Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería. Vol. 4, 1, 31–40(1988)

CONDICIONES DE CONTORNO EN EL METODO DE DIFERENCIAS FINITAS CON MALLAS IRREGULARES

BIBIANA M. LUCCIONI*
y
LUIS A. GODOY**

**Laboratorio de Estructuras,*
Instituto de Ingeniería Civil,
Av. Roca 1800, Tucumán 4000, Argentina.

***Departamento de Estructuras, U.N. Córdoba,*
Casilla de Correos 916, Córdoba 5000, Argentina.

RESUMEN

En el método de diferencias finitas con mallas arbitrarias, las ecuaciones de dominio se aproximan a partir de invertir la matriz estrella para cada estación. Varios procedimientos han sido sugeridos e implementados en la literatura para tratar condiciones de contorno en este método, distinguiéndose entre: (a) las condiciones de contorno se discretizan directamente; (b) las ecuaciones de dominio se discretizan en el contorno, previa modificación de la matriz estrella; (c) en el contorno se discretizan las ecuaciones de contorno y de dominio. En el presente trabajo se discuten las posibilidades y limitaciones de cada procedimiento a partir de ejemplos simples de ecuaciones de segundo y cuarto orden.

SUMMARY

In the finite difference method for arbitrary meshes, the equations in the domain are aproximated by inverting the star matrix at each station. Several techniques have been suggested or implemented in the literature to account for boundary conditions; and may be classified as follows: (a) the boundary conditions are directly discretised; (b) the domain equations are discretised on the boundary, but the star matrix is previously modified; (c) the boundary and domain equations are discretised at the boundary. The possibilities and limitations of each technique are discussed in this work through simple examples of equations of second and fourth order.

Recibido: Septiembre 1987

 ISSN 0213–1315

INTRODUCCION

Con el desarrollo de computadoras digitales en las décadas de 1950-60, el Método de Elementos Finitos desplazó al de Diferencias Finitas (MDF) en muchos campos de aplicación en Ingeniería. Una de las razones de ese desplazamiento es la dificultad del MDF, en su forma original, para tratar contornos de forma arbitraria. La obtención de operadores de diferencias finitas cuando las estaciones de la malla están ubicadas irregularmente fue sugerida ya en 1960 por Collatz[1] y por Forsythe y Wasow[2]. La técnica fue reflotada por Jensen[3] en 1970 mediante una nueva formulación del MDF basada en invertir los desarrollos en serie de Taylor en el entorno de un punto del continuo, con lo que la limitación de mallas irregulares era resuelto. Una serie de trabajos adicionales fueron publicados en años subsiguientes[4–13].

Para el MDF con mallas irregulares, la discretización de las ecuaciones de dominio ha sido llevada a cabo en términos similares por todos los autores. Sin embargo, cuando las condiciones de contorno contienen derivadas de la función, se encuentra en las publicaciones anteriores varias técnicas, con marcadas diferencias entre ellas. Y no se explicitan en esos trabajos, elementos que permitan al usuario optar por una u otra representación del contorno.

En el presente trabajo se discuten las distintas alternativas para satisfacer las condiciones de contorno, a partir de una notación que sirve de base común a todas las técnicas. A través de un planteo general, se tratan de enfatizar las diferencias; y la aplicabilidad de cada técnica se discute con referencia a problemas unidimensionales extremadamente sencillos, pero que son suficientes para poner en evidencia las ventajas y limitaciones de cada propuesta.

MALLAS IRREGULARES EN PROBLEMAS DE VALORES DE CONTORNO

Los problemas de valores de contorno se definen a través de ecuaciones diferenciales en el dominio y condiciones de contorno que en general contienen también derivadas de la función. Considerando ecuaciones diferenciales lineales, se pueden escribir en la forma siguiente:

$$\mathbf{L}\,\mathbf{Df} = \mathbf{p} \quad \text{en} \quad \mathcal{D} \tag{1}$$

$$\mathbf{G}\,\mathbf{Df} = \mathbf{q} \quad \text{en} \quad \mathcal{C} \tag{2}$$

donde $\mathcal{D}$ es el dominio del problema y $\mathcal{C}$ su contorno. La matriz $\mathbf{L}$ contiene los coeficientes que multiplican a las derivadas de la o las funciones incógnitas contenidas en el vector $\mathbf{Df}$ y tiene tantas filas como ecuaciones diferenciales definen el problema en $\mathcal{D}$. Los coeficientes de las ecuaciones diferenciales de contorno están contenidos en $\mathbf{G}$, que tiene tantas filas como ecuaciones de contorno. Las derivadas asociadas a $\mathbf{G}$ no superan un orden menos que la derivada de mayor orden presente en las ecuaciones de dominio.

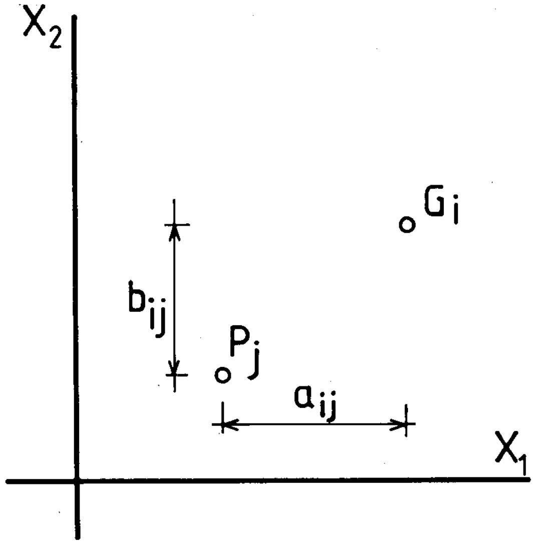

Figura 1

Con referencia a la Figura 1, la expansión en serie de Taylor de una función f en P_j hacia una estación vecina G_i en un dominio bidimensional, puede escribirse de la forma

$$(f)_{Gi} = \sum_{n=0}^{N} \sum_{m=0}^{n} \frac{a_{ij}^m}{m!} \ \frac{b_{ij}^{n-m}}{(n-m)!} \ \left(\frac{\partial^n f}{\partial x_1^m \ \partial x_2^{n-m}}\right)_{Pj} \tag{3}$$

donde a_{ij}, b_{ij} representan la distancia entre G_i y P_j, y valen

$$a_{ij} = (x_1)_i - (x_1)_j$$

$$b_{ij} = (x_2)_i - (x_2)_j \tag{4}$$

normalizadas de modo que

$$a_{ij}^2 \ + \ b_{ij}^2 \ \leq \ 1 \tag{5}$$

Si la ecuación (3) se plantea para un cierto número de estaciones de apoyo G_i, se tendrá el sistema

$$\mathbf{f}_i = \mathbf{A} \ \mathbf{Df} \tag{6}$$

en donde $\mathbf{f}_i$ contiene los valores de f en G_i; $\mathbf{Df}$ las derivadas de f en P_j; y los coeficientes de $\mathbf{A}$ (la matriz estrella) se obtienen de la (3). Las derivadas $\mathbf{Df}$ pueden obtenerse invirtiendo la matriz $\mathbf{A}$, y resultan

$$\mathbf{Df} = \mathbf{A}^{-1} \ \mathbf{f}_i \tag{7}$$

que permite calcular derivadas numéricas en un punto del dominio.

Reemplazando la (7) en la (1) se obtiene

$$\mathbf{L}\,\mathbf{A}^{-1}\,\mathbf{f}_i = \mathbf{p} \tag{8}$$

El conjunto de ecuaciones (8) para todas las estaciones de discretización del dominio puede acoplarse en un sistema global

$$\bar{\mathbf{K}}\,\bar{\mathbf{f}} = \bar{\mathbf{p}} \tag{9}$$

En general, la matriz $\bar{\mathbf{K}}$ no es simétrica pero puede resultar bandeada si se eligen razonablemente las estaciones auxiliares para cada estación de referencia.

CONDICIONES DE CONTORNO

Cuando la solución aproximada de un problema de valores de contorno se busca a través de un principio variacional, sólo deben satisfacerse en forma exacta las condiciones esenciales de contorno (prerrequisitos del funcional), mientras que las condiciones naturales (consecuencia de la estacionariedad del funcional) se aproximan. En la formulación diferencial, en cambio, se deben satisfacer localmente, no sólo las condiciones esenciales, sino también las naturales. En general, las condiciones pueden tomar dos formas diferentes: (a) Aquellas que sólo especifican valores de la función sobre el contorno (de tipo Dirichlet); (b) Las que prescriben valores de la función y sus derivadas (de tipo Newman o Churchill).

En el primer caso (Dirichlet) las condiciones se introducen directamente en el sistema global (9) una vez planteadas las ecuaciones de dominio. Cuando las condiciones de contorno contienen derivadas, el problema es mucho más complicado; varios procedimientos han sido sugeridos o implementados en la literatura, y serán discutidos a continuación. Este problema merece especial atención, dado que no todos los procedimientos propuestos son de aplicación general. Por otro lado, la forma en que tales condiciones se satisfacen afecta considerablemente los resultados.

Una posible clasificación de los procedimientos es según qué ecuaciones se discreticen en el contorno distinguiéndose entre:

– Procedimiento I: En el contorno sólo se discretizan las ecuaciones de contorno[9,10].

Este procedimiento coincide con una forma lógica de resolver el problema: en el dominio se satisfacen las (8), y sobre el contorno se plantea

$$\mathbf{G}\,\mathbf{A}^{*-1}\,\mathbf{f}_i \;=\; \mathbf{q} \;\text{ en }\; \mathcal{C} \tag{10}$$

Nótese que se ha señalado con un asterisco a la matriz estrella en el contorno: a diferencia de las de dominio, estas estrellas son totalmente descentradas. Las ecuaciones de dominio (8) se acoplan con las de contorno (10) en un sistema global. Para que la matriz de coeficientes de este último resulte cuadrada, el número de condiciones de contorno (2) debe ser igual al número de ecuaciones diferenciales de dominio (1).

– Procedimiento II: Sobre el contorno se discretizan las ecuaciones de dominio previa modificación de la matriz estrella[3,8].

El procedimiento original, propuesto por Jensen[3], consiste en discretizar las ecuaciones de dominio sobre el contorno, esto es

$$\mathbf{L}\,\mathbf{Df} = \mathbf{p} \;\text{ en }\; \mathcal{C} \tag{11}$$

pero incluyendo las condiciones de contorno como filas de la matriz estrella. En forma particionada, la ecuación (6) resulta

$$\begin{array}{c} n+1-N_c \text{ filas} \\ \\ N_c \text{ filas} \end{array} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 \\ --- \\ \mathbf{A}_2 \end{bmatrix} \mathbf{Df} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ --- \\ \mathbf{f}_2 \end{bmatrix} \tag{12}$$

donde n es el orden de la mayor derivada presente en las ecuaciones de dominio; y N_c es el número de condiciones de contorno. Reemplazando las últimas N_c filas por las condiciones de contorno, se tiene

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 \\ --- \\ \mathbf{G} \end{bmatrix} \mathbf{Df} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ --- \\ \mathbf{q} \end{bmatrix} \tag{13}$$

o bien

$$\hat{\mathbf{A}}\,\mathbf{Df} = \hat{\mathbf{f}} \;\text{ en }\; \mathcal{C} \tag{14}$$

Si existe la inversa de $\hat{\mathbf{A}}$, la ecuación sobre el contorno queda en la forma

$$\mathbf{L}\,\hat{\mathbf{A}}^{-1}\,\hat{\mathbf{f}} = \mathbf{p} \;\text{ en }\; \mathcal{C} \tag{15}$$

Snell et.al.[8] han propuesto una variante al procedimiento anterior: además de modificar la matriz estrella sobre el contorno, se modifica la matriz $\mathbf{A}$ de estaciones vecinas al contorno mediante alguna de dichas condiciones. Para ello es necesario expresar el vector de derivadas en el contorno en función de las derivadas en la estación vecina; eso se logra derivando la (3), y puede escribirse como

$$\mathbf{Df}_i = \mathbf{E}\,\mathbf{Df}_j \tag{16}$$

donde P_i es la estación de contorno y P_j la de dominio; y $\mathbf{E}$ contiene los coeficientes de las derivadas de la (3). Sobre el contorno se incluyen todas las condiciones, como en la (13), pero en la estación vecina al contorno se modifica la matriz estrella para satisfacer algunas condiciones. Si estas se simbolizan por

$$\mathbf{G}_1\,\mathbf{Df} = \mathbf{q}_1 \tag{17}$$

la ecuación de dominio de esa estación resulta ahora

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_1^* \\ \mathbf{G}_1 \ \mathbf{E} \end{bmatrix} \mathbf{Df}_j = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{q}_1 \end{bmatrix} \quad \text{en} \quad P_j \tag{18}$$

La (13) y la (18) permiten obtener las derivadas para plantear las ecuaciones de dominio en las estaciones P_i y P_j.

– Procedimiento III: Sobre el contorno se discretizan las ecuaciones de dominio y de contorno[6,7].

Esta propuesta discretiza sobre el contorno tanto las ecuaciones de dominio como las de contorno. Para mantener una matriz global cuadrada, es necesario agregar estaciones "ficticias" a las ya existentes. En general, éstas se eligen fuera del dominio, para lograr estrellas centradas que permitan calcular las derivadas numéricas con menor error que las estrellas descentradas.

RESULTADOS NUMERICOS

Con el fin de ilustrar las diferencias entre los procedimientos descritos en la sección anterior, y apreciar los méritos relativos de cada uno, se estudian numéricamente dos problemas. Un estudio apriorístico del error en estos ejemplos se hace dificultoso.

Para simplificar el planteo, los problemas elegidos son unidimensionales, y se refieren a ecuaciones diferenciales de segundo y cuarto orden. A pesar que la técnica permite el empleo de estrellas con espaciamientos irregulares, las mallas elegidas en todos los casos son de tipo regular, pero los procedimientos del MDF son los del método general. Se verá que aún para estos ejemplos extremadamente simples, se ponen en evidencia las importantes diferencias entre los procedimientos aplicados.

Ejemplo 1: Ecuación de segundo orden

Sea el problema definido en el dominio por la ecuación

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + f = \left(1 - \frac{\pi^2}{l^2}\right) \operatorname{sen}\frac{\pi x}{l} \tag{19}$$

con condiciones de contorno dadas por

$$f = 0 \quad \text{en} \quad x = 0$$

$$\frac{df}{dx} = 0 \quad \text{en} \quad x = \frac{l}{2} \tag{20}$$

En problemas como el propuesto, cualquiera de los procedimientos discutidos anteriormente es aplicable. En problemas de segundo orden, los procedimientos del tipo II resultan idénticos. En ese caso, también coinciden los procedimientos II y III, a pesar que las condiciones de contorno se introducen en un caso antes y en otro después

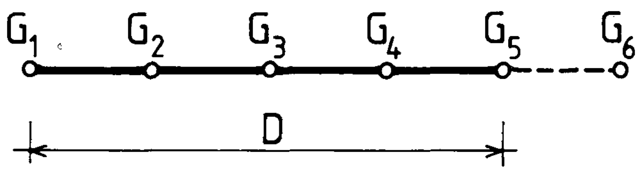

Figura 2.

Estación	Solución Exacta	MDF, Procedimiento I		II		III	
		Solución	Error, %	Solución	Error, %	Solución	Error, %
1	0.0000	0.0000	0.0	0.0000	0.0	0.0000	0.0
2	0.3827	0.3805	- 0.6	0.3911	2.2	0.3911	2.2
3	0.7071	0.7021	- 0.7	0.7226	2.2	0.7226	2.2
4	0.9239	0.9150	- 1.0	0.9442	2.2	0.9442	2.2
5	1.0000	0.9859	- 1.4	1.0220	2.2	1.0220	2.2

TABLA I. Resultados para el Ejemplo 1. Solución exacta: $f = sen(\frac{\pi x}{l})$

de invertir la estrella. Los resultados numéricos para la malla de la Figura 2 se detallan en la TABLA I.

El análisis de los resultados muestra que el método I produce valores más ajustados con la solución exacta que los restantes, aún cuando trabaja con estrellas descentradas. La diferencia está en que en este procedimiento lo que se plantea sobre el contorno es una condición que sólo involucra a la derivada primera: el error en esa derivada, obtenida a partir de una estrella no centrada de tres puntos no sólo es menor que el error en la derivada segunda con un estrella centrada, sino que compensa los errores de las restantes ecuaciones, conduciendo a una mejor aproximación de la solución exacta.

Ejemplo 2: Ecuación de cuarto orden

Se considera a continuación la ecuación de dominio

$$\frac{d^4 f}{dx^4} = K \tag{21}$$

sujeta a las siguientes restricciones de contorno

$$f = \frac{df}{dx} = 0 \quad \text{en} \quad x = 0$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{d^3 f}{dx^3} = 0 \text{ en } x = l \tag{22}$$

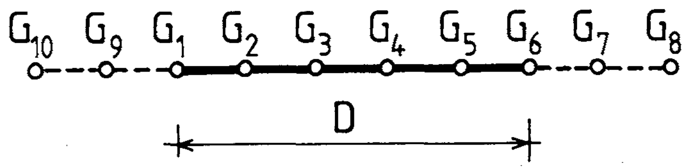

Figura 3.

Para obtener la solución discreta, se emplea la malla de la Figura 3. El procedimiento I no se presta a resolver problemas como el planteado, en el que el número de ecuaciones de contorno es mayor que el de ecuaciones diferenciales de dominio, dado que la matriz de coeficientes del sistema final no resulta cuadrada. Este inconveniente puede suplirse si se eligen adecuadamente las estaciones de la malla en las que se planten las ecuaciones diferenciales. Una posibilidad es satisfacer las ecuaciones de contorno en las estaciones 1 y 6, y sólo plantear ecuaciones de dominio en 3 y 4.

El procedimiento II original conduce en este caso un sistema global mal condicionado a consecuencia de la ecuación de dominio en la estación 5. Las modificaciones propuestas por Snell et.al.[8] mejoran notablemente el condicionamiento, y los resultados se presentan en la TABLA 2.

Nótese que en problemas de cuarto orden, no cualquiera de los procedimientos propuestos puede aplicarse, descartándose prácticamente el I y la versión original del II. Es en problemas de cuarto orden que tiene sentido el II modificado, en el que se introducen condiciones de contorno en la estrella de estaciones del dominio.

CONCLUSIONES

Del análisis de los procedimientos para satisfacer ecuaciones de contorno en el MDF con mallas irregulares, y de los ejemplos particulares presentados, pueden obtenerse algunas conclusiones de tipo general.

El procedimiento III, que discretiza las ecuaciones de dominio y de contorno sobre el contorno, es el más general, porque incluye problemas de cualquier orden, con cualquier número de ecuaciones y funciones incógnitas. Puede implementarse en forma muy simple, con el efecto de aumentar en un número no demasiado importante, las ecuaciones del sistema global. En términos de error, en ningún caso conduce a errores mínimos.

El procedimiento II, con la modificación propuesta por Snell et.al., es también de aplicación general. Sin embargo, debe notarse que en ecuaciones con más de una función incógnita, con condiciones de contorno que involucran todas las variables, para introducir las condiciones de borde es necesario acoplar las matrices estrella de las distintas variables y luego invertir la matriz resultante. En estos casos, el método

Estación	Solución Exacta $\frac{f}{k}$	MDF, Procedimiento					
		I		II		III	
		Solución	Error, %	Solución	Error, %	Solución	Error, %
1	0.0000	0.0000	0.0	0.0000	0.0	0.0000	0.0
2	0.0087	0.0089	2.3	0.0087	0.0	0.0085	- 2.3
3	0.0304	0.0311	2.3	0.0304	0.0	0.0296	2.6
4	0.0594	0.0609	2.5	0.0594	0.0	0.0577	- 2.9
5	0.0917	0.0941	2.6	0.0917	0.0	0.0890	- 2.9
6	0.1250	0.1285	2.8	0.1250	0.0	0.1211	- 3.1

TABLA II. Resultados para el Ejemplo 2. Solución exacta:

$$\frac{f}{k} = \frac{(x-l)^4}{24} - \frac{l^3}{6}(x-l) + \frac{l^4}{8}$$

puede resultar poco económico. La propuesta original de Jensen aparece como un caso particular de la anterior, restringida a problemas de segundo orden.

El procedimiento en que sólo se discretizan ecuaciones de contorno sobre el borde (I), está restringido a problemas de segundo orden, con una o más funciones incógnita.

AGRADECIMIENTOS

Los autores fueron apoyados por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas de Argentina (CONICET) durante el desarrollo del presente trabajo.

REFERENCIAS

1. L. Collatz, "*The Numerical Treatment of Differential Equations*", Springer-Verlag, Berlin, (1960).
2. G.E. Forsythe y W.R. Wasow, "*Finite Difference Methods for Partial Differential Equations*", Wiley, New York, (1960).
3. P.S. Jensen, "Finite difference techniques for variable grids", *Computers & Structures*, Vol. **2**, pp. 17-29, (1972).
4. G. Davies, B. Ford, P. Mullord y C. Snell, "Application of an irregular mesh finite difference approximation to the plate buckling problem", *Int. Conf. on Variational Methods in Engineering* (ed. H. Tottenham, C. Brebbia), Southampton University Press, (1972).
5. N. Perrone y R. Kao, "A general finite difference method for arbitrary meshes", *Computers & Structures*, Vol. **5**, pp. 45-58, (1975).

6. T. Lizka y J. Orkisz, "Finite difference method of arbitrary irregular meshes in non-linear problems in applied mechanics", *IV Conf. on Structural Mechanics in Reactor Technology* (SMIRT), San Francisco, (1977).
7. T. Lizka y J. Orkisz, "The finite difference method at arbitrary irregular grids and its application in applied mechanics", *Computers & Structures*, Vol. **11**, pp. 83-95, (1980).
8. C. Snell, D.G. Vesey y P. Mullord, "The application of a general finite difference method to some boundary value problems", *Computers & Structures*, Vol. **13**, pp. 547-552, (1981).
9. J.E. Laier y I.S.S. Cruzio, "Emprego das diferencias finitas de malha irregular na elasticidade plana", *III Congr. Latino Americano sobre Métodos Computacionales para Ingeniería*, Buenos Aires, (1982).
10. J.E. Laier, "Operadores de diferencia para malhas arbitrarias na solução de problemas da elasticidade plana", *Métodos computacionales para Ingeniería*, Vol. **2**(2), pp. 9-24, (1982).
11. D.C. Pamplona y M.A. Freire, "Uma nova formulação do metodo das diferencias finitas para a equação biharmonica com malhas irregulares arbitrarias", *IV Congr. Latino Americano sobre Métodos Computacionales para Ingeniería*, Santiago de Chile, (1983).
12. L. Demkowicz, A. Karafiat y T. Liszka, "On some convergence results with finite difference methods with irregular mesh", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. **42**, pp. 343-355, (1984).
13. L.A. Godoy, "Ill-conditioned stars in the finite difference method for arbitrary meshes", *Computers & Structures*, Vol. **22**, pp. 469-473, (1986).