

DIFERENCIAS FINITAS

INTRODUCCIÓN

Modelación computacional en las ciencias y las ingenierías como
apoyo en el proceso enseñanza-aprendizaje
(PAPIME-PE101019)

Instituto de Geofísica
Universidad Nacional Autónoma de México



Esta obra está bajo una [Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/).



- 1 DERIVADAS NUMÉRICAS DE PRIMER ORDEN
Forward, Backward, Centered
Aproximaciones con más puntos
- 2 EJERCICIO 1.
- 3 DERIVADAS NUMÉRICAS DE ORDEN SUPERIOR
- 4 REFERENCIAS
- 5 CRÉDITOS

CONTENIDO

- ① DERIVADAS NUMÉRICAS DE PRIMER ORDEN
Forward, Backward, Centered
Aproximaciones con más puntos
- ② EJERCICIO 1.
- ③ DERIVADAS NUMÉRICAS DE ORDEN SUPERIOR
- ④ REFERENCIAS
- ⑤ CRÉDITOS

Diferencias Finitas (FD) es una técnica para aproximar derivadas que permite obtener soluciones numéricas a Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (ODE) y Parciales (PDE).

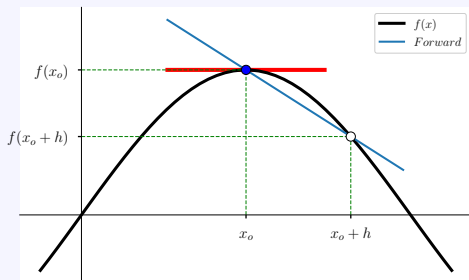
- Desarrollada por Leonhard Euler en 1768. Una excelente referencia de este método es [1].
- La idea es muy simple y se basa en la estimación de la derivada de una función mediante la razón de dos diferencias, por ejemplo:

APROXIMACIÓN HACIA ADELANTE (*Forward*)

Para una función $f(x)$, la derivada en el punto x_o está definida por:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_o} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_o + h) - f(x_o)}{h}$$

En la gráfica observamos que la línea azul intenta aproximar a la tangente de la curva $f(x)$ en $x = x_o$ (línea roja).



La aproximación en FD se mejora reduciendo h .

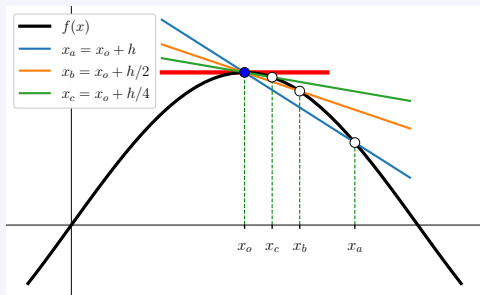
- Para una valor finito de h , se introduce un error, el cual tiende a cero cuando $h \rightarrow 0$.

REDUCIENDO LA h

En la gráfica, la línea roja representa la derivada exacta (pendiente en el punto azul).

Las líneas de colores indican diferentes aproximaciones a la derivada para distintos valores de h .

Se observa que conforme h se hace más pequeña, la aproximación a la derivada es cada vez mejor.



$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_o} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_o + h) - f(x_o)}{h}$$

- Para analizar el error hagamos una expansión en Series de Taylor alrededor del punto x_o :

$$\begin{aligned} f(x) = & f(x_o) + f'(x_o)(x - x_o) + f''(x_o)\frac{(x - x_o)^2}{2!} + \\ & f'''(x_o)\frac{(x - x_o)^3}{3!} + \cdots + f^{(n)}(x_o)\frac{(x - x_o)^n}{n!} + \\ & R_n(x) \end{aligned}$$

$R_n(x)$ representa el residuo, véase el Teorema de Taylor en [3].

- Ahora evaluamos la serie anterior en $x = x_o + h$:

$$f(x_o + h) = f(x_o) + hf'(x_o) + \frac{h^2}{2!}f''(x_o) + \frac{h^3}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^4).$$

donde $\mathcal{O}(h^4)$ representa términos de orden mayores o iguales a h^4 .

- La expansión anterior se puede reescribir como sigue:

$$\underbrace{\frac{f(x_o + h) - f(x_o)}{h}}_{D_+f(x_o)} = f'(x_o) + \frac{h}{2!}f''(x_o) + \frac{h^2}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^3).$$

y restando $f'(x_o)$ de ambos lados obtenemos el error absoluto de la aproximación:

$$D_+f(x_o) - f'(x_o) = \underbrace{\frac{h}{2!}f''(x_o) + \frac{h^2}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^3)}_{\mathcal{O}(h)}$$

Esta es una aproximación de primer orden $\mathcal{O}(h)$.

- Similarmente, si evaluamos la expansión en Series de Taylor en $x = x_o - h$ obtenemos:

$$f(x_o - h) = f(x_o) - hf'(x_o) + \frac{h^2}{2!}f''(x_o) - \frac{h^3}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^4).$$

y por lo tanto:

$$\underbrace{\frac{f(x_o) - f(x_o - h)}{h}}_{D_-f(x_o)} = f'(x_o) - \frac{h}{2!}f''(x_o) + \frac{h^2}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^3).$$

cuyo error absoluto es:

$$D_-f(x_o) - f'(x_o) = \underbrace{-\frac{h}{2!}f''(x_o) + \frac{h^2}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^3)}_{\mathcal{O}(h)}$$

Esta aproximación también es de primer orden $\mathcal{O}(h)$.

- Si restamos las expansiones evaluadas en $x_o + h$ y $x_o - h$ obtenemos:

$$f(x_o + h) = f(x_o) + hf'(x_o) + \frac{h^2}{2!}f''(x_o) + \frac{h^3}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^4)$$

—

$$f(x_o - h) = f(x_o) - hf'(x_o) + \frac{h^2}{2!}f''(x_o) - \frac{h^3}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$f(x_o + h) - f(x_o - h) = 2hf'(x_o) + 2\frac{h^3}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{f(x_o + h) - f(x_o - h)}{2h}}_{D_0 f(x_o)} = f'(x_o) + \frac{h^2}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^3).$$

- Observe que en este caso el error absoluto es de orden cuadrático:

$$D_0 f(x_o) - f'(x_o) = \underbrace{\frac{h^2}{3!}f'''(x_o)}_{\mathcal{O}(h^2)} + \mathcal{O}(h^3).$$

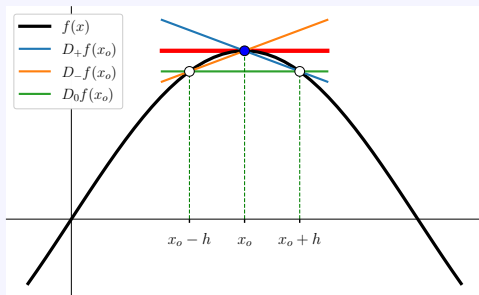
FORWARD, BACKWARD, CENTERED

- Hacia adelante (Forward): $D_+f(x_o) = \frac{f(x_o + h) - f(x_o)}{h}$
- Hacia atrás (Backward): $D_-f(x_o) = \frac{f(x_o) - f(x_o - h)}{h}$
- Centradas (Centered): $D_0f(x_o) = \frac{f(x_o + h) - f(x_o - h)}{2h}$

FORWARD, BACKWARD, CENTERED

La línea azul y la línea naranja son aproximaciones de primer orden, Forward y Backward respectivamente.

La línea verde es una aproximación de segundo orden, Centrada, y su pendiente es muy similar a la de la línea roja (derivada exacta).



APROXIMACIONES CON MÁS PUNTOS

- Las aproximaciones D_+ y D_- se hacen usando un punto a la derecha y un punto a la izquierda de x_o , respectivamente. En ambos casos se obtiene una precisión de $\mathcal{O}(h)$.
- En el caso de D_0 se usan dos puntos, uno a la izquierda y otro a la derecha de x_o y se obtiene una precisión de $\mathcal{O}(h^2)$.
- Es posible usar más puntos en la aproximación, pues entre más puntos se usen, la aproximación será mejor.
- Para ello usaremos la siguiente la notación con subíndices:

$$\begin{array}{llll}
 x_o \equiv x_i, & f(x_i) \equiv f_i, & \frac{df(x_i)}{dx} \equiv f'_i, & \dots \\
 x_o + h \equiv x_{i+1}, & f(x_{i+1}) \equiv f_{i+1}, & \frac{df(x_{i+1})}{dx} \equiv f'_{i+1}, & \dots \\
 x_o - h \equiv x_{i-1}, & f(x_{i-1}) \equiv f_{i-1}, & \frac{df(x_{i-1})}{dx} \equiv f'_{i-1}, & \dots \\
 x_o + 2h \equiv x_{i+2}, & f(x_{i+2}) \equiv f_{i+2}, & \frac{df(x_{i+2})}{dx} \equiv f'_{i+2}, & \dots \\
 x_o - 2h \equiv x_{i-2}, & f(x_{i-2}) \equiv f_{i-2}, & \frac{df(x_{i-2})}{dx} \equiv f'_{i-2}, & \dots \\
 & \vdots & &
 \end{array}$$

APROXIMACIONES CON MÁS PUNTOS

Supongamos que deseamos hacer una aproximación como la que sigue:

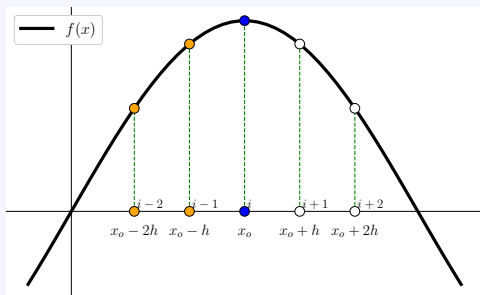
$$f'_i = Af_i + Bf_{i-1} + Cf_{i-2} + \mathcal{O}(h^2)$$

En la fórmula anterior deseamos aproximar f'_i usando f_i , f_{i-1} y f_{i-2} y para ello debemos encontrar los coeficientes A , B y C .

EJEMPLO 1: D_{-2} (DOS PUNTOS A LA IZQUIERDA DE x_o)

En la gráfica de la derecha se marca con azul el punto donde se desea realizar la aproximación y con naranja los puntos auxiliares.

Los dos puntos naranjas y el punto azul (tres puntos) serán usados para encontrar los coeficientes A , B y C .



APROXIMACIONES CON MÁS PUNTOS

- Para encontrar los coeficientes A , B y C , usamos la expansión en series de Taylor alrededor de x_o y la evaluamos en $x_o - h = x_{i-1}$ y en $x_o - 2h = x_{i-2}$:

$$f_{i-1} = f_i + (-h)f'_i + \frac{(-h)^2}{2!}f''_i + \frac{(-h)^3}{3!}f'''_i + \mathcal{O}(h^3)$$

$$f_{i-2} = f_i + (-2h)f'_i + \frac{(-2h)^2}{2!}f''_i + \frac{(-2h)^3}{3!}f'''_i + \mathcal{O}(h^3)$$

Nótese que $(x_{i-1} - x_i) = -h$ y $(x_{i-2} - x_i) = -2h$

- Sustituimos estas ecuaciones en la fórmula:

$$f'_i = Af_i + Bf_{i-1} + Cf_{i-2}$$

y resolvemos el sistema lineal resultante para obtener los coeficientes.

APROXIMACIONES CON MÁS PUNTOS

- Entonces:

$$f'_i = Af_i + B \left(f_i - hf'_i + \frac{h^2}{2} f''_i - \frac{h^3}{6} f'''_i + \dots \right) + C \left(f_i - 2hf'_i + \frac{4h^2}{2} f''_i - \frac{8h^3}{6} f'''_i + \dots \right)$$

$$f'_i = (A + B + C)f_i - (B + 2C)hf'_i + \left(\frac{B}{2} + 2C \right) h^2 f''_i + \mathcal{O}(h^3)$$

Nótese que no necesitamos más términos para poder encontrar los tres coeficientes.

- Para que ambos lados de la ecuación anterior sean iguales se debe cumplir lo siguiente:

$$\begin{aligned} A + B + C &= 0 \\ B + 2C &= -\frac{1}{h} \\ B + 4C &= 0 \end{aligned} \implies \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{1}{h} \\ 0 \end{pmatrix}$$

APROXIMACIONES CON MÁS PUNTOS

- Resolviendo el sistema lineal anterior obtenemos:

$$A = \frac{3}{2h} \quad B = -\frac{2}{h} \quad C = \frac{1}{2h}$$

- Por lo tanto:

$$f'(x_i) = \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2h} = D_{-2}f(x_i)$$

Observe que hemos llamado al resultado $D_{-2}f(x_i)$ que indica que se usan dos puntos a la izquierda de x_i . El orden de esta aproximación es $\mathcal{O}(h^2)$.

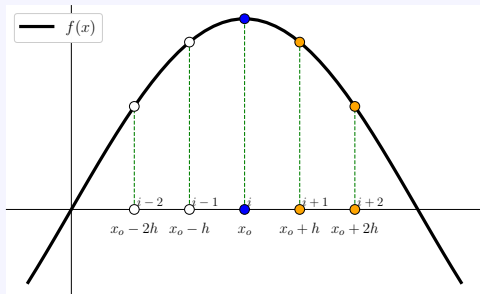
APROXIMACIONES CON MÁS PUNTOS

EJEMPLO 2: D_{+2} (DOS PUNTOS A LA DERECHA DE x_o)

Otra aproximación:

$$f'_i = Af_i + Bf_{i+1} + Cf_{i+2} + \mathcal{O}(h^2)$$

Ahora se desean usar dos puntos a la derecha de i , observe los puntos color naranja de la figura.



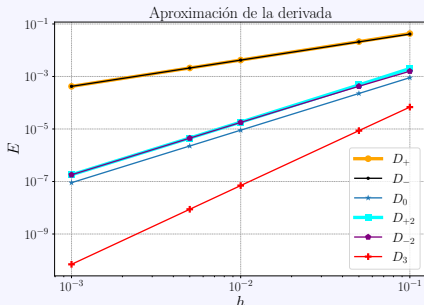
Es posible encontrar los coeficientes de A , B y C de esta aproximación siguiendo la estrategia explicada antes.

EJEMPLO 3.

Sea $u(x) = \sin(x)$. (1) Aproximar $u'(x) = \cos(x)$ en $x_o = 1$, es decir $\cos(1) \approx 0.5403$, usando D_- , D_+ , D_0 , D_{-2} , D_{+2} y $D_3 = \frac{1}{6h}[2u_{i+1} + 3u_i - 6u_{i-1} + u_{i-2}]$ y calcular el error absoluto: $|\cos(1) - D_i|$ para $i = -, +, 0, -2, +2, 3$.

Solución:

h	D_+	D_-	D_0	D_{+2}	D_{-2}	D_3
0.100	0.042939	0.041138	9.000537e-04	2.004728e-03	1.584693e-03	6.820693e-05
0.050	0.021257	0.020807	2.250978e-04	4.761431e-04	4.235730e-04	8.649142e-06
0.010	0.004216	0.004198	9.004993e-06	1.821981e-05	1.779908e-05	6.994130e-08
0.005	0.002106	0.002101	2.251257e-06	4.528776e-06	4.476184e-06	8.754000e-09
0.001	0.000421	0.000421	9.005045e-08	1.803108e-07	1.798903e-07	6.997947e-11



Observamos, en la gráfica *log – log* que el error se comporta como:

$$\log(E(h)) \approx p \log h + \log |C|$$

entonces:

$$E(h) \approx C h^p$$

es decir, la pendiente de cada línea recta es el orden de la aproximación.

CONTENIDO

- ① DERIVADAS NUMÉRICAS DE PRIMER ORDEN
Forward, Backward, Centered
Aproximaciones con más puntos
- ② EJERCICIO 1.
- ③ DERIVADAS NUMÉRICAS DE ORDEN SUPERIOR
- ④ REFERENCIAS
- ⑤ CRÉDITOS

EJERCICIO 1.

- ① Calcular los coeficientes A , B y C para D_{+2} .
- ② Demostrar que el error absoluto de las aproximaciones D_{-2} y D_{+2} es $\mathcal{O}(h^2)$.
- ③ Calcular los coeficiente de la aproximación $D_3 f(x) = Af_{i+1} + Bf_i + Cf_{i-1} + Df_{i-2}$ y demostrar que el orden de esta aproximación es $\mathcal{O}(h^3)$.
- ④ Reproducir la tabla y la gráfica del ejemplo 3, para ello realice los siguientes pasos:
 - A Abra el notebook `E01.DerivadasNum.ipynb` del repositorio Mixbaal (<https://github.com/luiggix/Mixbaal>).
 - B Observe que ya se encuentran implementados los casos para D_+ , D_+ y D_0 . Realice las implementaciones para las aproximaciones faltantes y obtenga la tabla y la gráfica final.

CONTENIDO

- ① DERIVADAS NUMÉRICAS DE PRIMER ORDEN
Forward, Backward, Centered
Aproximaciones con más puntos
- ② EJERCICIO 1.
- ③ DERIVADAS NUMÉRICAS DE ORDEN SUPERIOR
- ④ REFERENCIAS
- ⑤ CRÉDITOS

DERIVADAS DE ORDEN SUPERIOR

- Es posible encontrar aproximaciones a derivadas de orden mayor a uno. Por ejemplo, para orden 2, se escribe la expansión en series de Taylor de $f(x)$, se evalúa en $x_o + h$ y en $x_o - h$ y luego se hace la suma:

$$\begin{aligned}
 f(x_o + h) &= f(x_o) + hf'(x_o) + \frac{h^2}{2!}f''(x_o) + \frac{h^3}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^4) \\
 + \\
 f(x_o - h) &= f(x_o) - hf'(x_o) + \frac{h^2}{2!}f''(x_o) - \frac{h^3}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^4) \\
 \hline
 f(x_o + h) + f(x_o - h) &= 2f(x_o) + h^2 f''(x_o) + \mathcal{O}(h^4) \\
 \\
 \Rightarrow \underbrace{\frac{f(x_o + h) - 2f(x_o) + f(x_o - h)}{h^2}}_{D^2 f(x_o)} &= f''(x_o) + \frac{1}{12}h^2 f''''(x) + \mathcal{O}(h^4).
 \end{aligned}$$

cuyo error absoluto es:

$$D^2 f(x) - f''(x) = \frac{1}{12}h^2 f''''(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

Como se puede observar, esta aproximación es de orden $\mathcal{O}(h^2)$.

DERIVADAS DE ORDEN SUPERIOR

- Otra manera de obtener las aproximaciones para derivadas de orden mayor que 1 es aplicando repetidamente las diferencias de primer orden.
- Por ejemplo, se puede ver que:

$$D^2 f(x) = D_+ D_- f(x)$$

pues

$$\begin{aligned} D_+(D_- f(x)) &= \frac{1}{h} [D_+ f(x+h) - D_- f(x)] \\ &= \frac{1}{h} \left[\left(\frac{f(x+h) - f(x)}{h} \right) - \left(\frac{f(x) - f(x-h)}{h} \right) \right] \\ &= \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} = D^2 f(x) \end{aligned}$$

DERIVADAS DE ORDEN SUPERIOR

- Alternativamente también es posible hacer:

$$D^2 f(x) = D_- D_+ f(x)$$

o

$$D^2 f(x) = \hat{D}_0(\hat{D}_0 f(x))$$

Donde \hat{D}_0 es una aproximación de primer orden en diferencias centradas usando $h/2$. Verifique que ambas aproximaciones son válidas.

- Usando la notación con subíndices se puede escribir:

$$f''(x) = \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \approx \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} = D^2 f(x) \quad (1)$$

CONTENIDO

- ① DERIVADAS NUMÉRICAS DE PRIMER ORDEN
Forward, Backward, Centered
Aproximaciones con más puntos
- ② EJERCICIO 1.
- ③ DERIVADAS NUMÉRICAS DE ORDEN SUPERIOR
- ④ REFERENCIAS
- ⑤ CRÉDITOS



[1] R.J. Leveque,
*Finite Difference Method for Ordinary and Partial Differential Equations:
Steady State and Time-Dependent Problems* ,
Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, **2007**.



[2] Y. Saad
Iterative Methods for Sparse Linear Systems.
PWS/ITP 1996.
Online: <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/books.html>, **2000**



[3] Richard Burden and J. Douglas Faires
Numerical Analysis
Cengage Learning; 9 edition (August 9, **2010**)

CONTENIDO

- ① DERIVADAS NUMÉRICAS DE PRIMER ORDEN
Forward, Backward, Centered
Aproximaciones con más puntos
- ② EJERCICIO 1.
- ③ DERIVADAS NUMÉRICAS DE ORDEN SUPERIOR
- ④ REFERENCIAS
- ⑤ CRÉDITOS

Dr. Luis M. de la Cruz Salas

Departamento de Recursos Naturales

Instituto de Geofísica

Universidad Nacional Autónoma de México



Trabajo realizado con el apoyo del Programa UNAM-DGAPA-PAPIME PE101019

