1. Derivadas usando diferencias finitas

1.1. Derivadas primeras

Dado que la derivada primera es un operador antisimétrico con respecto a la transformación $x \to -x$, nos limitamos a fórmulas completamente antisimétricas.

$$D_j = \frac{a_1(u_{j+1} - u_{j-1}) + a_2(u_{j+2} - u_{j-2}) + \ldots}{h}, \tag{1}$$

cuyos autovalores para una autofunción

$$\phi_j^{(k)} = \exp(\mathrm{i}\hat{k}x_j) = \exp(\mathrm{i}kj), \qquad \text{donde} \qquad k = \hat{k}h, \tag{2}$$

son

$$\sigma = \frac{2\mathrm{i}}{h}\sum_m a_m \sin(mk). \tag{3}$$

Para obtener los coeficientes 'óptimos' a_m, desarrollamos (3) en serie de Taylor e intentamos cancelar cuantos más términos posibles de la differencia entre (3), y el autovalor exacto que, para la derivada primera, es

$$\hat{\sigma} = \mathrm{i}\hat{k} = \frac{\mathrm{i}k}{h}. \tag{4}$$

El desarrollo de (3) no tiene más que potencias impares de k, con lo que será posible, con una molécula de $2N+1$ puntos, utilizando N coeficientes, cancelar las primeras $2N-1$ potencias de k, y el error de truncación será proporcional a $k^{2N+1}/h = (\hat{k}h)^{2N+1}/h = O(h^{2N})$. Este será el máximo orden de consistencia posible con esta molécula.

Los coeficientes de las fórmulas de los primeros órdenes son

n	a_1	a_2	a_3	error
1	1/2			h^2
2	2/3	-1/12		h^4
3	3/4	-3/20	1/60	h^6

La fórmula equivalente para diferencias finitas compactas es

$$D_j + \sum_{m=1}^{M} b_m(D_{j+m} + D_{j-m}) = \frac{1}{h}\sum_{n=1}^{N} a_n(u_{j+n} - u_{j-n}) \tag{5}$$

que implica resolver para cada evaluación un sistema linear con una banda de anchura $2M+1$. Los autovalores correspondientes son

$$\sigma = \frac{2\mathrm{i}}{h}\,\frac{\sum_{n=1}^{N} a_n \sin(nk)}{1 + 2\sum_{m=1}^{M} b_m \cos(mk)} \tag{6}$$

Procediendo como antes, tenemos en este caso $N+M$ coeficientes a nuestra disposición, lo cual nos permite conseguir un error de consistencia $O(h^{2(N+M)})$. Los coeficientes correspondientes a los casos más sencillos, utilizando $N = M$, son

n	a_1	a_2	a_3	b_1	b_2	b_3	error
1	3/4			1/4			h^4
2	20/27	25/216		4/9	1/36		h^8
3	21/32	231/1000	49/1000	9/16	9/100	1/400	h^{12}

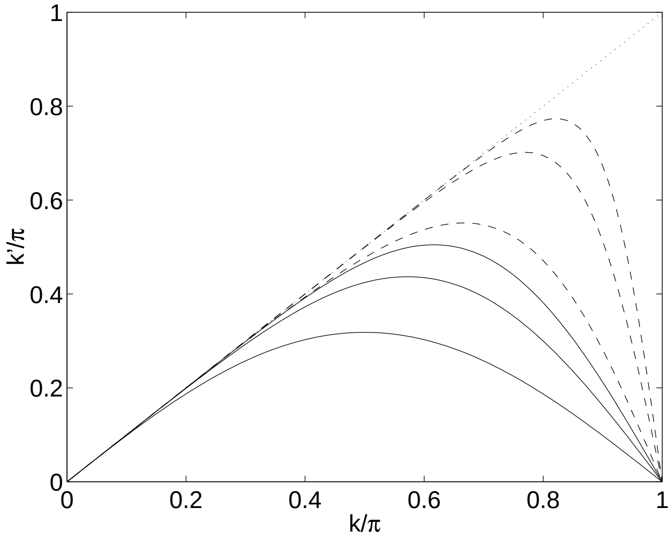

Figura 1: Números de onda modificados para las tres primeras aproximaciones de la derivada primera, utilizando, ——— , diferencias finitas; - - - - , diferencias compactas. La línea diagonal de puntos sería el resultado exacto.

Es costumbre presentar los errores de un operador aproximado en función de la diferencia entre el número de onda k, y un número de onda 'efectivo' k', que es el que genera el mismo autovalor para el operador exacto. Así, para el caso de la derivada primera, se define por la relación

$$\sigma(k) = \mathrm{i}k'/h. \tag{7}$$

Los números de onda modificados para las aproximaciones descritas en esta sección se presentan en la figura 1.

Es importante observar que todos los autovalores aproximados se anulan para $k = \pi$. Esto es consecuencia de la simetría impuesta a las fórmulas aproximadas, que hemos elegido igual a la del operador exacto. Consideremos el comportamiento del resultado del operador bajo la reflexión $L \equiv \{x \to -x\}$. Al cambiar la dirección de la variable independiente debe de cumplirse que $D\,Lu = -Du$, pero, por otra parte, el efecto de la reflexión en la autofunción (2) es equivalente a su conjugación compleja, por lo que los autovalores deben cumplir,

$$\sigma^* = -\sigma. \tag{8}$$

Es decir, los autovalores deben ser en este caso imaginarios puros, lo que se cumple en (5). Pero, al ser D un operador real, sólo puede generar autovalores complejos sobre autofunciones complejas. En los casos particulares $k = 0$, donde $\phi_j^{(0)} = 1$, y $k = \pi$, donde $\phi_j^{(\pi)} = (-1)^j$, las autofunciones son reales, y el único autovalor posible es nulo.

Otra forma de llegar al mismo resultado es observar que la autofunción $\phi^{(\pi)}$, que es simétrica alrededor de cualquier punto de colocación, no puede dar nunca un resultado distinto de cero por la aplicación de un operador antisimétrico.

En el caso extremo de una derivada espectral, que es exacta para todos los números de onda, el comportamiento anómalo de $k = \pi$ sigue existiendo, y es necesario asegurar explícitamente que ese armónico se mantiene igual a cero para cualquier ecuación con términos advectivos impares.

1.2. Derivadas segundas

Las aproximaciones numéricas deben ser, en este caso, simétricas, para ajustarse a la simetría de la derivada segunda, y tienen la forma

$$D_j = \frac{a_0 u_j + \sum_{n=1}^{N} a_n (u_{j+n} + u_{j-n})}{h^2} \tag{9}$$

para diferencias finitas, y

$$D_j + \sum_{m=1}^{M} b_m (D_{j+m} + D_{j-m}) = \frac{a_0 u_j + \sum_{n=1}^{N} a_n (u_{j+n} + u_{j-n})}{h^2} \tag{10}$$

para diferencias compactas, que dan lugar a autovalores

$$\sigma = \frac{1}{h^2} \frac{a_0 + 2\sum_{n=1}^{N} a_n \cos(nk)}{1 + 2\sum_{m=1}^{M} b_m \cos(mk)} \tag{11}$$

y deben aproximar al autovalor exacto

$$\hat{\sigma} = -\hat{k}^2. \tag{12}$$

El desarrollo de (11) tiene en este caso sólo potencias pares, por lo que el máximo orden posible de consistencia será, $O(k^{2(N+M)+2}) = O(h^{2(N+M)})$. Los coeficientes para los primeros órdenes de diferencias finitas son

n	a_0	a_1	a_2	a_3	error
1	-2	1			h^2
2	-5/2	4/3	-1/12		h^4
3	-49/18	3/2	-3/20	1/90	h^6

mientras que las fórmulas para las diferencias compactas se complican rápidamente, y la única útil es el caso $N = M = 1$, cuyos coeficientes son

n	a_0	a_1	b_1	error
1	-12/5	6/5	1/10	h^4

El número de onda efectivo, que se define en este caso como

$$\sigma(k) = -k'^2/h^2, \tag{13}$$

se presenta en la figura 2 para estas cuatro aproximaciones.

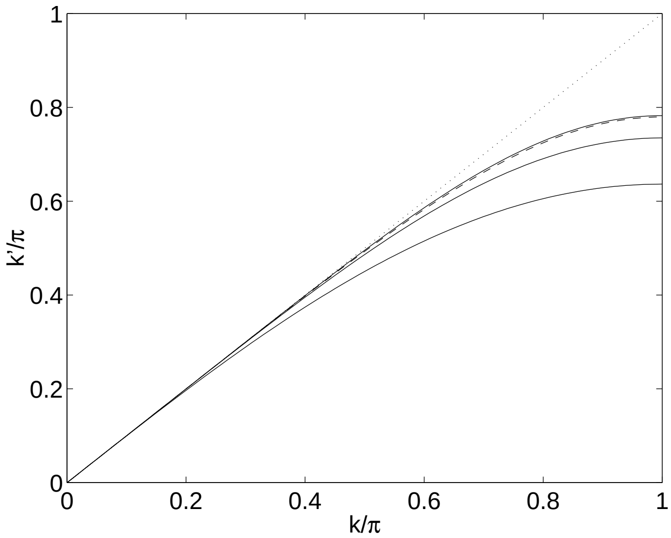

Figura 2: Números de onda modificados para las tres primeras aproximaciones de la derivada segunda, utilizando, ——— , diferencias finitas; - - - - , diferencias compactas ($N = M = 1$). La línea diagonal de puntos sería el resultado exacto.

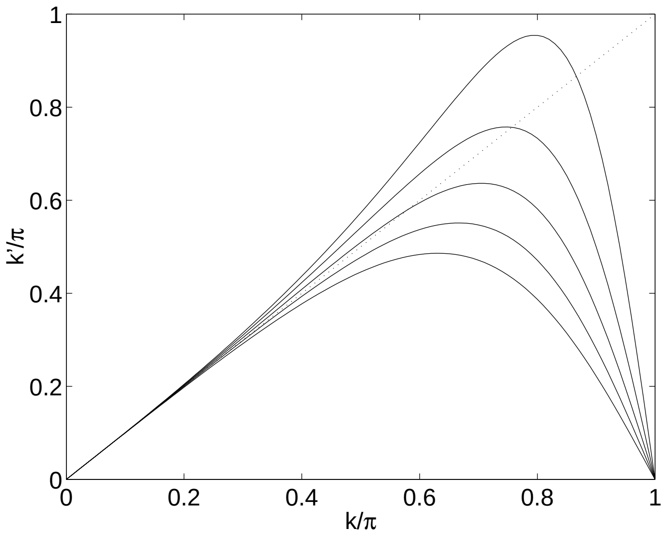

Figura 3: Números de onda modificados para la derivada primera, utilizando diferencias finitas compactas con ($N = M = 1$). El error de consistencia se ha fijado en $O(h^4)$, y el coeficiente $b_1 = 0{,}2(0{,}05)0{,}4$ se ha utilizado para variar la resolución del operador. El operador con $b_1 = 0{,}25$ tiene orden de consistencia $O(h^6)$, mientras que $b_1 = 0{,}5$ daría lugar a un operador singular en $k = \pi$, al anularse el denominador de (5). La línea diagonal de puntos sería el resultado exacto.