

Matriz de Vandermonde generalizada para la construcción de los operadores de divergencia discreta mimética

Carlos E. Cadenas R., Orestes Montilla M.

Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias y Tecnología FACYT,

Universidad de Carabobo, Valencia, Venezuela

Email: ccadenas@uc.edu.ve, omontila@uc.edu.ve

Resumen

En este trabajo se desarrolla una generalización de las entradas de las matrices de Vandermonde que son necesarias para la construcción de los operadores diferenciales discretos miméticos de orden superior, la cual cumple con un teorema análogo en espacios discretos al teorema de divergencia clásico en 1D. El resultado obtenido es aplicado a casos particulares en mallados escalonados uniformes y no uniformes.

Palabras clave: Métodos miméticos, divergencia discreta, orden superior, mallado no uniforme.

Generalized Vandermonde matrix to build the mimetic discrete divergence operators

Abstract

In this work a generalization of the inputs of Vandermonde matrices required for the construction of the discrete divergence operator of high order is developed. These operators must satisfy an analogue divergence classic theorem on discrete space in 1D. The result is applied to particular cases on uniform and non-uniform staggered grids.

Keywords: Mimetic methods, discrete divergence, high order, nonuniform grid.

1. INTRODUCCIÓN

En el modelado y/o simulación de una gran variedad de fenómenos físicos involucrados en los procesos industriales, aparecen ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales. La mayoría de ellas pueden ser formuladas usando operadores diferenciales invariantes de primer orden, tales como, la *divergencia* y el *gradiente*. Por otro lado, es posible construir muchos esquemas de diferencias finitas en base a los operadores discretos de divergencia y gradiente, pero en la mayoría de los casos los operadores discretos clásicos no mantienen algunas propiedades físicas y matemáticas de los operadores continuos. Por ello ha surgido la necesidad de desarrollar métodos que permitan obtener los operadores que satisfagan estas propiedades; a saber, las leyes de conservación y la simetría de los operadores. También es importante que satisfagan los teoremas tradicionales del cálculo vectorial, como lo

es el teorema de Green, entre otros.

En la década de los 80's fueron publicados los trabajos pioneros de Samarskii y otros [1, 2], donde se presentan los aspectos fundamentales de los métodos de *operadores de referencia*, los cuales fueron levemente modificados en la década de los 90's, donde se destacan los aportes de Castillo y otros [3, 4]. Para esta época se les denomina métodos de *operadores de soporte*.

Shashkov [5] publica un libro sobre el método de operadores de soporte. Este texto recopila toda la información existente para el momento en dicha área. A raíz de estos trabajos se ha producido un incremento importante en la investigación. Dos de las aplicaciones más relevantes aparecen en los artículos de Hyman y

Shashkov [6, 7], en donde se resuelven numéricamente ecuaciones diferenciales que modelan fenómenos electromagnéticos.

Castillo y otros [8], presentan aproximaciones en diferencias finitas conservativas de cuarto y sexto orden, tanto para la divergencia como para el gradiente en un mallado unidimensional escalonado uniforme.

Castillo y Grone [9] presentan un enfoque matricial para la generación de operadores discretos miméticos de orden superior de la divergencia y el gradiente. Aquí se desarrolla toda la metodología necesaria para generar dichos operadores basados en la discretización escalonada uniforme de un dominio unidimensional. En este mismo año, Castillo y Yasuda [10], hacen una comparación en cuanto al orden de convergencia de la aproximación numérica de un problema unidimensional, basado en dos grupos de operadores discretos de divergencia y gradiente obtenidos por la metodología dada por Castillo y Grone.

Con base en este trabajo se extiende, a mallados no uniformes, el procedimiento descrito en [9]. También se presentan las ecuaciones algebraicas necesarias para algunos casos de mallados muy específicos, como lo son los mallados uniformes y no uniformes suaves definidos por Shashkov [5].

2. ESQUEMA DE DISCRETIZACIÓN MIMÉTICA

A continuación se describe brevemente la metodología mencionada anteriormente. Primero, se construye una matriz de divergencia S de orden adecuado, de acuerdo al tamaño de la discretización del dominio unidimensional en el que se desea resolver la ecuación diferencial, usando las fórmulas usuales para aproximar la derivada en un punto. Dicha matriz debe satisfacer un conjunto de propiedades entre las que se pueden destacar que: S es una matriz en banda, *Centro-Skew-Simetric*, véase [11], con una estructura tipo *Toeplitz* y cumple con las propiedades de suma de los elementos de las filas iguales a cero y suma de columnas iguales a $-1, 0, \dots, 0, 1$; estas dos propiedades se refieren al hecho de que al aplicar dicho operador a una constante debe dar como resultado cero y al teorema fundamental del cálculo, respectivamente. Como la matriz S construida de esta forma, usualmen-

te no cumple con las propiedades de orden de convergencia preestablecida para el operador en todo el mallado, se procede a introducir un producto interno discreto generalizado; para así, utilizando un equivalente discreto del teorema de Green se pueda encontrar la matriz de divergencia requerida con sólo premultiplicar dicha matriz por una matriz de pesos Q . El problema se reduce ahora en encontrar dicha matriz Q , que en el mejor de los casos es una matriz diagonal positiva definida y centro-simétrica. Para ello se considera en primer lugar, la construcción de una matriz de divergencia D , la cual es *Centro-Skew-Simetric*. Sus filas interiores son las mismas de la matriz S y las filas extremas están conformadas, cada una, por dos bloques de matrices. Las filas superiores por una matriz A no nula y la otra nula O y las filas inferiores se obtienen de A , tal que, se mantenga la propiedad de *Centro-Skew-Simetric*. Así nuevamente, se modifica el problema a encontrar la matriz A que cumpla con todas las propiedades miméticas mencionadas anteriormente, más las propiedades de orden de convergencia. Para conseguir esta última matriz, en virtud de que las propiedades miméticas son lineales, se puede plantear un sistema de ecuaciones lineales $Ma = b$, donde las incógnitas ubicadas en el vector a son los elementos de la matriz A , M es una matriz en bloque conformada por matrices de *Vandermonde*, matrices nulas e identidades. El vector b es elegido, tal que, se cumplan las condiciones miméticas y de orden. Al encontrar la matriz A es trivial obtener la matriz de divergencia D . Para más detalles véase [9].

La generalización que se hará de dicha metodología consiste en conformar, para un mallado escalonado no uniforme, una matriz M , para lo cual es necesario encontrar nuevas matrices de *Vandermonde* que satisfagan las condiciones de orden.

La notación usada, en este artículo, para las matrices de *Vandermonde* es la clásica, dada por:

$$V(m; x_1, \dots, x_n) = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & \cdots & x_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^m & \cdots & x_n^m \end{bmatrix} \quad (1)$$

donde m es el orden de convergencia del operador diferencial involucrado y n es la cantidad de puntos utilizados en la aproximación.

3. MATRIZ DE VANDERMONDE

Para obtener las matrices de *Vandermonde* se utiliza el procedimiento clásico de desarrollar fórmulas de aproximación para derivadas en un punto. Es decir, para obtener una fórmula de aproximación para la derivada de orden k se construye un operador discreto en base a una combinación lineal de los valores en ciertos puntos de una función polinomial de grado k . Al evaluar dicha combinación lineal para polinomios de grado menor o igual a k , se obtiene el valor exacto de la derivada. Lo recientemente expresado no es cierto para polinomios de grado mayor a k .

Con base en lo anterior, sea la función de prueba $f(x) = (x - x_{1/2+j})^n$; $n = 0, 1, \dots, k$; para obtener una divergencia discreta de orden k sobre un mallado escalonado no uniforme, donde los nodos extremos de las celdas son $x_1 < x_2 < \dots < x_m$, con $h_i = x_{i+1} - x_i$ y sus puntos medios $x_{3/2} < x_{5/2} < \dots < x_{m-1/2}$. Para detallar lo descrito anteriormente se presenta un ejemplo modelo, según se muestra en la Figura 1, para una configuración de cinco nodos distribuidos de manera no uniforme, teniendo así, cuatro celdas identificadas con el punto medio de las mismas.

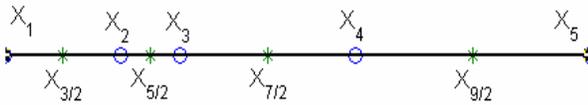


Figura 1. Mallado escalonado no uniforme.

y

$$f(x_{1/2+j}) = \sum_{i=1}^{3k/2} a_{ji} f(x_i); \quad j = 1, \dots, k \quad (2)$$

donde se considera sólo el caso que k sea par.

Para obtener la matriz de divergencia no uniforme se analizan los diferentes valores que puede tomar la variable n cuando la función de prueba es sustituida en la ecuación (2).

Si $n = 0$ se obtiene la ecuación homogénea:

$$\sum_{i=1}^{3k/2} a_{ji} = 0; \quad j = 1, \dots, k \quad (3)$$

Si $n = 1$ se obtiene:

$$\sum_{i=1}^j a_{ji} \left(-\sum_{m=i}^j h_m + \frac{h_j}{2} \right) + \sum_{i=j+1}^{3k/2} a_{ji} \left(\sum_{m=j}^{i-1} h_m - \frac{h_j}{2} \right) = 1; \quad (4)$$

$j = 1, \dots, k$

Si $n = 2$ se obtiene:

$$\sum_{i=1}^j a_{ji} \left(-\sum_{m=i}^j h_m + \frac{h_j}{2} \right)^2 + \sum_{i=j+1}^{3k/2} a_{ji} \left(\sum_{m=j}^{i-1} h_m - \frac{h_j}{2} \right)^2 = 0; \quad (5)$$

$j = 1, \dots, k$

Finalmente para toda n mayor que dos se tiene:

$$\sum_{i=1}^j a_{ji} \left(-\sum_{m=i}^j h_m + \frac{h_j}{2} \right)^n + \sum_{i=j+1}^{3k/2} a_{ji} \left(\sum_{m=j}^{i-1} h_m - \frac{h_j}{2} \right)^n = 0 \quad (6)$$

$j = 1, \dots, k$

Las ecuaciones (3)-(6) se pueden resumir en el siguiente teorema:

Teorema 1

Sea $f(x) = (x - x_{1/2+j})^n$; $n = 0, 1, \dots, k$ una función de prueba para el operador de divergencia discreto, entonces al utilizar (2) se obtiene la ecuación

$$\sum_{i=1}^j a_{ji} \left(-\sum_{m=i}^j h_m + \frac{h_j}{2} \right)^n + \sum_{i=j+1}^{3k/2} a_{ji} \left(\sum_{m=j}^{i-1} h_m - \frac{h_j}{2} \right)^n = \delta_{1n}$$

$j = 1, \dots, k$

que permite obtener los elementos de entrada de las matrices de Vandermonde, donde δ_{1n} es la delta de Kronecker, definida por:

$$\delta_{1n} = \begin{cases} 1 & \text{si } n = 1 \\ 0 & \text{si } n \neq 1 \end{cases}$$

Las entradas de las matrices de *Vandermonde* se obtienen a partir de los coeficientes de a_{ji} , que no es más que el elemento de la fila j y columna i de la matriz A que conforman las primeras filas del operador discreto mimético de divergencia D .

4. APLICACIONES

En esta sección se utilizará el Teorema 1 para obtener las entradas de las matrices de *Vandermonde*, para los casos de mallados uniformes y no uniformes suave. Para ello se considerará el intervalo $[0, 1]$.

4.1. Mallado uniforme

En el caso del mallado uniforme $x_j = \xi_j$; $j = 1, \dots, M$ donde $\xi_j = (j-1)/(M-1)$ representan los nodos para un espaciado uniforme y $M - 1$ es la cantidad de celdas involucradas en la discretización. Con esta notación se calcula el tamaño del paso h por medio de la ecuación

$$h_j = x_{j+1} - x_j = \frac{1}{M-1} = h \quad (7)$$

aplicando el Teorema 1, se obtiene

$$\sum_{i=1}^j a_{ji} \left(\frac{(2i-2j-1)h}{2} \right)^n + \sum_{i=j+1}^{3k/2} a_{ji} \left(\frac{(2i-2j-1)h}{2} \right)^n = \delta_{1n} \quad (8)$$

$j = 1, 2, \dots, k$

Al simplificar, y haciendo las operaciones algebraicas adecuadas se llega a

$$-\sum_{i=1}^{3k/2} a_{ji} (2i-2j-1)^n = -\frac{2}{h} \delta_{1n} \quad (9)$$

Se multiplica por menos uno para que las ecuaciones resultantes sean las dadas en [9].

Las matrices de *Vandermonde* en este caso vienen dadas por

$$V_j = (k; 2j-1, 2j-3, \dots, 3+2j-3k, 1+2j-3k) \quad (10)$$

$j = 1, 2, \dots, k$

4.2. Mallado no uniforme suave

En esta sección se presenta el caso con mallado no uniforme, dado por $x_j = \xi_j^2$; $j = 1, \dots, M$, donde x es una función suave que permite calcular los nodos para el espaciado no uniforme a partir de los nodos para un espaciado uniforme ξ_j descrito anteriormente. Usualmente a la discretización obtenida por medio de x_j se le denomina espacio físico y a la dada por ξ_j espacio lógico. Así

$$h_j = x_{j+1} - x_j = \frac{2j-1}{(M-1)^2} = (2j-1)h^2 \quad (11)$$

Aplicando el Teorema 1, se obtiene:

$$\sum_{i=1}^j a_{ji} \left(2(i-1)^2 - 2j^2 + 2j - 1 \right)^n + \sum_{i=j+1}^{3k/2} a_{ji} \left(2(i-1)^2 - 2j^2 + 2j - 5 \right)^n = -\frac{2}{h^2} \delta_{1n} \quad (12)$$

Para que se entienda más claramente como se obtiene la matriz de *Vandermonde* a partir de esta ecuación, se ilustra considerando el orden de convergencia $k = 4$, para $j = 1$, y $n = 1$ obteniéndose

$$-a_{11} - 3a_{12} + 3a_{13} + 13a_{14} + 27a_{15} + 45a_{16} = -\frac{2}{h^2} \quad (13)$$

De los coeficientes de esta ecuación se obtienen los elementos de la matriz de *Vandermonde*,

$$V_1 = (4; -1, -3, 3, 13, 27, 45)$$

De forma similar se construyen las otras matrices de *Vandermonde* necesarias;

$$V_j = (4; x_1, x_2, \dots, x_6) \quad j = 1, \dots, 4$$

A continuación se presenta la ecuación que permite obtener las matrices de *Vandermonde* para el caso general de un mallado uniforme dado por el x_j definido al inicio de esta sección

$$\begin{aligned} &(-2j^2 + 2j - 1)a_{j1} + (-2j^2 + 2j + 1)a_{j2} + \dots + (-2j + 1)a_{jj} + \\ &(2j - 5)a_{j(j+1)} + \dots + \left(9\frac{k^2}{2} - 12k - 2j^2 + 2j + 3 \right) a_{j\left(\frac{3k-1}{2}\right)} + \\ &\left(9\frac{k^2}{2} - 6k - 2j^2 + 2j - 3 \right) a_{j\left(\frac{3k}{2}\right)} = -\frac{2}{h^2} \end{aligned} \quad (14)$$

y así la matriz de *Vandermonde* para $j = 1, 2, \dots, k$, sería

$$V_j = (k; -2j^2 + 2j - 1, -2j^2 + 2j + 1, \dots, -2j + 1, 2j - 5, \dots, 9\frac{k^2}{2} - 12k - 2j^2 + 2j + 3, 9\frac{k^2}{2} - 6k - 2j^2 + 2j - 3) \quad (15)$$

5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En esta investigación se obtuvo una familia de funciones de prueba polinómicas, fundamentadas en las propiedades que las mismas deben cumplir para aproximar la primera derivada en un punto con un

orden de precisión preestablecido. Estas propiedades son vitales para finalmente construir el operador de divergencia discreto mimético.

De igual manera, se han presentado casos elementales de aplicación del Teorema 1, tratando de dejar claro el procedimiento usado, para que así pueda ser implementado a otros tipos de mallados no uniformes, tanto suaves como no suaves.

De una manera similar a como se construyen en este artículo las matrices de *Vandermonde* para generar el operador discreto de divergencia mimética, se pueden construir matrices de *Vandermonde* para obtener el operador discreto de gradiente mimético. Para ello se deben seleccionar otras funciones de prueba, que se adecuen a la característica de evaluar al gradiente en los puntos que representan a los nodos, los cuales denominamos también puntos enteros; de esta manera, para calcular el gradiente en dichos puntos enteros, se hace por medio de la combinación lineal de la función de prueba evaluada en los puntos que representan a las celdas, o a los que denominamos puntos medios.

Actualmente, con base en el resultado de este artículo se está desarrollando una herramienta computacional, que use cálculo simbólico e involucre el cálculo de todos los parámetros que aparecen en el producto interno generalizado que deben satisfacer los operadores de divergencia y gradiente miméticos. Estos resultados pronto serán presentados en otro artículo.

6. RECONOCIMIENTO

Esta investigación ha sido subvencionada, en parte por la partida de investigación 407 asignada a la Facultad Experimental de Ciencias y Tecnología de la Universidad de Carabobo por parte del CNU-OPSU, la cual es administrada por el Consejo de Facultad de dicha institución, así como también se utilizaron recursos provenientes de financiamiento por parte del FONACYT Carabobo.

REFERENCIAS

- [1] A. Samarskii, V. Tishkin, A. Favorski, M. Shashkov, Yu. (1981). "Operational Finite Difference Schemes", *Diff. Eqns.*, 17, 7, 854-862
- [2] A. Samarskii, V. Tishkin, A. Favorski, M. Shashkov, Yu. (1982). "Employment of the Reference-Operator Method in the Construction of Finite Difference Analogs Of Tensor Operations", *Diff. Eqns.*, 18, 7, 881-885
- [3] J. Castillo, J. M. Hyman, M. Shashkov, S. Steinberg. (1995). "The Sensitivity and Accuracy of Fourth Order Finite Difference Schemes on Nonuniform Grids in one Dimension", *An International Journal of Computers & Mathematics with Applications*, 30, 8, 41-55
- [4] J. Castillo, J. M. Hyman, M. Shashkov, S. Steinberg. (1995). "High Order Mimetic Finite Difference Methods on Nonuniform Grids", *Proc. of the Third International Conference on Spectral and High Order Methods, Special Issue of Houston Journal of Mathematics*, eds. A.V. Ilin and L.R. Scott Texas, USA, 347-361
- [5] M. Shashkov. (1996). "Conservative Finite Difference Methods on General Grid", CRC Press, Florida, USA, pp. 359
- [6] J. M. Hyman, M. Shashkov. (1998). "Mimetic Discretizations for Maxwell's Equations and Equations of Magnetic Diffusion". In J. DeSanto, ed., *Math. and Numerical Aspects of Wave Propagations*, (SIAM, Philadelphia, 1998) 561--563, *Proc. of the Fourth International Conference on Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation*, Golden, Colorado, June 1-5
- [7] J.M. Hyman, M. Shashkov. (2001). "Mimetic Finite Difference Methods for Maxwell's Equations and the Equations of Magnetic Diffusion". *Progress in Electromagnetics Research*, PIER 32, 89-121
- [8] J.E. Castillo, J.M. Hyman, M. Shashkov, S. Steinberg. (2001). "Fourth and Sixth-Order Conservative Finite Difference Approximations of the Divergence and Gradient". *Appl. Num. Math.*, 37, 171-187.
- [9] J. E. Castillo and R. D. Grone. (2003). "A Matrix Analysis Approach to Higher-Order Approximations for Divergence and Gradients Satisfying a Global Conservation Law", *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 25, 1, 128-142
- [10] J. E. Castillo, M. Yasuda. (2003). "Comparison of two matrix operator formulations for mimetic divergence and gradient discretizations", *Computational Science Research Center*. San Diego State University
- [11] A. L. Andrew. (1998). "Centrosymmetric matrices". *SIAM Rev.*, 40, 697-699.