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

1. Derivadas numéricas de primer orden
   - Forward, Backward, Centered
   - Aproximaciones con más puntos
   - Ejercicio 1.
2. Derivadas numéricas de orden superior
3. Referencias
4. Créditos

Contenido

1. Derivadas numéricas de primer orden
   - Forward, Backward, Centered
   - Aproximaciones con más puntos
   - Ejercicio 1.
2. Derivadas numéricas de orden superior
3. Referencias
4. Créditos

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

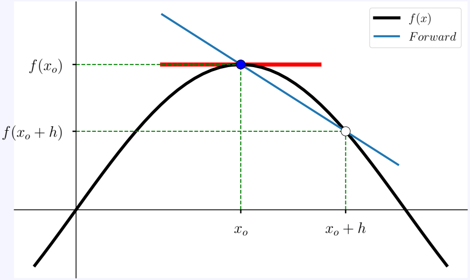
- Desarrollada por Leonhard Euler en 1768. Una excelente referencia de este método es [1].
- La idea es muy simple y se basa en la estimación de la derivada de una función mediante la razón de dos diferencias, por ejemplo:

Aproximación hacia adelante (*Forward*)

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

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

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.

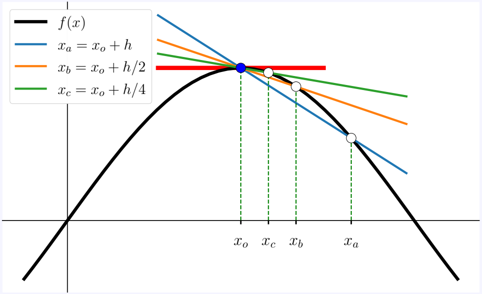
- Para una valor finito de h, se introduce un error, el cual tiende a cero cuando $h \to 0$.

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.



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

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

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

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

- Ahora evalúamos 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:

$$
\begin{array}{rcl}
f(x_o+h) & = & f(x_o) + hf'(x_o) + \frac{h^2}{2!}f''(x_o) + \frac{h^3}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^4) \\
- & & \\
f(x_o-h) & = & f(x_o) - hf'(x_o) + \frac{h^2}{2!}f''(x_o) - \frac{h^3}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^4) \\
\hline
f(x_o+h) - f(x_o-h) & = & 2hf'(x_o) + 2\frac{h^3}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^4)
\end{array}
$$

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

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

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

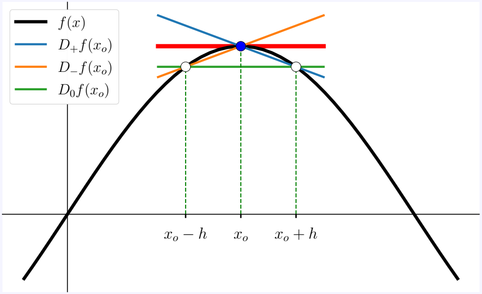
Forward, Backward, Centered

- Hacia adelante (Forward): $D_+ f(x_o) = \dfrac{f(x_o+h) - f(x_o)}{h}$
- Hacia atrás (Backward): $D_- f(x_o) = \dfrac{f(x_o) - f(x_o-h)}{h}$
- Centradas (Centered): $D_0 f(x_o) = \dfrac{f(x_o+h) - f(x_o-h)}{2h}$

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:

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

Aproximaciones con más puntos

Supongamos que deseamos hacer una aproximación como la que sigue:

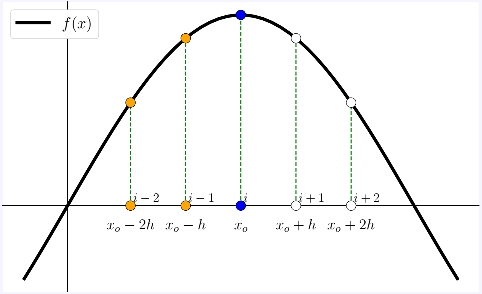
$$f_i' = Af_i + Bf_{i-1} + Cf_{i-2} + \mathcal{O}(h^2)$$

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 $x_o - 2h = x_{i-2}$:

$$
\begin{aligned}
f_{i-1} &= f_i + (-h) f_i' + \frac{(-h)^2}{2!} f_i'' + \frac{(-h)^3}{3!} f_i'' + \mathcal{O}(h^3) \\
f_{i-2} &= f_i + (-2h) f_i' + \frac{(-2h)^2}{2!} f_i'' + \frac{(-2h)^3}{3!} f_i'' + \mathcal{O}(h^3)
\end{aligned}
$$

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

- Sustituimos estas ecuaciones en la fórmula:

$$
f_i' = A f_i + B f_{i-1} + C f_{i-2}
$$

  y resolvemos el sistema lineal resultante para obtener los coeficientes.

Aproximaciones con más puntos

- Entonces:

$$
\begin{aligned}
f_i' &= Af_i + B\left(f_i - hf_i' + \frac{h^2}{2}f_i'' - \frac{h^3}{6}f_i'' + \dots\right) + \\
&\quad C\left(f_i - 2hf_i' + \frac{4h^2}{2}f_i'' - \frac{8h^3}{6}f_i'' + \dots\right) \\
f_i' &= (A+B+C)f_i - (B+2C)hf_i' + \left(\frac{B}{2} + 2C\right)h^2 f_i'' + \mathcal{O}(h^3)
\end{aligned}
$$

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:

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

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:

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

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 $\mathcal{O}(h^2)$.

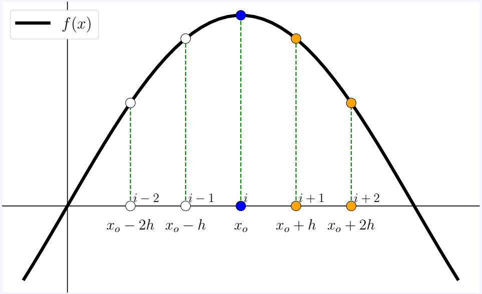
Aproximaciones con más puntos

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.



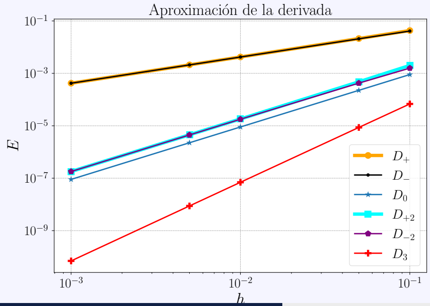
Es posible encontrar los coeficientes de A, B y C de esta aproximación siguiendo la estrategia explicada antes.

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: Tabla de errores absolutos

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.

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
Ejercicio 1.

2 Derivadas numéricas de orden superior

3 Referencias

4 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:

$$
\begin{array}{rcl}
f(x_o+h) & = & f(x_o) + hf'(x_o) + \dfrac{h^2}{2!}f''(x_o) + \dfrac{h^3}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^4) \\
+ & & \\
f(x_o-h) & = & f(x_o) - hf'(x_o) + \dfrac{h^2}{2!}f''(x_o) - \dfrac{h^3}{3!}f'''(x_o) + \mathcal{O}(h^4) \\
\hline
f(x_o+h) + f(x_o-h) & = & 2f(x_o) + h^2 f''(x_o) + \mathcal{O}(h^4)
\end{array}
$$

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

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

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

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:

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

Contenido

1. Derivadas numéricas de primer orden
   - Forward, Backward, Centered
   - Aproximaciones con más puntos
   - Ejercicio 1.
2. Derivadas numéricas de orden superior
3. Referencias
4. 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
Ejercicio 1.

2 Derivadas numéricas de orden superior

3 Referencias

4 Créditos

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