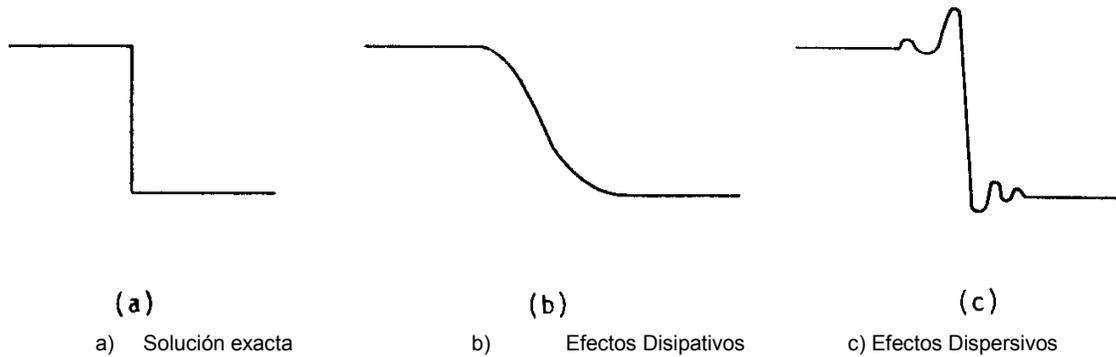


6. ANALISIS DE FOURIER PARA ESTUDIAR PRECISION DE UN ESQUEMA NUMERICO

Los esquemas numéricos que hemos estudiado proveen sólo una solución aproximada de las ecuaciones diferenciales. Errores de variado tipo pueden afectar a la solución numérica de un esquema cualquiera, los que se clasifican en dos grandes grupos: errores de disipación y de dispersión.

Los errores causados por los errores de truncación sobre las derivadas de orden par se asocian generalmente a una mayor disipación de la solución numérica, lo que se relaciona directamente con la magnitud del Factor de Amplificación. Por su parte, los errores de truncación de las derivadas impares dan origen a oscilaciones en la zona de mayores cambios del valor de la variable de estado. Este fenómeno dispersivo se relaciona con la fase del Factor de Amplificación. La Figura 6 muestra un ejemplo de los efectos disipativos y dispersivos sobre una solución numérica de una EDP.

Figura 6
Efectos Disipativos y Dispersivos



En los puntos anteriores se presentó la técnica de Von Neumann que permite encontrar una expresión analítica para el Factor de Amplificación, el que puede ser utilizado para estudiar los comportamientos disipativos y dispersivos del esquema numérico seleccionado.

El Factor de Amplificación, G , puede ser escrito en forma de un número complejo de tipo exponencial como:

$$G = |G| \cdot e^{j\phi} \quad (58)$$

donde ϕ es el ángulo de fase dado por:

$$\phi = \tan^{-1} \frac{\text{Im}(G)}{\text{Re}(G)} \quad (59)$$

6.1 Solución Exacta para la Ecuación de Difusión

Para encontrar el Factor de Amplificación de la solución exacta podemos considerar una solución elemental de la ecuación diferencial y sustituirla en la EDP. Supongamos que una componente de esta solución elemental tiene la forma siguiente:

$$u(x, t) = b(t) \cdot e^{j k_m x} \quad (60)$$

Si consideramos la ecuación de difusión planteada anteriormente:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (61)$$

podemos encontrar en forma simple que el Factor de Amplificación de la solución exacta, lo que se obtiene mediante la sustitución de la solución elemental en la EDP y su posterior análisis. Al desarrollar este análisis se puede escribir:

$$G_E = \frac{b(t + \Delta t)}{b(t)} = e^{-\alpha k_m^2 \Delta t} \quad (62)$$

lo que se puede presentar de una manera más compacta al considerar las definiciones del parámetro de frecuencia β , ecuación (45), y del parámetro adimensional r , ecuación (33). Luego de la sustitución se obtiene:

$$G_E = e^{-r \cdot \beta^2} \quad (63)$$

Es importante incorporar en este punto la definición de la longitud de onda de la solución numérica, Λ_n , la que se relaciona directamente con la precisión de los resultados de cada esquema de diferencias finitas que se puedan plantear. La longitud de onda se define como:

$$\Lambda_n = \frac{2 \cdot \pi}{k_n} \quad (64)$$

Si recordamos la definición del parámetro de frecuencia, $\beta = k_m \cdot \Delta x$, podemos escribir:

$$\Lambda_n = \frac{2 \cdot \pi \cdot \Delta x}{\beta} \quad (65)$$

Finalmente podemos reemplazar la expresión (65) en el Factor de Amplificación de la solución exacta para escribir:

$$G_E = e^{-4 \cdot \pi^2 \cdot r \cdot \left(\frac{\Delta x}{\Lambda_n}\right)^2} \quad (66)$$

donde $\frac{\Lambda_n}{\Delta x}$ es el número de puntos de la malla de discretización por longitud de onda.

6.2 Soluciones Numéricas para la Ecuación de Difusión

Siguiendo los procedimientos planteados en puntos anteriores se han determinado los Factores de Amplificación correspondientes a tres métodos o esquemas de diferencias finitas para la ecuación de difusión. Los tres métodos analizados se presentan a continuación:

Aproximación Explícita, $O(\Delta t, (\Delta x)^2)$:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \alpha \cdot \frac{u_{i+1}^n - 2 \cdot u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (67)$$

$$G_N = 1 - 2 \cdot r \cdot (1 - \cos(\beta)) = 1 - 2 \cdot r \cdot \left(1 - \cos\left(2 \cdot \pi \cdot \frac{\Delta x}{\Lambda_n}\right)\right) \quad (68)$$

Aproximación Implícita, $O(\Delta t, (\Delta x)^2)$

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \alpha \cdot \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2 \cdot u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} \quad (69)$$

$$G_N = \frac{1}{1 + 2 \cdot r \cdot (1 - \cos(\beta))} = \frac{1}{1 + 2 \cdot r \cdot \left(1 - \cos\left(2 \cdot \pi \cdot \frac{\Delta x}{\Lambda_n}\right)\right)} \quad (70)$$

Aproximación de Crank-Nicolson, $O((\Delta t)^2, (\Delta x^2))$

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \alpha \cdot \frac{\frac{1}{2} \cdot (u_{i+1}^{n+1} - 2 \cdot u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}) + \frac{1}{2} \cdot (u_{i+1}^n - 2 \cdot u_i^n + u_{i-1}^n)}{(\Delta x)^2} \quad (71)$$

$$G_N = \frac{1 - r \cdot (1 - \cos(\beta))}{1 + r \cdot (1 - \cos(\beta))} = \frac{1 - r \cdot \left(1 - \cos\left(2 \cdot \pi \cdot \frac{\Delta x}{\Lambda_n}\right)\right)}{1 + r \cdot \left(1 - \cos\left(2 \cdot \pi \cdot \frac{\Delta x}{\Lambda_n}\right)\right)} \quad (72)$$

Los Factores de Amplificación para la solución exacta, G_E , y numéricas, G_N , fueron utilizados para analizar las propiedades de convergencia de cada uno de los métodos presentados en esta sección. Dos tipos de análisis serán presentados en esta sección: parámetro de frecuencia, β , y longitud de onda adimensional, $\frac{\Lambda_n}{\Delta x}$.

En el primer tipo de análisis, parámetro de frecuencia, se ha graficado cada uno de los Factores de Amplificación para los tres métodos y la solución exacta. Este análisis se ha concentrado en dos valores diferentes del parámetro adimensional r . La Figura 7a muestra el gráfico para un valor de $r=0.25$, mientras que la Figura 7b para un valor de $r=0.75$.

En el caso de la Figura 7a se observa que dentro del rango de parámetros de frecuencia mostrados las soluciones numéricas se comportan bastante parecidas a la solución exacta, en términos de sus Factores de Amplificación. Al implementar cualquiera de las soluciones numéricas señaladas en el gráfico se debiera observar un comportamiento muy parecido a la solución analítica, evidenciando sin embargo una cierta disipación a través del tiempo. La solución más parecida a la analítica es la de tipo explícito.

La Figura 7b muestra una situación diferente a la anterior, donde se observa que el método explícito es inestable, esto es su solución debiera mostrar un efecto de atenuación o disipación diferente al observado para la solución exacta. En este caso el modelo más adecuado para representar la solución analítica es el de Crank-Nicolson.

Figura 7a
Factor de Amplificación Ecuación de Difusión ($r=0.25$)

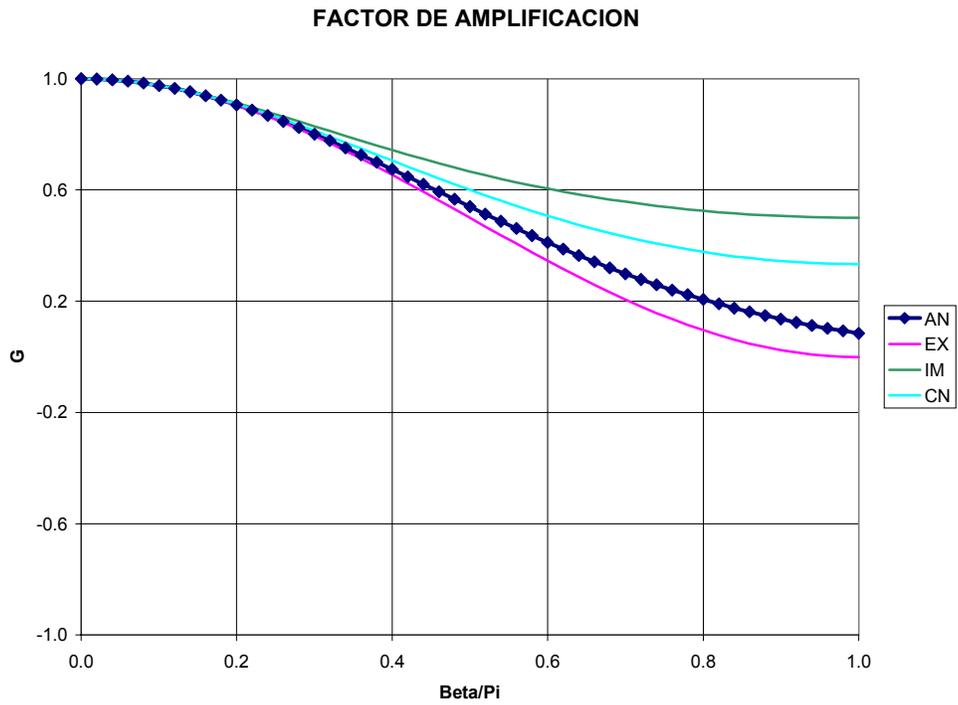
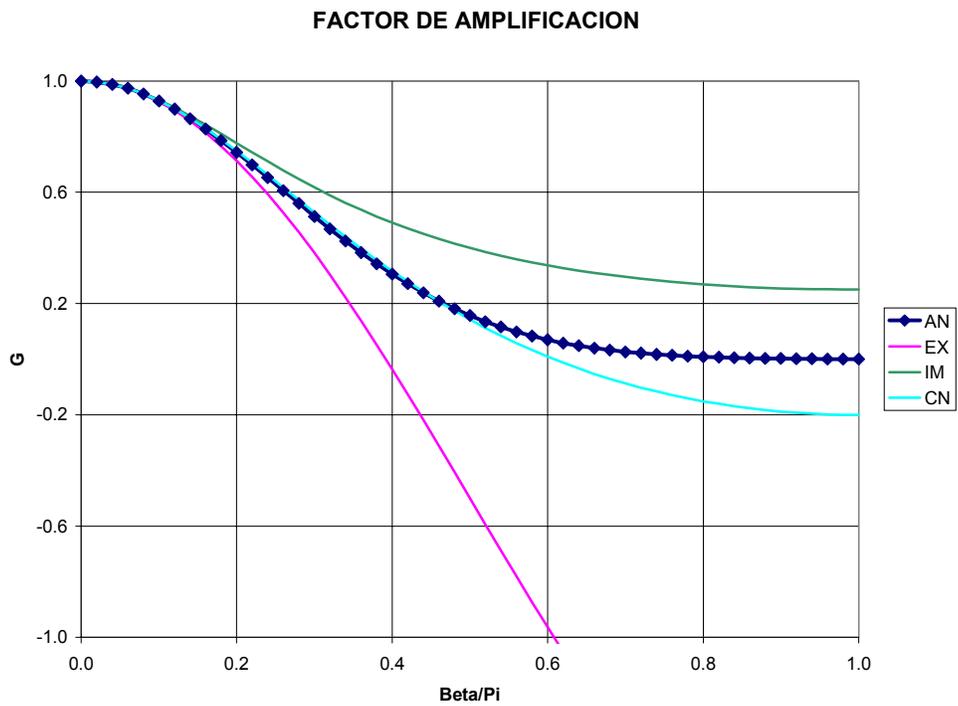
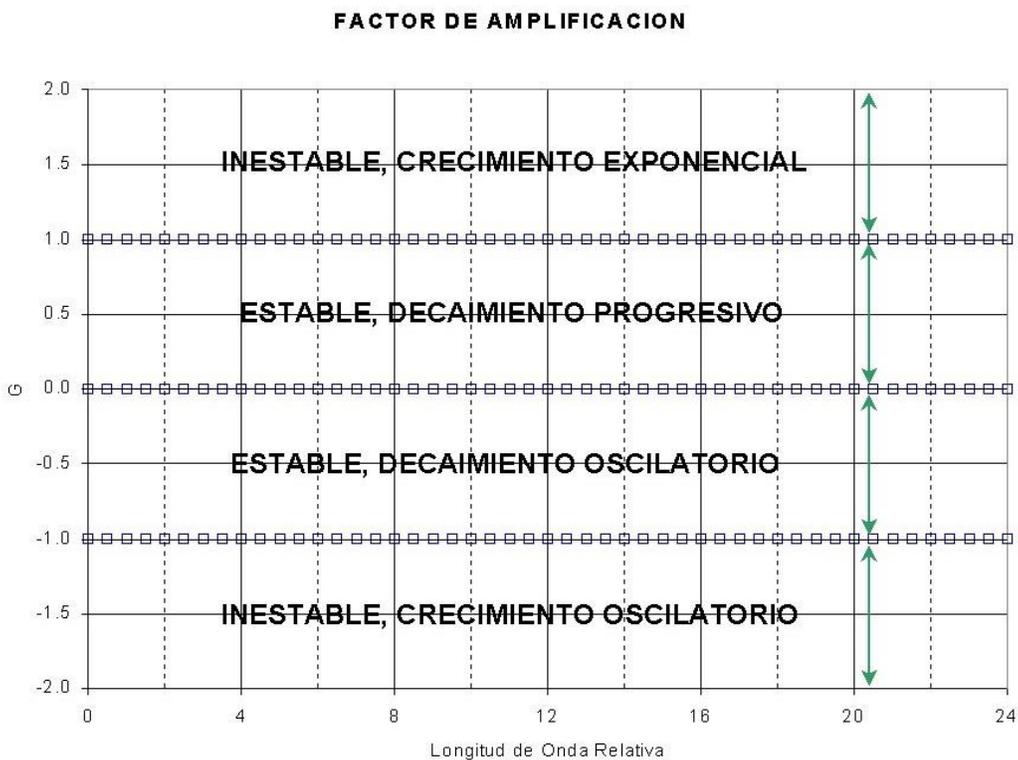


Figura 7b
Factor de Amplificación Ecuación de Difusión ($r=0.75$)



El análisis mediante la longitud de onda relativa, $\frac{\Lambda_n}{\Delta x}$, permite evaluar las características específicas de cada una de las soluciones numéricas que se plantea para resolver la ecuación de difusión. En este caso, y dado que el Factor de Amplificación es real, es posible asociarlo a comportamientos específicos en cuanto a su forma de estabilidad o inestabilidad. De esta manera, la Figura 8 muestra un esquema que ilustra el tipo de comportamiento de la solución numérica dependiendo del valor que alcance G para diferentes longitudes de onda. A modo de ejemplo, una solución numérica cuyo Factor de Amplificación se encuentra comprendido entre 0 y 1 presentará un comportamiento estable, con un decaimiento progresivo de los errores. A diferencia de esta solución, en el caso que G esté comprendida entre 0 y -1 se observará un comportamiento estable pero convergente en forma oscilatoria.

Figura 8
Comportamiento de las Soluciones Numéricas y Exacta



En el segundo tipo de análisis, $\frac{\Lambda_n}{\Delta x}$, se ha graficado cada uno de los Factores de Amplificación para los tres métodos y la solución exacta. Este análisis se ha concentrado en dos valores diferentes del parámetro adimensional r . La Figura 9a muestra el gráfico para un valor de $r=0.25$, mientras que la Figura 9b para un valor de $r=0.75$.

Figura 9a
Factor de Amplificación Ecuación de Difusión ($r=0.25$)

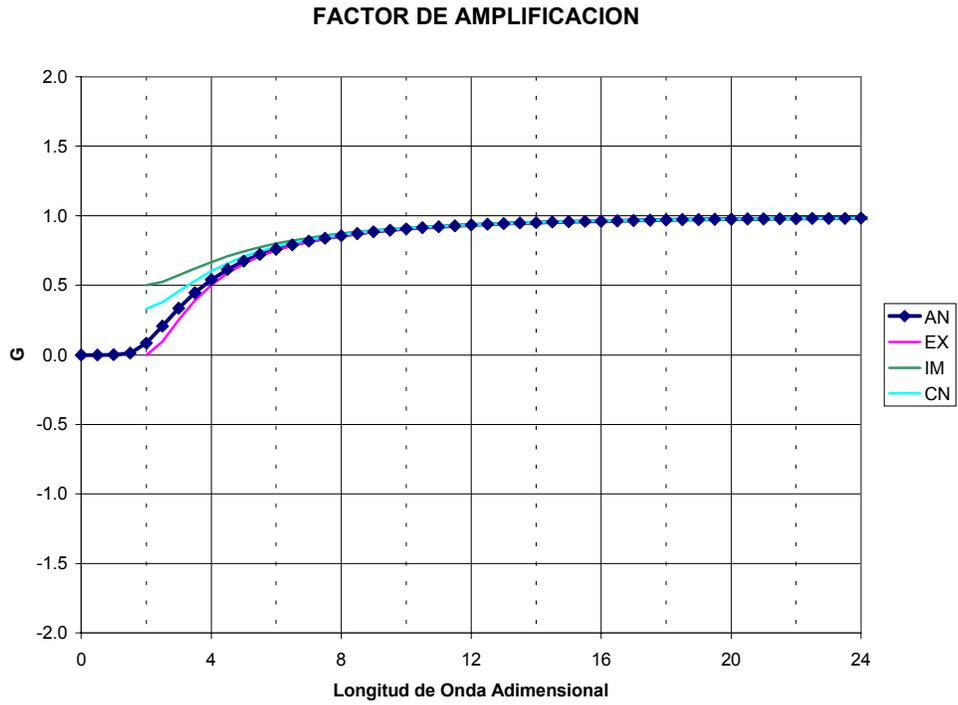
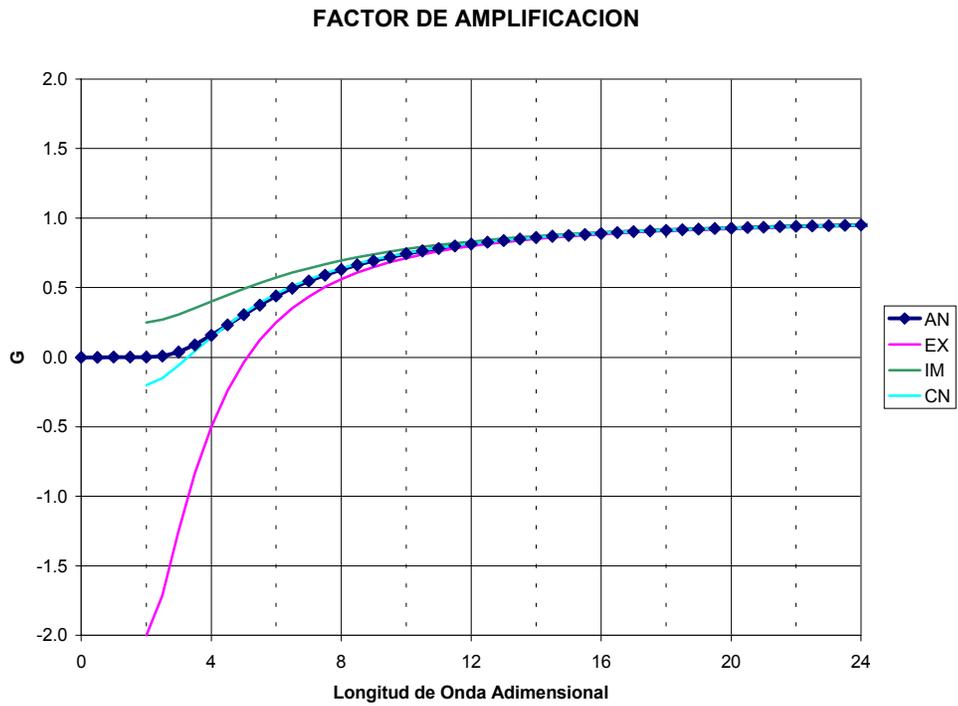


Figura 9b
Factor de Amplificación Ecuación de Difusión ($r=0.75$)



REFERENCIAS

Anderson, Tannehil and Pletcher (1984). "Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer". Hemisphere Publishing Corporation.

Huyakorn, P. And G. Pinder (1983). "Computational Methods in Subsurface Flow". Academic Press.

Lapidus, G. and G. Pinder (1982). "Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering". Wiley Interscience.

Remson, I., G. Hornberger, and F. Molz (1971). "Numerical Methods in Subsurface Hydrology". Wiley Interscience.

Valocchi, A. (1994). "Modeling of Groundwater Flow and Solute Transport". Lecture Notes. University of Illinois at Urbana-Champaign.