

El término de error en los esquemas de diferencias finitas



Selene Solorza, Carlos Yee-Romero, Adina Jordan-Aramburo y Samuel Cardaña-Sánchez

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California, Km. 103 carretera Tijuana-Ensenada, CP 22860, Ensenada, B.C., México.

E-mail: selene.solorza@gmail.com

(Recibido el 30 de Septiembre de 2009; aceptado el 17 de Diciembre de 2009)

Resumen

Debido a su simplicidad, los esquemas de diferencias finitas se usan frecuentemente en las simulaciones numéricas de aquellos fenómenos físicos que se pueden representar mediante modelos matemáticos que involucran ecuaciones diferenciales. Esta metodología se basa en la hipótesis de la equivalencia entre las derivadas (dominio continuo) y las ecuaciones de diferencias (dominio discreto). Sin embargo, tal equivalencia se obtiene de truncar la expansión en serie de Taylor de la función desconocida, lo cual en la mayoría de los casos implica que la ecuación de diferencias solamente será una aproximación de la ecuación diferencial. El término de error en los esquemas de diferencias representa la diferencia que existe entre la solución en el dominio continuo (solución analítica) y la solución en el dominio discreto (solución numérica). Y, sólo se tendrá una apropiada equivalencia entre ambos dominios, si el término de error es cero. Desafortunadamente esto último no sucede en la mayoría de los problemas, y los estudiantes de los primeros años de licenciatura en ciencias tienen dificultades en comprender el significado de dicho término que aparece en los esquemas de diferencias finitas.

Palabras clave: Diferencias finitas, el término de error, esquemas recursivos.

Abstract

Due to the simplicity, the finite difference method is frequently used in numerical simulations for physical phenomena represented by mathematical models involving differential equations. This methodology is based on the assumption of the equivalence between the derivatives (continuous domain) and the difference equations (discrete domain). However, such equivalence is obtained by a truncated Taylor series expansion of the unknown function, which obviously implies that the difference equation will be only an approximation of the differential equation. The error term in the finite schemes represent the difference between the solution in the continuous domain (analytical solution) and the solution in the discrete domain (numerical solution). And, only we have an appropriate equivalence between both domains if the error term is zero. Unfortunately this does not happen in the majority of the problems, and the first years-old students of a science major have difficulties in comprehends the meaning of such term that appears in the finite difference schemes.

Keywords: Finite difference, recursive schemes, the error term.

PACS: 01.50.H, 01.50.Lc, 02.60.Cb, 02.60.Lj, 02.70.Bf

ISSN 1870-9095

I. INTRODUCCIÓN

La mayoría de las propiedades cualitativas y cuantitativas de los fenómenos físicos se pueden representar mediante ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales con condiciones de frontera y/o iniciales para algún dominio. Una vez que el modelo matemático está bien definido, el siguiente paso es encontrar su solución analítica. Sin embargo, este paso se puede volver muy complicado puesto que sólo algunos modelos matemáticos tienen solución analítica [1].

Cuando la solución analítica de un problema de valor a la frontera es desconocida o muy complicada de encontrar, comúnmente se utilizan métodos numéricos para determinarla. Y, debido a su simplicidad de construcción e

implementación computacional las ecuaciones recursivas de diferencias finitas son uno de los métodos numéricos más utilizados para resolver modelos matemáticos que involucran ecuaciones diferenciales, las cuales han sido estudiadas desde el inicio del siglo pasado [2, 3, 4, 5].

La ecuación recursiva de diferencias finitas se construye sustituyendo las derivadas (dominio continuo) del modelo matemático por sus correspondientes ecuaciones de diferencias (dominio discreto). Entonces, el valor de los puntos seleccionados (número finito de puntos) en el dominio discreto se convierten en las incógnitas en lugar de la variable dependiente que es continua (número infinito de puntos). Esencialmente, en esta metodología el dominio se discretiza y la solución de la ecuación diferencial se busca en los puntos discretos

mediante la relación recursiva [6]. Por lo que, la solución del esquema de diferencias finitas, de aquí en adelante llamada solución numérica, será una buena aproximación de la solución analítica cuando el dominio se discretice apropiadamente [7,8]. Sin embargo, en la mayoría de los casos es muy complicado encontrar la discretización exacta del dominio. Entonces, para asegurar que la solución numérica se parezca a la solución analítica, la ecuación de recurrencia debe satisfacer las condiciones de estabilidad y convergencia. Frecuentemente estas condiciones son muy tediosas de establecer; pero una vez que la condición de estabilidad se determina, ésta nos ayudará a tener una idea de como discretizar el dominio, aunque por lo regular no nos indica la discretización exacta. Entonces, existirá una diferencia entre la ecuación diferencial y su correspondiente esquema de diferencias; dicha diferencia es medida mediante el término conocido como el error del esquema de diferencias.

Por lo que surgen las siguientes preguntas: ¿Cómo debe ser el término de error para que la solución numérica se parezca a la solución analítica?, ¿existirá una manera de construir el esquema de diferencias de forma que el término de error sea cero?

En la siguiente sección se describe la metodología estándar para construir esquemas de diferencias finitas y también la forma de obtener las relaciones de recurrencia donde el término de error sea cero, para la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y la ecuación de onda en una dimensión espacial. Finalmente, las conclusiones se presentan en la sección III.

II. LOS ESQUEMAS DE DIFERENCIAS FINITAS

La metodología estándar para construir los esquemas de diferencias finitas se basa en sustituir cada operador diferencial del modelo matemático por su respectiva ecuación de diferencias. Tales ecuaciones de diferencias se obtienen de la expansión en series de Taylor de la función desconocida. En este trabajo sólo se consideran funciones de una y dos variables, por lo que usaremos el teorema de Taylor especializado para funciones de dos variables [9]:

Si $u(x,t)$ es una función suave, es decir, es una función que es infinitamente diferenciable, sobre $D = \{x \in [x_0 - r, x_0 + r], t \in [t_0 - r, t_0 + r]\}$, donde x_0, t_0, r son números reales, entonces

$$u(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j=0}^n \frac{1}{n!} \binom{n}{j} (x-x_0)^{n-j} (t-t_0)^j \frac{\partial^n u(x,t)}{\partial x^{n-j} \partial t^j} \bigg|_{(x_0, t_0)}, \quad (1)$$

donde $\binom{n}{j} = \frac{n!}{j!(n-j)!}$ es el coeficiente binomial.

A. El término de error en las ecuaciones de diferencias

Para construir la ecuación de diferencias para $\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}$, se toma la expansión en serie de Taylor de $u(x, t+\Delta t)$ alrededor del punto (x,t) , entonces de la ecuación (1) tenemos que

$$u(x, t+\Delta t) = u(x,t) + \Delta t \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + \dots + \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{\partial^n u(x,t)}{\partial t^n} + \dots, \quad (2)$$

y reescribiendo la ecuación (2) como

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{u(x, t+\Delta t) - u(x,t)}{\Delta t} + \Delta t \left(-\frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} - \dots - \frac{\Delta t^{n-2}}{n!} \frac{\partial^n u(x,t)}{\partial t^n} - \dots \right), \quad (3)$$

podemos escribir la ecuación (3) en forma compacta de la siguiente manera

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{u(x, t+\Delta t) - u(x,t)}{\Delta t} + O(\Delta t). \quad (4)$$

Si $O(\Delta t) = 0$ entonces tendríamos una representación exacta en el dominio discreto de la diferencial parcial de la ecuación (4), esto es

$$DP = ED, \quad (5)$$

donde DP y ED representan, respectivamente, la derivada parcial y la ecuación de diferencias. Sin embargo, en la mayoría de los problemas físicos esto no sucede, así que se tiene que considerar que Δt es infinitamente pequeño para que el término $O(\Delta t)$ de la ecuación (4) tienda a cero, es decir, lo que en realidad se tiene es

$$DP = ED + O(\Delta t), \quad (6)$$

entonces, el término $O(\Delta t)$ es el error de representar a la diferencial parcial por la ecuación de diferencias. Dicho error surge de truncar los términos entre paréntesis de la expansión en serie de Taylor de la ecuación (3).

Notemos que en el caso de la ecuación (3) el término de error tiende a cero conforme lo hace Δt , así que decimos que (3) tiene un término de error lineal. Cuando la ecuación tenga un término de la forma $O(\Delta t^n)$ diremos que tiene un error de orden n .

Al discretizar el dominio como

$$x \equiv k\Delta x, \quad t \equiv n\Delta t, \quad (7)$$

donde k, n son números enteros y $\Delta x, \Delta t$ son el tamaño de paso de la discretización del dominio D en las coordenadas x y t , respectivamente, entonces podemos definir a la función continua $u(x,t)$ en el punto (k,n) en el dominio discreto como

$$u(x, t) \equiv u_k^n. \quad (8)$$

Así pues, la ecuación (4) se reescribe

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} + O(\Delta t), \quad (9)$$

entonces, tenemos una fórmula que expresa la primera derivada parcial, con respecto a la variable t , de la función continua $u(x, t)$ en términos de la función evaluada en los puntos $(k, n+1)$ y (k, n) , es por eso que a la ecuación (9) se le conoce como ecuación de diferencias progresivas en el tiempo.

De la misma manera, para construir la ecuación de diferencias para $\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2}$, se toma la expansión en serie de Taylor de $u(x, t + \Delta t) + u(x, t - \Delta t)$ alrededor del punto (x, t) y después de agrupar términos tendremos que

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = \frac{u_k^{n+1} - 2u_k^n + u_k^{n-1}}{\Delta t^2} + O(\Delta t^2), \quad (10)$$

a esta ecuación se le conoce como ecuación de diferencias centradas en el tiempo, puesto que para calcular la segunda derivada parcial, con respecto a la variable t , de la función $u(x, t)$ se necesita de la función evaluada en los puntos $(k, n+1)$, (k, n) y $(k, n-1)$.

Para funciones de una variable, el procedimiento para obtener las ecuaciones de diferencias es el mismo descrito anteriormente, por lo que

$$\frac{du(x)}{dx} = \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} + O(\Delta x), \quad (11)$$

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = \frac{u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2). \quad (12)$$

En las siguientes dos subsecciones estudiaremos el término de error de los esquemas de diferencias finitas para la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y la ecuación de onda en una dimensión espacial.

B. La ecuación de Schrödinger

El desplazamiento de un electrón, $\psi(x)$, moviéndose libremente en una caja unidimensional está gobernado por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x), \quad (13)$$

donde $\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ es la constante de Planck, m es la masa de la partícula y E es la energía asociada a la partícula.

El esquema de diferencias finitas para la ecuación (13) se obtiene sustituyendo la ecuación (12) en la (13), y después de agrupar apropiadamente los términos se tiene que

$$\psi_{k+1} = \left(2 - \Delta x^2 \frac{2m}{\hbar^2} E \right) \psi_k - \psi_{k-1}, \quad (14)$$

notando que el esquema se construyó con un error de truncamiento de la forma $O(\Delta x^2)$. Entonces, si deseamos construir un esquema donde el error sea menor, debemos agregar términos a la serie de Taylor, y si queremos que el error sea nulo debemos tomar a la serie de Taylor en su entidad completa.

Por ejemplo, si vamos a construir un esquema donde el término de error sea cero, entonces no debemos desechar ningún término de la serie de Taylor, es decir,

$$\psi(x + \Delta x) + \psi(x - \Delta x) = 2 \left[\psi(x) + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \dots + \frac{\Delta x^{2n}}{(2n)!} \frac{d^{2n} \psi}{dx^{2n}} + \dots \right]. \quad (15)$$

De la ecuación (13) obtenemos las relaciones para las derivadas de orden superior, esto es,

$$\frac{d^{2n} \psi}{dx^{2n}} = (-1)^n \left(\frac{2m}{\hbar^2} E \right)^n \psi(x), \quad (16)$$

donde n es un número entero positivo. Al sustituir (16) en los términos entre paréntesis cuadrados de la ecuación (15), esta se reescribe como

$$\psi(x + \Delta x) + \psi(x - \Delta x) = 2 \left[1 - \frac{2mE \Delta x^2}{\hbar^2} \frac{1}{2!} + \dots + (-1)^n \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^n \frac{\Delta x^{2n}}{(2n)!} + \dots \right] \psi(x), \quad (17)$$

notando que el término entre paréntesis cuadrados es la expansión en serie de potencias de $\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Delta x\right)$,

entonces la ecuación (17) se simplifica como

$$\psi(x + \Delta x) + \psi(x - \Delta x) = 2 \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Delta x\right) \psi(x), \quad (18)$$

en el dominio discreto el esquema de diferencias finitas anterior, llamado también esquema de diferencias finitas exactas (DFE) porque el término de error es cero, se escribe como

$$\psi_{k+1} = 2 \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Delta x\right) \psi_k - \psi_{k-1}. \quad (19)$$

Es conocido que la solución analítica de la ecuación (13) tiene forma sinusoidal. Como se observa, el esquema recursivo (19) incorpora explícitamente un término sinusoidal, mientras que el esquema tradicional (14) sólo

toma en consideración los dos primeros términos de la expansión del coseno en serie de potencias. Así, que existe una sustancial diferencia entre el esquema de diferencias finitas tradicional (DF) y el exacto (DFE).

Por ejemplo, si consideramos un electrón de masa $9.11 \times 10^{-31} \text{ Kg}$ moviéndose libremente dentro de una caja unidimensional de longitud $5 \times 10^{-10} \text{ m}$, la ecuación (13) sujeta a las condiciones de frontera $\psi(0) = 0$ y $\psi(L) = \psi(5 \times 10^{-10}) = 0$, tiene la siguiente solución analítica (SA)

$$\psi(x) = 6.3246 \times 10^4 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \text{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad (20)$$

con $E = 2.4126 \times 10^{-19} n^2$.

Para facilitar el análisis del término de error en este ejemplo, se seleccionará el segundo modo ($n=2$) de la función (20) normalizada y se discretizará el espacio usando $\Delta x = 1 \times 10^{-11} \text{ m}$. La figura 1(a) muestra mediante la curva continua negra la gráfica de la solución analítica (SA) de la densidad de probabilidad del electrón, con la curva punteada negra la solución del esquema de diferencias finitas exactas (DFE) y en círculos negros la solución del esquema de diferencias finitas (DF). La figura 1(b) y 1(c) muestran los valores del error absoluto porcentual (EAP) de las soluciones numéricas.

El error absoluto porcentual representa una manera de medir la diferencia que existe entre la solución numérica (SN) y la solución analítica (SA), matemáticamente se calcula como

$$EAP = |SA - SN| \times 100\%. \quad (21)$$

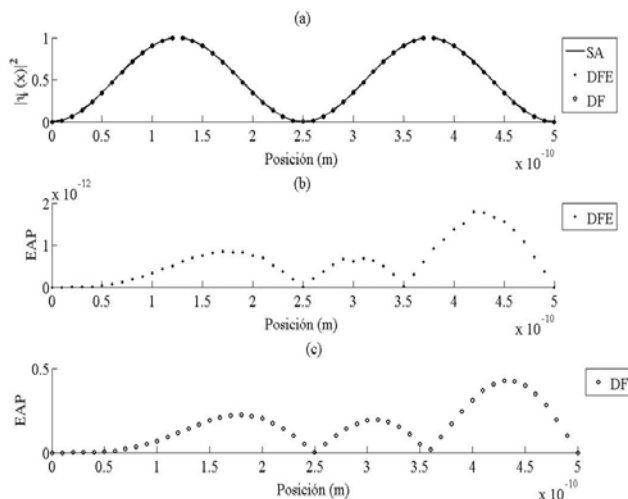


FIGURA 1. (a) Densidad de probabilidad del electrón. (b) Error absoluto porcentual de la solución numérica del esquema de DFE. (c) Error absoluto porcentual del esquema de DF.

Para la solución del esquema de diferencias finitas exactas (19) los valores del error absoluto porcentual son del orden

de 10^{-12} , sin embargo esperaríamos que fueran cero por haber usado un esquema exacto. Los valores del error absoluto porcentual no son cero debido a la limitación de aritmética no exacta de las computadoras. Para el esquema de diferencias finitas (14) con $O(\Delta^2)$ los valores del error absoluto porcentual son del orden de 10^{-1} , por lo que existen once órdenes de magnitud de diferencia en el error absoluto porcentual de ambas soluciones numéricas.

C. La ecuación de Onda

La ecuación de onda en una dimensión espacial está dada por

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad (22)$$

donde $u(x, y)$ representa la posición del objeto en la dirección x en el tiempo t y c es la velocidad a la cual se mueve.

El esquema de diferencias finitas para la ecuación (22) se obtiene sustituyendo la ecuación (10) correspondiente al tiempo y al espacio en la ecuación (22), y después de agrupar apropiadamente los términos, se obtiene

$$u_k^{n+1} + u_k^{n-1} = \sigma^2 (u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n) + 2u_k^n, \quad (23)$$

con la restricción que

$$\sigma^2 = \left(c \frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 \leq 1, \quad (24)$$

la cual es conocida como la condición de estabilidad de Courant-Friedrichs-Lewy [5], nombrada así en honor de Richard Courant, Kurt Friedrichs y Hans Lewy.

Si deseamos construir un esquema donde el término de error sea cero, entonces partimos de la expansión en serie de Taylor de $u(x, t + \Delta t) + u(x, t - \Delta t)$ alrededor de (x, t) para tener que

$$u(x, t + \Delta t) + u(x, t - \Delta t) = 2 \left[u(x, t) + \dots + \frac{\Delta t^{2n}}{(2n)!} \frac{\partial^{2n} u(x, t)}{\partial t^{2n}} + \dots \right], \quad (25)$$

donde n es un número entero. Posteriormente, de la ecuación de onda (22) generamos las siguientes relaciones

$$\frac{\partial^{2n} u(x, t)}{\partial t^{2n}} = c^{2n} \frac{\partial^{2n} u(x, t)}{\partial x^{2n}}, \quad (26)$$

que al sustituirlas en la ecuación (25), esta se reescribe como

$$u(x, t + \Delta t) + u(x, t - \Delta t) = 2 \left[u(x, t) + \frac{(c\Delta t)^2}{(2n)!} \frac{\partial^{2n} u(x, t)}{\partial x^{2n}} + \dots \right], \quad (27)$$

entonces, al definir

$$\Delta x = c\Delta t, \quad (28)$$

se obtiene que el esquema de diferencias finitas exactas para la ecuación de onda (22), es

$$u_k^{n+1} + u_k^{n-1} = u_{k+1}^n + u_{k-1}^n, \quad \Delta x = c\Delta t. \quad (29)$$

El esquema de diferencias finitas (29) muestra una única forma de discretizar el dominio, mientras que el esquema (23) presenta un sin fin de posibilidades, según el valor de σ^2 que se seleccione.

Por ejemplo, la ecuación de onda (22) sujeta a las siguientes condiciones de frontera

$$u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad t > 0, \quad (30)$$

y condiciones iniciales

$$u(x, 0) = \sin(m\pi x), \quad \left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0, \quad 0 < x < 1, \quad (31)$$

donde m es un número entero, tiene la solución analítica

$$u(x, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sin(m\pi x) \cos(m\pi t). \quad (32)$$

Para facilitar el análisis del término de error en este ejemplo, se seleccionará sólo el primer modo de vibración, esto es $m=1$ y se usará $c=1$ cm/seg. En el esquema exacto (29) se discretizará el dominio en el espacio y el tiempo usando $\Delta x = 0.1$ cm y $\Delta t = 0.1$ seg, respectivamente. Y para el esquema tradicional (23) se escogerá $\sigma = 1/2$ con $\Delta x = 0.1$ cm, por lo que $\Delta t = 0.05$ seg.

La figura 2(a) muestra la gráfica de la solución analítica (curva negra continua), la solución numérica del esquema de DFE (curva negra punteada) y la de DF (curva negra de círculos). La figura 2(b)-(c) presenta los valores del EAP para las soluciones numéricas obtenidas con los esquemas de DFE y DF. Estas gráficas muestran que esencialmente la relación de recurrencia de DFE tiene valores del EAP prácticamente de cero mientras que DF alcanza valores de hasta el 0.2%.

La teoría predice que los valores del EAP tenderán a cero conforme σ^2 tienda a uno, entonces el ejemplo numérico se repite pero ahora con $\sigma = 3/4$. Los resultados se muestran en la figura 3, obteniendo que efectivamente los valores del EAP se reducen, ahora sólo llegan hasta el 0.1%, mientras que para el esquema de diferencias finitas exactas permanece prácticamente igual, del orden de 10^{-14} %.

Entonces, con este ejercicio también mostramos que el esquema de DFE es independiente del tamaño de paso seleccionado mientras que la relación recursiva de DF variará con la discretización seleccionada para el dominio.

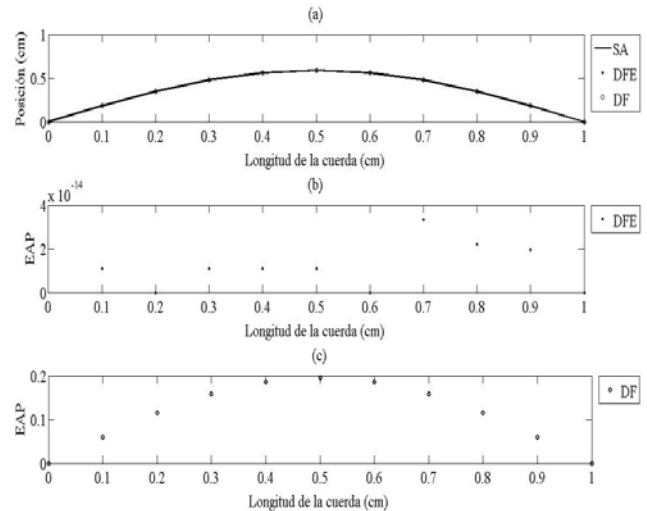


FIGURA 2. (a) Movimiento de una cuerda de un 1 cm de longitud para $t=0.3$ seg, $\Delta x = 0.1$ cm y $\sigma = 1/2$. (b) Error absoluto porcentual de la solución del esquema de diferencias finitas exactas. (c) Error absoluto porcentual de la solución del esquema de diferencias finitas.

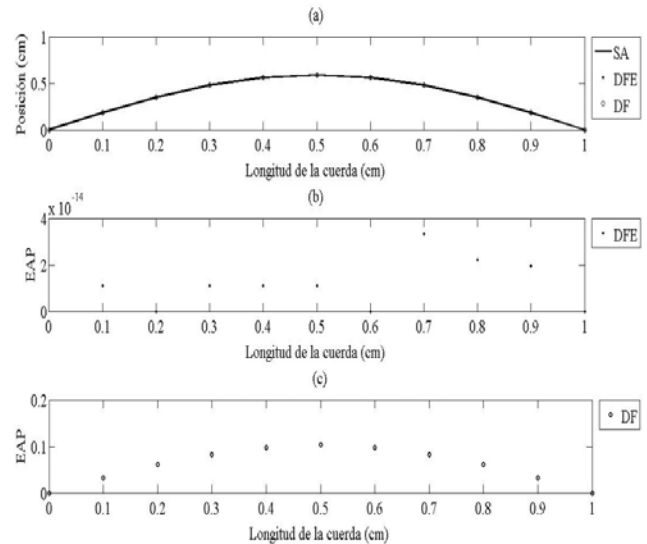


FIGURA 3. (a) Movimiento de una cuerda de un 1 cm de longitud para $t=0.3$ seg, $\Delta x = 0.1$ cm y $\sigma = 3/4$. (b) Error absoluto porcentual de la solución del esquema de diferencias finitas exactas. (c) Error absoluto porcentual de la solución del esquema de diferencias finitas.

IV. CONCLUSIONES

Frecuentemente las soluciones numéricas obtenidas mediante diferencias finitas se utilizan para predecir el comportamiento de fenómenos físicos. También, en ocasiones se usan para calcular las condiciones iniciales de algoritmos numéricos más complicados. Por lo que es importante comprender el significado del término de error en dichos esquemas y la forma en que el dominio se discretiza.

Si se logra construir esquemas de recurrencia donde el error es cero, entonces tendremos una apropiada discretización del dominio y podremos asegurar que la solución numérica reproducirá fielmente a la solución analítica. Pero si este no es el caso, entonces el objetivo es construir esquemas en los que podamos asegurar que la solución numérica se parecerá a la solución analítica del problema planteado, además de buscar que los esquemas sean estables, es decir, que pequeños cambios en el tamaño de paso no ocasionen cambios considerables en la solución numérica.

REFERENCIAS

- [1] Kreyszig, E., *Advanced Engineering Mathematics* (John Wiley & Sons, New York, 1979).
- [2] Batchelder, M., *An Introduction to Linear Difference Equations* (Harvard University Press, Cambridge, 1927).
- [3] Boole, G., *Calculus of Finite Differences* (Chelsea, 4th edition, New York, 1958).
- [4] Richtmyer, R. D. and Morton, K.W., *Difference Methods for Initial-Value Problem* (Interscience, New York, 1967).
- [5] Hildebrand, F. B., *Finite-Difference Equations and Simulations* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1968).
- [6] Mitchell, A. R. and Griffiths, *The Finite Difference Method in Partial Differential Equations* (John Wiley & Sons, New York, 1980).
- [7] Solorza, S., *Diferencias Finitas: Un Estudio Pedagógico* (Centro de Investigación Científica y de Estudios Superiores de Ensenada, B.C., México, 1999).
- [8] Cardeña-Sánchez, S., *Diferencias Finitas Exactas Para Ecuaciones Diferenciales Parciales En Una Dimensión Escalar* (Universidad Autónoma de Baja California, B.C., México, 2008).
- [9] Arfken, G. B., *Mathematical Methods for Physicists* (Academic Press, New York, 2001).