

Esquemas en diferencias finitas

CUTRARO FEDERICO, IGLESIAS MARTÍN

1. Introducción

El método de diferencias finitas es una aproximación que se utiliza para encontrar, numéricamente, la solución de las ecuaciones que gobiernan el modelo matemático de un sistema continuo. En este método las derivadas son reemplazadas por aproximaciones en diferencias finitas, convirtiendo entonces un problema de ecuaciones diferenciales en un problema algebraico fácilmente resoluble por medios comunes (especialmente matriciales). Utilizando este método se representan a las funciones continuas en un conjunto de valores definidos en un número discreto de puntos en una región específica, a la que se define como la retícula.

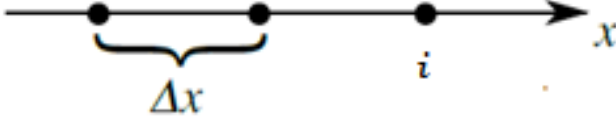


FIG. 1. Ejemplo de una retícula con espacio uniforme Δx . Se definen los puntos de retícula como los nodos i .

Si se asume que el espaciamiento de la retícula es constante, entonces $x_i = x_0 + i\Delta x$, donde i es el índice que identifica los puntos de la retícula. Para la derivada primera, el número mínimo de puntos de datos requeridos para deducir una aproximación en diferencias finitas de orden p -ésimo es $p + 1$. En el área computacional cuando se requiere representar las derivadas de funciones se construyen aproximaciones en diferencias finitas a través de aproximar la función con su serie de Taylor, cuyo método no sólo deduce las fórmulas de diferencia sistemáticamente, sino que también deduce los términos de error.

$$f(x) = f(x_i) + \frac{\Delta x}{1!} \frac{df}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x_i} + \dots + \frac{\Delta x^k}{k!} \frac{d^k f}{dx^k} \Big|_{x_i} + O_p(\Delta x) \quad (1)$$

donde $\varepsilon = x_i + \theta(x - x_i)$ y $0 < \theta < 1$. Si consideramos la derivada primera de la función $f(x)$, $\frac{df}{dx}$, con x la variable independiente.

a. Aproximación de la primera derivada

Existen distintas formas de generar una aproximación a la primera derivada. En este trabajo se mostrarán para cada caso, que se muestran a continuación, 2 variantes con distinto orden de aproximación.

1) DIFERENCIA ADELANTADA DE PRIMER ORDEN

Considerando la ecuación 1 con $k = 2$ y $x = x_i + \Delta x$, se tiene:

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \Delta x \frac{df}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{\varepsilon_p} \quad (2)$$

Despejando de la ecuación la derivada primera de $f(x)$ se obtiene que

$$\frac{df}{dx} \Big|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} - \underbrace{\frac{\Delta x}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{\varepsilon_p}}_{O_p(\Delta x)} \quad (3)$$

Siendo $O_p(\Delta x)$ el error local de truncamiento. Por lo que la aproximación en diferencia finitas adelantadas de orden 1 de la derivada es

$$\frac{df}{dx} \Big|_{x_i} \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} \quad (4)$$

2) DIFERENCIA ATRASADA DE PRIMER ORDEN

Procediendo como en el caso anterior, se toma la ecuación (1) con $k = 2$ y con $x = x_i - \Delta x$

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x \frac{df}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{\varepsilon_p} \quad (5)$$

Despejando la primera derivada de $f(x)$

$$\frac{df}{dx} \Big|_{x_i} = \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x)}{\Delta x} + \underbrace{\frac{\Delta x}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{\varepsilon_p}}_{O_p(\Delta x)} \quad (6)$$

de donde se ve que nuevamente el error de truncamiento es $O_p(\Delta x)$ y la expresión de la diferencia atrasada es

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} \approx \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} \quad (7)$$

3) DIFERENCIA CENTRADA DE SEGUNDO ORDEN

Utilizando la misma idea que antes, se toma la ecuación (1) $k = 3$ y escribiendo $f(x)$ en $x = x_i + \Delta x$ y en $x = x_i - \Delta x$ se tiene:

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \Delta x \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} + \frac{\Delta x^3}{3!} \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{\varepsilon_p} \quad (8)$$

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} - \frac{\Delta x^3}{3!} \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{\varepsilon_p} \quad (9)$$

Restando ambas ecuaciones y despejando la derivada primero se obtiene la siguiente expresión:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x)}{2\Delta x} + \underbrace{2 \frac{\Delta x^2}{3!} \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{\varepsilon_p}}_{O_p(\Delta x^2)} \quad (10)$$

Observamos que el error de truncamiento obtenido es de segundo orden $O(\Delta x^2)$. En comparación los casos anteriores se tiene que:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} O_p(\Delta x^2) < \lim_{\Delta x \rightarrow 0} O_p(\Delta x) \quad (11)$$

y la expresión para la diferencia centrada queda

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} \quad (12)$$

En caso querer incrementar el orden de exactitud de la derivada primera se tomará más términos de la aproximación de Taylor, al precio de usar más puntos de la retícula. Para ello generalizamos la idea de la aproximación en diferencias finitas de la siguiente forma

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_i \approx \frac{1}{\Delta x} \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k f(x_i + k\Delta x) \quad (13)$$

Con a_k coeficientes de peso, los cuales se puede diseñar esquemas mediante la elección de dichos coeficientes. En general, muchos pesos tienden a ser cero de modo tal que la suma sólo se realizara sobre algunos valores no nulos. Para esto es importante seguir con la suposición que el espaciamiento es constante en la retícula. Si notamos $f_i^{(n)}$ a la derivada n -ésima evaluada en el nodo i y reemplazamos en (16)

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_i \approx \frac{1}{\Delta x} \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k \left[f_i^{(0)} + f_i^{(1)}(k\Delta x) + f_i^{(2)} \frac{(k\Delta x)^2}{2!} + f_i^{(3)} \frac{(k\Delta x)^3}{3!} + \dots \right] \quad (14)$$

Con esto se define que para tener un orden de exactitud n para la derivada primera se emplea:

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} k^m a_k = \delta_{m,1} \quad \forall \quad 0 < m < n \quad (15)$$

Para satisfacer (15) se necesita resolver un sistema de $n + 1$ ecuaciones lineales para $n + 1$ incógnitas por lo que el sistema tiene solución única. Por ejemplo, si se quiere tener un esquema de segundo orden se debe usar por lo menos tres puntos de retícula. Si consideramos buscar un esquema de segundo orden para la derivada primera usando los puntos $i + 2, i + 1$ e i para un esquema adelantado, $i - 2, i - 1$ e i para un esquema atrasado. Si resolvemos el sistema (15) para dichos esquemas se obtiene que el adelantado de orden 2 es

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}}{2\Delta x} \quad (16)$$

y el atrasado de orden 2 es

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2\Delta x} \quad (17)$$

Si se desea tener esquemas de mayor orden para la misma derivada, se modifica el número de exactitud para el esquema que se desea realizar. Por ejemplo si se desea el esquema centrado para la primera derivada con orden de exactitud 4 se obtiene lo siguiente:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f_{i-2} - 8f_{i+1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}}{12\Delta x} \quad (18)$$

Se nota que en los metodos descriptos para calcular dichas diferencias finitas en un punto se debe conocer puntos vecinos, por lo que dependiendo de cual se utilice, en los extremos del intervalo puede ocurrir que no se pueda calcular la aproximacion por no tener puntos. Es por ello que en el cálculo numérico se detiene antes de llegar a dicho extremo. En las metodologías de orden de exactitud 1 se pierde 1 punto (al comienzo del intervalo en la atrasada y al final del mismo en la adelantada), para el orden 2 se pierden 2 puntos (al comienzo del intervalo en la atrasada, al final del mismo en la adelantada y en la centrada se pierde uno al comienzo y uno al final) y para el orden 4 se pierden 4 puntos (dos al comienzo y dos al final).

2. Metodología

En el presente trabajo se utilizó el método de diferencias finitas para resolver numéricamente la derivada primera de la función con los distintos esquemas y órdenes de aproximación descriptos anteriormente. Para evaluar cómo la cantidad de pasos afecta a la calidad de la aproximación se hicieron los cálculos para distintas particiones del intervalo ($n = 10, 100, 1000, 10000$) y definiendo entonces

la distancia entre ellas como $h = \frac{1}{n}$. En este caso como la función es cíclica se utilizaron condiciones de bordes para que la solución numérica ocupe todo el intervalo. En todos los casos se calculó el error punto a punto como la diferencia entre la aproximación por diferencias finitas y la derivada analítica, que se pudo calcular por ser la función seno una función cuya derivada es conocida, el coseno.

$$\varepsilon_i = \bar{u}_i - u_i \quad (19)$$

donde \bar{u}_i es la solución analítica y u_i la aproximación en diferencias finitas. A partir del cálculo del error se estimaron dos estadísticos para evaluar de manera global el error cometido. Estos estadísticos son el error cuadrático medio (RMS de sus siglas en inglés) que da una idea del error medio cometido

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \varepsilon_i^2} \quad (20)$$

y el error máximo cometido

$$\|\varepsilon\|_{\infty} = \max_{0 < i < N} (|\varepsilon_i|) \quad (21)$$

Todos los cálculos realizados se hicieron a partir de un programa escrito en Fortran 90, el cual devuelve como output dos archivos de texto en donde en el primero se almacena las aproximaciones de las diferencias finitas calculadas y en el segundo los estadísticos calculados a partir de las mismas. Por último se utilizó el software Python para graficar los resultados obteniendo la derivada analítica y las derivadas obtenidas con los esquemas de diferencia finita.

3. Resultados

De correr el programa de Fortran y graficar los datos obtenidos se obtuvieron los siguientes resultados. En la

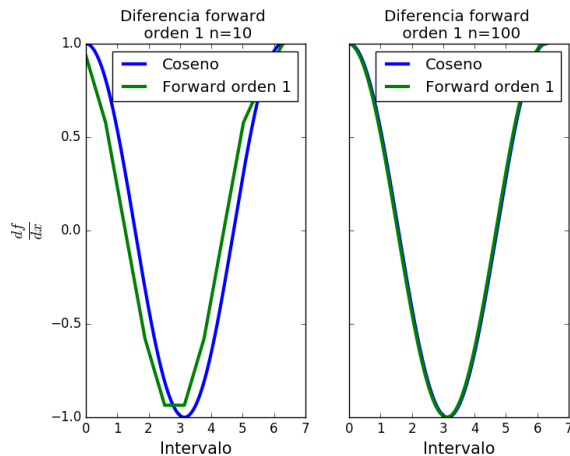


FIG. 2. Diferencia entre derivada analítica y diferencia adelantada de orden 1

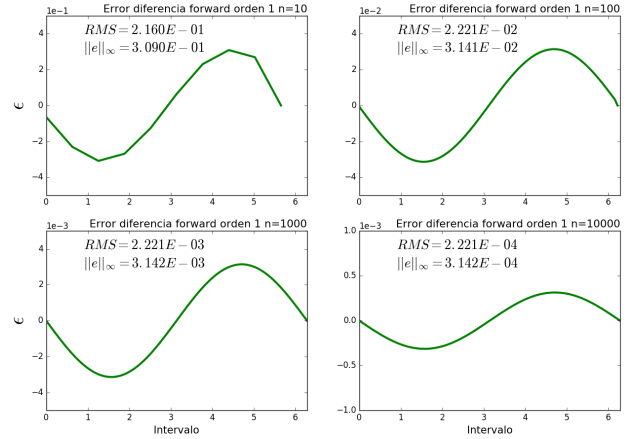


FIG. 3. Error en la diferencia adelantada para los distintos espaciados. Notar que la escala de los gráficos es distinta.

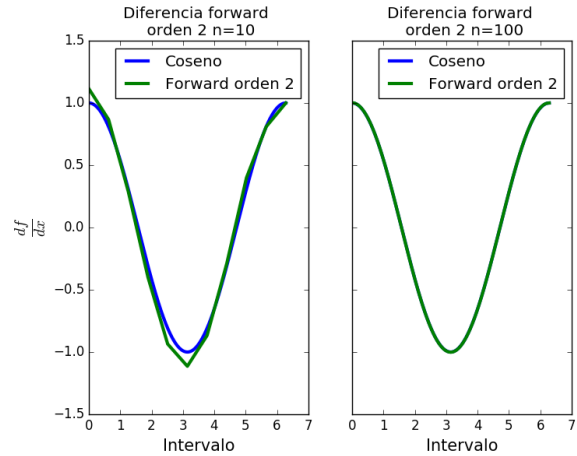


FIG. 4. Idem figura 1 pero para un orden 2 de aproximación.

figura 2 se puede ver cómo el esquema adelantado o forward de orden 1 para el caso en que se dividió el intervalo en 10 la aproximación en diferencias finitas y la derivada analítica tiene una expresión semejante pero se puede apreciar una diferencia entre ambas, cosa que ya es difícil de hacer cuando el intervalo es dividido en 100 partes y más aún para las subdivisiones mayores (Figuras no mostradas). En la figura 3 se muestra el error cometido ante las diferentes divisiones del intervalo, siendo menores cuanto más particionado se encuentre. Esto se puede verificar claramente con los estadísticos calculados que descienden un orden de magnitud al disminuir la distancia entre las distintas particiones. Como se comentó en la introducción teórica el error cometido está relacionado, para el caso de una aproximación de orden 1, con la segunda derivada de la función, $\text{sen}(x)$ en este caso, que es lo que se obtuvo. Las figuras 4 y 5 son idénticas a las anteriores pero para el esquema adelantado de orden 2. Se

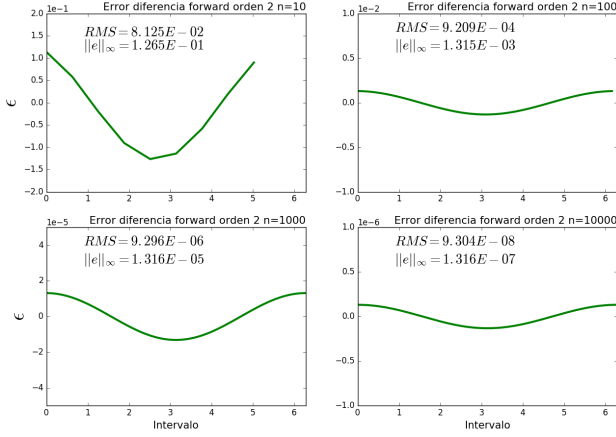


FIG. 5. Idem figura 2 pero para un orden 2 de aproximación.

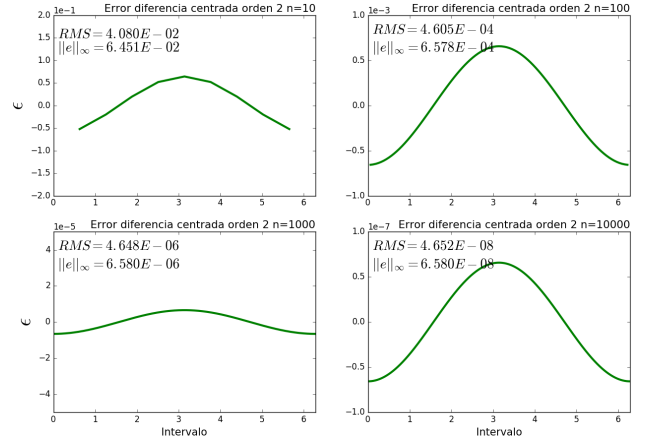


FIG. 7. Idem figura 2 pero para una aproximación centrada de orden 2.

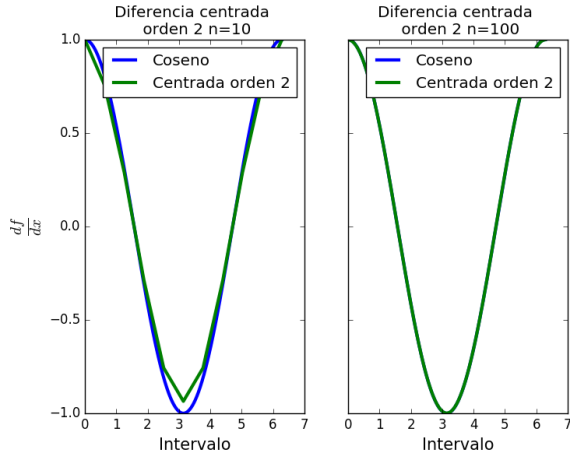


FIG. 6. Idem figura 1 pero para una aproximación centrada de orden 2.

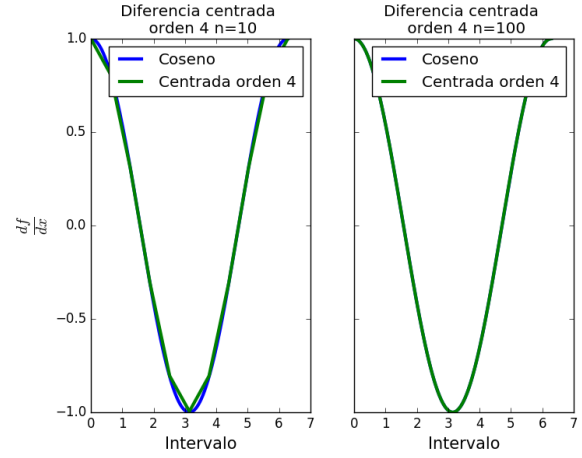


FIG. 8. Idem figura 1 pero para una aproximación centrada de orden 4.

puede apreciar claramente cómo la aproximación es mejor que en el caso anterior incluso al dividir al intervalo en 10 y cómo, ante las diferentes divisiones, el error se reduce en 2 órdenes de magnitud. En este caso al ser una aproximación de orden 2 el error está asociado a la tercera derivada de la función que es lo que se debería observar. Para el caso de las diferencias atrasadas se obtienen resultados similares a los de las adelantadas con errores del mismo orden de magnitud (Figuras no mostradas). Resultados diferentes se obtienen para las diferencias centradas. Para el caso de orden 2 la aproximación es mejor que en los otros casos incluso para una división del intervalo en 10 partes observándose errores del mismo orden de magnitud pero menores (Figuras 6 y 7). Para el caso de orden 4 se obtuvo la mejor aproximación de todos los métodos utilizados. Esto es así debido a que el error que se comete presenta el menor orden de magnitud, inclusive para pocas particiones en el intervalo espacial (Figuras 8 y 9).

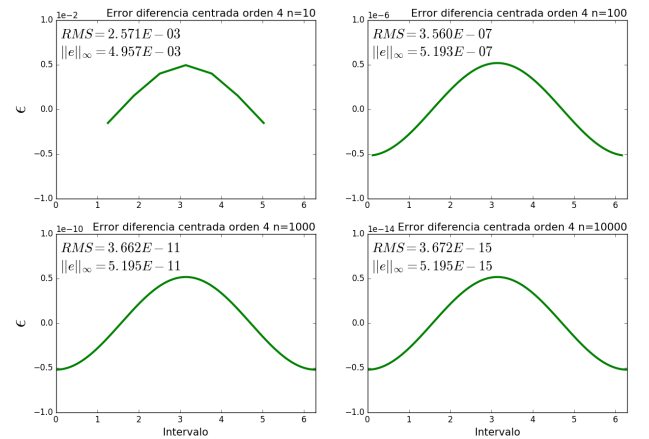


FIG. 9. Idem figura 2 pero para una aproximación centrada de orden 4.

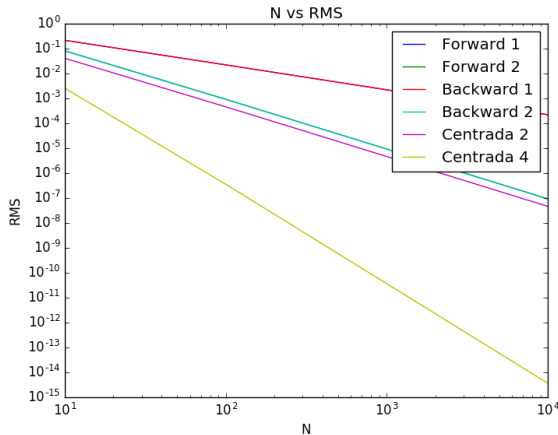


FIG. 10. Error de la aproximación en función de la cantidad de intervalos.

Con el objetivo de representar gráficamente los diferentes órdenes de magnitud de los distintos métodos se realizó un gráfico del (error cuadrático medio) en función de la cantidad de intervalos en escala logarítmica. En la figura 10 se puede observar cómo ante un mayor grado de aproximación la pendiente de la recta es mayor y por lo tanto ante un aumento en la cantidad de intervalos el error cometido se reduce en una magnitud mayor. Se aclara que la forward de orden 1 y 2 presentan valores idénticos a las backward de igual orden y es por ello que no se pueden distinguir en el gráfico.

4. Conclusiones

En este informe se pretendió representar distintos esquemas en diferencia finita para aproximar una función analítica con derivada conocida, de modo tal de poder ver cómo se comportan dichos esquemas en función del orden de exactitud que presentaron y de la cantidad de intervalos. Se pudo concluir con estos experimentos que los esquemas que van mostrando una mejor representación de la realidad son aquellos cuyo orden de exactitud son mayores y mejoran si la retícula presenta mayores particiones. Sin embargo, el hecho de requerir una mayor exactitud en los esquemas numéricos y utilizar particiones de la retícula más finas puede llevar en sistemas complejos una demanda muy alta en el costo computacional. Es así que cuando se desee aproximar a un problema de la naturaleza mediante métodos numéricos uno debe tener en cuenta no sólo con qué rigurosidad se desee acercarse a la realidad sino hasta qué punto es óptimo hacerlo y cuánta será la demanda que se le quiera imponer.

5. Referencias

- [1] David A. Randall (2009). An Introduction to Numerical Modeling of the Atmosphere. Department of Atmospheric Science Colorado State University
- [2] Carrillo Ledesma y Mendoza Bernal(2015). Introducción al Método de Diferencias Finitas y su Implementación Computacional. Facultad de Ciencias, UNAM.
- [3] W.V.Chaves (2010).Diferencias Finitas. Universidad de Castilla-La Mancha.Cap.4