TEMA 7: MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS PARA LA RESOLUCIÓN DE ECUACIONES EN DERIVADAS PARCIALES

1. INTRODUCCIÓN.

Objetivo: obtener una aproximación numérica de la solución de una ecuación en derivadas parciales (EDP). De manera concreta, las EDP que habitualmente más interesan en Ingeniería son, entre otras:

- Ecuación del calor, estacionaria y transitoria
- Ecuaciones de la Elasticidad Lineal (ecuaciones de Lamé)
- Ecuaciones de los fluidos (Navier–Stokes y variantes)
- Ecuaciones de vibraciones (ondas y variantes)
- Ecuaciones del Electro-magnetismo (Maxwell y variantes).

Métodos Numéricos disponibles para resolver estas EDPs.

- Métodos de diferencias finitas (1950s)
- Método de elementos finitos (1960s)
- Método de volúmenes finitos (1960s).
- Métodos espectrales (1970s), basados en la matriz de derivación de Chebyshev.

Este tema es una muy breve introducción a los métodos de diferencias finitas.

Explicaremos el método a través de dos ejemplos concretos: ~~la ecuación del calor transitoria estacionari~~

- ecuación de Laplace - Poisson 2D
- " del calor 1D, transitoria.

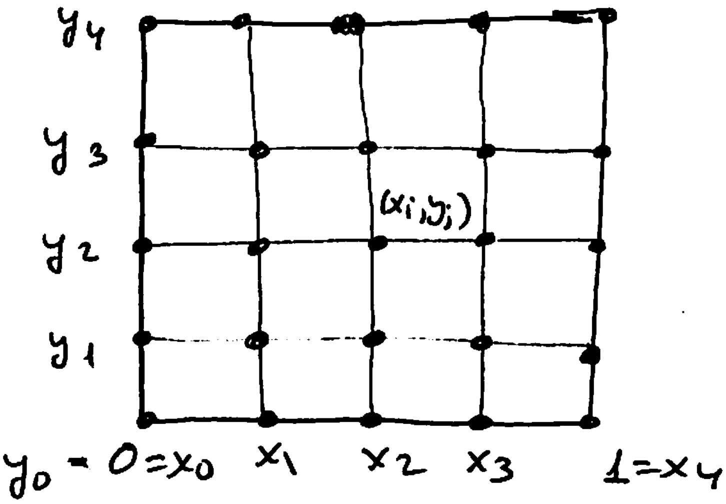
2. MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS PARA LA ECUACIÓN DE LAPLACE-POISSON

Consideremos el problema bi-dimensional

$$\begin{cases} -\Delta u(x,y) = f(x,y) & \text{en } \Omega = [0,a]\times[0,b] \\ u(x,y) = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \end{cases}$$

Dividimos el intervalo $[0,a]$ en $n+1$ subintervalos de igual longitud $h = \frac{a}{n+1}$, y el intervalo $[0,b]$ en $m+1$-subintervalos de longitud $k = \frac{b}{m+1}$.

Con ello formamos una malla bi-dimensional de nodos (x_i, y_j), $x_i = ih$, $y_j = jh$, $0 \le i \le n$, $0 \le j \le m$.



$a = b = 1$

$n = m = 3$

$h = k = \frac{1}{4} = 0.25.$

Distinguimos entre los nodos interiores

$$(x_i, y_j), \quad \cancel{1 \le i, j \le} \; 1 \le i \le n$$
$$1 \le j \le m.$$

y los situados en la frontera $\partial\Omega$

$(x_0, y_0), (x_0, y_1), \ldots, (x_0, y_{m+1})$

$(x_0, y_0), (x_1, y_0), \ldots, (x_{n+1}, y_0)$

$(x_{n+1}, y_0), (x_{n+1}, y_1), \ldots, (x_{n+1}, y_{m+1})$

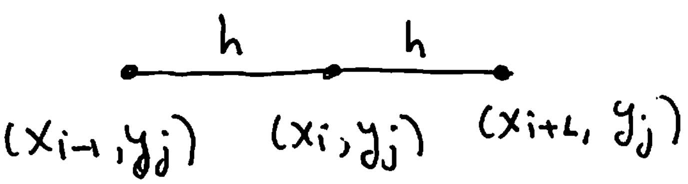
$(x_0, y_{m+1}), (x_1, y_{m+1}), \ldots, (x_{n+1}, y_{m+1}).$

El valor de la solución en estos nodos frontera es conocido. Es la condición de contorno $u(x,y) = 0$ sobre $\partial\Omega$.

Pretendemos calcular la solución en los nodos interiores, es decir,

$$u_{ij} = u(x_i, y_j), \qquad 1 \le i \le n$$
$$1 \le j \le m.$$

El método de diferencias finitas se basa en aproximar las derivadas parciales $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ que forman el Laplaciano $\left(\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$ por diferencias finitas, que enseguida especificaremos. Hay varias formas de aproximar estas derivadas. Veamos una de ellas:



$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) \simeq \frac{\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+1}, y_j) - \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j)}{h}$$

$$\simeq \frac{\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h} - \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{h}}{h}$$

$$\simeq \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}$$

Procedemos de igual forma respecto a la derivada segunda respecto a y:

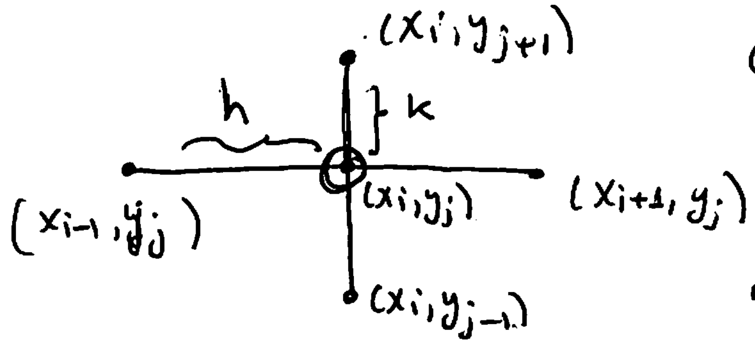


Gráfico de cómo las diferencias finitas de segundo orden se combinan en una "molécula de 5 puntos".

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2}$$

Denotamos por $f_{ij} = f(x_i, y_j)$.

Sustituyendo las aproximaciones anteriores en la EDP:

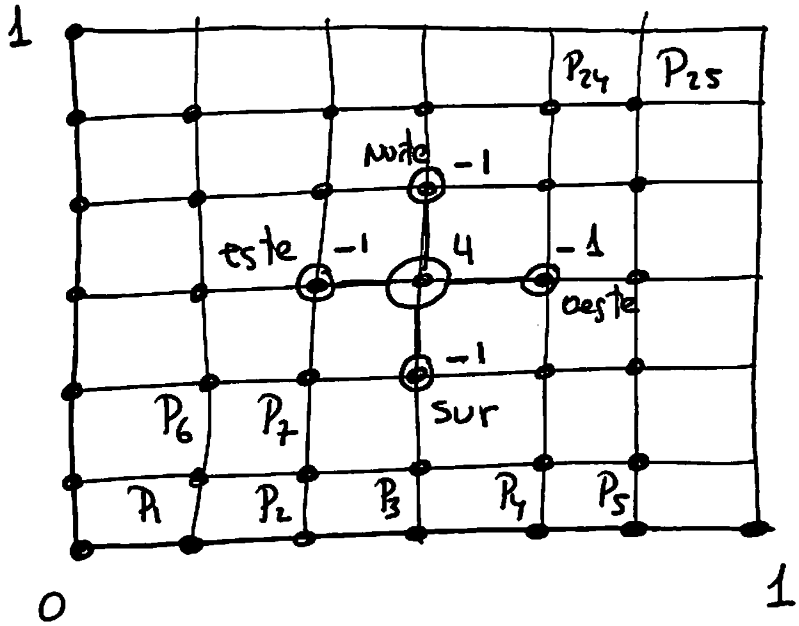
$$\begin{cases} -\left[\dfrac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \dfrac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2} \right] = f_{ij} \\ 1 \leq i \leq n, \quad 1 \leq j \leq m. \end{cases}$$

Tenemos pues un sistema lineal con $n \cdot m$ ecuaciones con $n \cdot m$ incógnitas $u_{i,j}$, $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq m$.

Veamos una situación concreta.

$\Omega = [0,1] \times [0,1]$

$n = m = N = 5$, $h = k = \dfrac{1}{6}$



- $= \frac{1}{6} = h$
- ~~Orden~~
- El problema discretizado es:

$$-\overbrace{u_{i+1,j}}^{\text{oeste}} + 4u_{i,j} - \overbrace{u_{i-1,j}}^{\text{oeste}} - \overbrace{u_{i,j+1}}^{\text{Norte}} - \overbrace{u_{i,j-1}}^{\text{sur}} = h^2 f_{ij}$$

$$1 \leq i \leq N, \quad 1 \leq j \leq N$$

Ordenamos los nodos siguiendo el "orden lexicográfico": izquierda a derecha y de abajo a arriba

$\Rightarrow$ obtenemos los punto P_n, $1 \leq n \leq N^2 = 25$

<u>Notación</u>: solución aproximada en el punto P_n,

$$U_n = u(P_n).$$

$$F_n = f(P_n).$$

Dentro de una fila, las diferencias finitas generan entradas no nulas en los nodos $\underset{-1}{\underset{\shortparallel}{\text{sur}}}$, $\underset{-1}{\underset{\shortparallel}{\text{este}}}$, $\underset{-1}{\underset{\shortparallel}{\text{oeste}}}$, $\underset{4}{\underset{\shortparallel}{\text{centro}}}$ y $\underset{-1}{\underset{\shortparallel}{\text{norte}}}$, ~~que~~ los cuales, debido al orden lexicográfico se ordenan en la correspondiente fila en la forma

$$\begin{array}{ccccccccccccc} \cdots & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & \cdots \\ & \uparrow & & & & \uparrow & \uparrow & \uparrow & & & & \uparrow & \\ & \text{sur} & & & & \text{oeste} & \text{centro} & \text{este} & & & & \text{Norte} & \end{array}$$

Hemos de tener en cuenta que para los nodos próximos a la frontera hemos de aplicar las condiciones de contorno (nulas, en este ejemplo).
Este proceso transforma la EDP en un sistema lineal de la forma

$$(K2D)U = h^2 F, \qquad U = (U_n),\ F = (F_n) \quad 1 \leq n \leq N$$

Veamos qué estructura tiene la matriz K2D del sistema.

$$K2D = \left[\begin{array}{ccccc|cccccccc}
4 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & \cdots & & & & & 0 \\
-1 & 4 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & \cdots & & & & 0 \\
0 & -1 & 4 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & \cdots & & & 0 \\
0 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & \cdots & & 0 \\
0 & 0 & 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\
\hline
 & & & & & \ddots & & & & & & & \\
\end{array}\right]_{25\times 25}$$

$$P1 \Leftrightarrow i=j=1: \quad -\underbrace{\cancel{u_{2,1}}^{-1}}_{\text{este}} + 4\underbrace{u_{1,1}}_{\text{centro}} - \underbrace{\cancel{u_{0,1}}^{0}}_{\text{oeste}} - \underbrace{\cancel{u_{1,2}}^{-1}}_{\text{Norte}} - \underbrace{\cancel{u_{1,0}}^{0}}_{\text{sur}}$$

$$= \cancel{4u_1}$$

$$= -u_2 + 4u_1 - u_6$$

$$P2 \Leftrightarrow i=2, j=1: \quad -\underbrace{u_{31}}_{\text{este}} + 4\underbrace{u_{21}}_{\text{centro}} - \underbrace{u_{11}}_{\text{oeste}} - \underbrace{u_{22}}_{\text{Norte}} - \underbrace{\cancel{u_{20}}^{0}}_{\text{Sur.}}$$

$$= -u_3 + 4u_2 - u_1 - u_7$$

$P3 \Leftrightarrow i=3, j=1$

La estructura de la matriz es

$$
K2D = \begin{bmatrix} K_N + 2I_N & -I_N & \ddots & & 0 \\ -I_N & K_N+2I_N & -I_N & \ddots & \\ \ddots & \ddots & \cdots & & \ddots \\ & \ddots & \ddots & \cdots & \ddots \\ 0 & & \ddots & \cdots & \\ & & \ddots & -I_N & K_N+2I_N \end{bmatrix}
$$

donde
$$
K_N = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots \\ & & & & \\ & & & & \end{bmatrix}
$$

es la matriz de Toeplitz de tamaño $N \times N$

e I_N es la matriz identidad de tamaño $N \times N$.

Analizemos ~~a~~ continuación la precisión o errores del método.

En este caso tenemos un error asociado a la resolución del sistema lineal $(K2D)u = h^2 F$ y otro debido a la discretización de la derivada segunda. ~~Nos~~ (Laplaciano). Nos centramos en este último error.

Dado que $\Delta u = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ es suficiente con analizar el error de discretización en una dimensión. Recordemos que por Taylor

$$u(x+h) = u(x) + h u'(x) + \frac{1}{2} h^2 u''(x) + \dots$$

de modo que

$$\frac{u(x+h) - u(x)}{h} = u'(x) + \frac{1}{2} h u''(x) + \dots$$

es decir, una diferencia finita hacia delante tiene un error de discretización $O(h)$.

De igual modo, la diferencia hacia atrás:

$$\cancel{\frac{u(x-h) - u(x)}{h}} = \dots$$

$$u(x-h) = u(x) - h u'(x) + \frac{1}{2} h^2 u''(x) + \dots$$

$$\frac{u(x) - u(x-h)}{h} = u'(x) - \frac{1}{2} h u''(x) + \dots$$

tiene la misma precisión.

Para la diferencia de segundo orden:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} \cong u(x+h) - 2u(x) + u(x-h) = h^2 u''(x) + c h^4 u^{(4)}.$$

Así:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} \approx \frac{\Delta^2 u}{\Delta x^2} = \frac{u(x+\Delta x) - 2u(x) + u(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}$$

Dado que $\Delta u = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ ~~ba~~ es suficiente con analizar el error de discretización en una dimensión. Recordemos que por Taylor

$$u(x+h) = u(x) + h u'(x) + \frac{1}{2} h^2 u''(x) + \dots$$

de modo que

$$\frac{u(x+h) - u(x)}{h} = u'(x) + \frac{1}{2} h u''(x) + \dots$$

es decir, una diferencia finita hacia delante tiene un error de discretización $O(h)$.

De igual modo, la diferencia hacia atrás:

$$\cancel{\frac{u(x-h) - u(x)}{h} = \dots}$$

$$u(x-h) = u(x) - h u'(x) + \frac{1}{2} h^2 u''(x) + \dots$$

$$\frac{u(x) - u(x-h)}{h} = u'(x) - \frac{1}{2} h u''(x) + \dots$$

tiene la misma precisión.

Para la diferencia de segundo orden:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} \approx u(x+h) - 2u(x) + u(x-h) \doteq h^2 u''(x) + c h^4, \; u^{(4)}.$$

Así:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} \simeq \frac{\Delta^2 u}{\Delta x^2} = \frac{u(x+\Delta x) - 2u(x) + u(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}$$

tiene precisión de segundo orden, es decir, el error de discretización es $ch^2 u^{4)}(x)$.

En resumen, el método de diferencias finitas proporciona un error de discretización $O(h^2)$.

3. MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS PARA LA ECUACIÓN DEL CALOR.

Caso 1D espacial. Consideramos el problema

$\cancel{u_t = u_{xx}}$

$\cancel{u(0)}$

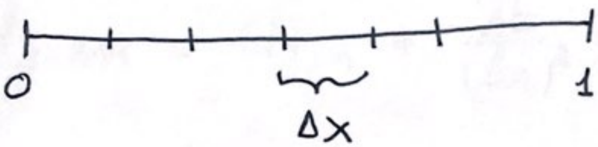
$\cancel{u(t)}$

$$\begin{cases} u_t(x,t) = u_{xx}(x,t), & 0 < x < 1,\ t > 0 \\ u(x,0) = u_0(x) \\ u(0,t) = u(1,t) = 0 \end{cases}$$

El proceso de discretización incluye la discretización respecto a la variable espacial x y a la variable temporal t.

~~Di~~

Discretización de u_{xx} mediante diferencias finitas



$x_j = j h$

$0 \le j \le m$

$$\overbrace{u_{xx}}^{\text{Laplaciano continuo}} \approx \overbrace{\frac{-1}{(\Delta x)^2}}^{\text{Laplaciano discreto}} K$$

con K la matriz de Toeplitz $-1 \;\; 2 \;\; -1$.

Hecho en los ejercicios del tema 1.

Discretización de la variable temporal: tenemos varias opciones. Por ejemplo, usar Euler explícito.

$$u_t \approx \frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t}. \qquad t_n = n \Delta t$$

Si denotamos por $U_{j,n} \approx u(x_j, t_n)$ una aproximación de la solución en la posición x_j y el tiempo t_n, el esquema discretizado es

$$\frac{U_{j,n+1} - U_{j,n}}{\Delta t} = \frac{U_{j+1,n} - 2U_{j,n} + U_{j-1,n}}{(\Delta x)^2}$$

con $U_{j,0} = (u_0(x_1), \dots, u_0(x_{m-1}))$

$$1 \le j \le m-1$$

obtenemos de esta forma el esquema explícito

$$\begin{cases} u_{j,n+1} = u_{j,n} + \dfrac{\Delta t}{(\Delta x)^2}\left(u_{j+1,n} - 2u_{j,n} + u_{j-1,\cancel{n+1}} \right) \\ u_{j,0} \text{ dato} \end{cases}$$

$u_{j-1,n}$

Dado que se trata de un método explícito es preciso tener en cuenta ~~la~~ Δt y Δx para obtener la estabilidad del mismo.

Condición de estabilidad en Euler explícito:

$$\left| 1 - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \lambda^*_{\cancel{max}} \right| < 1$$

donde $\lambda^*_{\cancel{max}}$ es el autovalor más desfavorable de la matriz K de Toepliz.

Recordemos: $\lambda_k = 2 - 2\cos(k\Delta x)$

El caso más desfavorable es $k\Delta x = \pi \Rightarrow \cos(k\Delta x) = -1$

$$\Downarrow$$

$$-1 < 1 - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} 4 \Leftarrow \lambda^* = 4$$

$$4\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} < 2 \Rightarrow \boxed{\Delta t < \frac{1}{2}(\Delta x)^2}$$

condición de estabilidad.

Respecto de la precisión del método, éste es de orden 1 en tiempo y de orden 2 en espacio, es decir, el error de discretización es $O\left(\Delta t + (\Delta x)^2\right)$.

El método es convergente si el llamado número de Courant $r = \dfrac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq 1/2$.

Veamos con más detalle cómo es la implementación de este método. Denotando por $r = \dfrac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ se tiene:

$$u_{j,n+1} = r\, u_{j+1,n} + (1-2r)\, u_{j,n} + r\, u_{j-1,n}.$$

Recordemos que, debido a las condiciones de contorno,

$$u_{m+1,n} = u_{0,n} = 0 \quad \forall n.$$

Denotando por $\tilde{u}_n$ al vector columna $u_{j,n}$, el algoritmo anterior se puede escribir en forma matricial en la forma

$$\tilde{u}_{n+1} = A\, \tilde{u}_n$$

$$A = \begin{bmatrix} 1-r & r & 0 & \cdots & & 0 \\ r & 1-2r & r & 0 & \cdots & \\ 0 & r & 1-2r & r & 0 \cdots & 0 \\ & & & & & \\ & & & & r & 1-2r \end{bmatrix}$$

Nota.- La condición de estabilidad-convergencia

$$r = .\Delta t \leq \frac{1}{2}(\Delta x)^2$$

hace que el método progrese lentamente. En efecto, si $\Delta x = 10^{-2} = 0.01$, entonces el valor máximo permitido para $\Delta t = \frac{1}{2}(10^{-2})^2 = 5 \times 10^{-5}$.

Si, por ejemplo, pretendemos obtener la solución en $T = 10$, entonces como $\Delta t = \frac{T}{N}$ se concluye

$$N = \frac{T}{\Delta t} = \frac{10}{5 \cdot 10^{-5}} = 20 \cdot 10^6,$$

es decir, nuestra malla temporal tiene 20 millones de grados de libertad lo que hace completamente ineficaz este ~~mét~~ método en esta situación concreta.

Veamos a continuación un algoritmo implícito para la ecuación del calor.

La idea consiste en sustituir el método de Euler explícito en la discretización temporal por el método de Euler implícito. Se tiene:

$$\frac{u_{j,n+1} - u_{j,n}}{\Delta t} = \frac{u_{j+1,n+1} - 2u_{j,n+1} - u_{j-1,n+1}}{(\Delta x)^2}$$

y así, denotando $r = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$

$$u_{j,n+1} - r\,u_{j+1,n+1} + 2r\,u_{j,n+1} - r\,u_{j-1,n+1} = u_{j,n}$$

$$(1+2r)\,u_{j,n+1} - r\,u_{j+1,n+1} - r\,u_{j-1,n+1} = u_{j,n}$$

que en forma matricial se escribe como

$$\tilde{A}\,\tilde{u}_{n+1} = \tilde{u}_n$$

con

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} 1+2r & -r & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -r & 1+2r & -r & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & & & -r & 1+2r \end{bmatrix}$$

$$\tilde{u}_n = \begin{bmatrix} u_{j,n} \end{bmatrix}$$

y recordemos $\tilde{u}_0 = \begin{bmatrix} u_0(x_1) \\ \vdots \\ u_0(x_m) \end{bmatrix}$

$$\left.\begin{aligned} u_{m+1,n} &= 0 \\ u_{0,n} &= 0 \end{aligned}\right\}$$ cond. de contorno.

Respecto del método de Euler explícito, ~~el mét~~ este método implícito requiere la resolución, en cada paso temporal ~~tn~~ t_n, del sistema lineal

$$\tilde{A}\,\tilde{U}_{n+1} = \hat{U}_n$$

mientras que en Euler explícito no hay que resolver ningún sistema pues

$$\tilde{U}_{n+1} = A\,\tilde{U}_n.$$

La ventaja estriba en que Euler implícito es incondicionalmente estable con lo que tenemos más flexibilidad para elegir Δt.

· <u>Nota</u>.- Recordemos. La precisión del método de diferencias finitas usando Euler (explícito o implícito) es $O(\Delta t + (\Delta x)^2)$.

Esta precisión puede ser mejorada si usamos el método de Crank-Nicolson para la discretización temporal, llegando a una precisión equilibrada entre las variables espacial y temporal y del orden

$$O((\Delta t)^2 + (\Delta x)^2).$$

Recordemos que la precisión en un algoritmo numérico en que intervienen varios procesos de discretización se mide por el proceso menos preciso.

Para acabar esta introducción a los métodos de diferencias finitas para la ecuación del calor, describimos la discretización del método de Crank-Nicolson. De manera esquemática se tiene:

$$\frac{U_{j,n+1} - U_{j,n}}{\Delta t} = \frac{1}{2(\Delta x)^2}\left(\Delta_x^2 U_{j,n} + \Delta_x^2 U_{j,n+1}\right)$$

donde

$$\Delta_x^2 U_{j,n} = U_{j+1,n} - 2U_{j,n} + U_{j-1,n},$$

$$\Delta_x^2 U_{j,n+1} = U_{j+1,n+1} - 2U_{j,n+1} + U_{j-1,n+1}.$$

y que, en forma matricial se escribe como

$$\cancel{A U_{j+1} = B U_j \;, \; j=0,1,\dots,m}$$

$$A U_{n+1} = B U_n, \qquad n = 1, \dots, N-1,$$

y donde

$$U_n = \begin{bmatrix} U_{1,n} \\ \vdots \\ U_{m,n} \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1+r & -\frac{r}{2} & & 0 & \\ -\frac{r}{2} & 1+r & -\frac{r}{2} & 0 & \cdots \\ & 0 & \ddots & & \\ & & & -\frac{r}{2} & 1+r \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} 1-r & \frac{r}{2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{r}{2} & 1-r & \frac{r}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ & \ddots & & \ddots & \ddots & \\ & & & & \frac{r}{2} & 1-r \end{bmatrix}$$

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