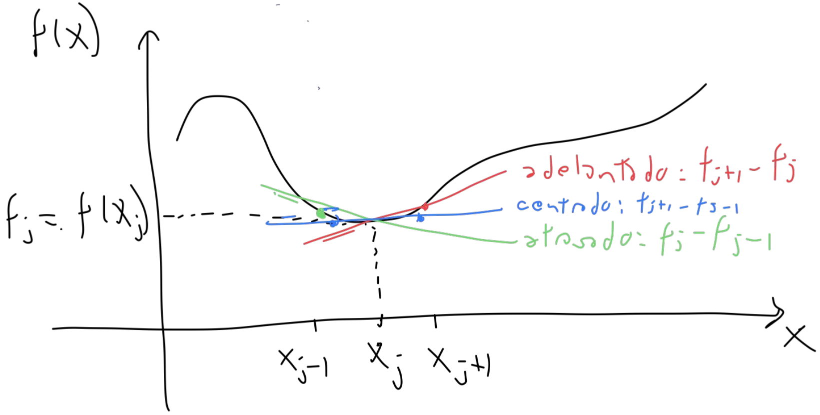
Métodos numéricos

Pablo Dmitruk

2do cuatrimestre 2021 - DF/FCEN/UBA

Diferencias finitas



si la grilla es regular $x_j = j \Delta x$

con Δx fijo

$$f_j = f(x_j)\ ,\ f_{j-1} = f(x_{j-1})\ ,\ f_{j+1} = f(x_{j+1})$$

adelantado $$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j \simeq \frac{f_{j+1} - f_j}{\triangle x}$$

atrasado $$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j \simeq \frac{f_j - f_{j-1}}{\triangle x}$$

centrado $$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j \simeq \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2 \triangle x}$$

$$j = 1, 2, 3, \ldots., N$$

Esto se puede obtener un poco más formalmente de hacer un desarrollo de Taylor,

error de truncamiento

$O(\Delta x)$

$$f_{j+1} = f(x_{j+1}) = f(x_j) + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) \triangle x + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right) \frac{\triangle x^2}{2} + \dots$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j = \frac{f(x_{j+1}) - f(x_j)}{\triangle x} - \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\frac{\triangle x}{2} - \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\frac{\triangle x^2}{3!} - \dots$$

adelantado

$$f_{j-1} = f(x_{j-1}) = f(x_j) - \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) \triangle x + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right) \frac{\triangle x^2}{2} + \dots$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j = \frac{f(x_j) - f(x_{j-1})}{\triangle x} - \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\frac{\triangle x}{2} + \dots$$

atrasado

restando: $$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j = \frac{f(x_{j+1}) - f(x_{j-1})}{2 \triangle x} + \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\frac{\triangle x^2}{3!} + \dots$$

centrado

$O(\Delta x^2)$

Del des. Taylor también se puede obtener la <u>derivada segunda,</u>

sumando: $$f_{j+1} + f_{j-1} = 2f_j + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \triangle x^2 + 2\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}\frac{\triangle x^4}{4!} + \ldots$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_j = \frac{f_{j+1} + f_{j-1} - 2f_j}{\triangle x^2} + 2\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}\frac{\triangle x^2}{4!} + \ldots$$

$$O(\Delta x^2)$$

Aproximación de orden más alto o derivadas de orden superior → necesito más puntos de grilla → *stencil*

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j + F(O(\triangle x^4)) = Af_{j+2} + Bf_{j+1} + Cf_j + Df_{j-1} + Ef_{j-2}$$

Desarrollando $f_{j\pm2}$, $f_{j\pm1}$ en serie de Taylor e igualando términos del mismo orden,

$$A + B + C + D + E = 0$$

$$2\Delta x\ A + \Delta x\ B - \Delta x\ D - 2\Delta x\ E = 1$$

$$2\Delta x^2\ A + \frac{\Delta x^2}{2}\ B + \frac{\Delta x^2}{2} + 2\Delta x^2\ E = 0$$

5 ecs con 5 inc

$$\frac{8}{6}\Delta x^3\ A + \frac{\Delta x^3}{6}\ B - \frac{\Delta x^3}{6}\ D - \frac{8}{6}\Delta x^3\ E = 0$$

$$\frac{16}{24}\Delta x^4\ A + \frac{\Delta x^4}{24}\ B - \frac{\Delta x^4}{24}\ D + \frac{16}{24}\Delta x^4\ E = 0$$

sale: $A = -\frac{1}{12\Delta x}$, $B = \frac{8}{12\Delta x}$, $C = 0$, $D = -\frac{8}{12\Delta x}$, $E = \frac{1}{12\Delta x}$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j = \frac{-f_{j+2} + 8f_{j+1} - 8f_{j-1} + f_{j-2}}{12\Delta x} + O(\Delta x^4)$$

si quiero una derivada de orden superior hago el mismo proc.

$$\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_j + F = Af_{j+2} + Bf_{j+1} + Cf_j + Df_{j-1} + Ef_{j-2}$$

$$A + B + C + D + E = 0$$

$$2\Delta x\ A + \Delta x\ B - \Delta x\ D - 2\Delta x\ E = 0$$

$$2\Delta x^2\ A + \frac{\Delta x^2}{2}\ B + \frac{\Delta x^2}{2}\ D + 2\Delta x^2\ E = 0$$

$$\frac{8}{6}\Delta x^3\ A + \frac{\Delta x^3}{6}\ B - \frac{\Delta x^3}{6}\ D - \frac{8}{6}\Delta x^3\ E = 1$$

$$\frac{16}{24}\Delta x^4\ A + \frac{\Delta x^4}{24}\ B - \frac{\Delta x^4}{24}\ D + \frac{16}{24}\Delta x^4\ E = 0$$

sale:

$A = \frac{1}{2\Delta x^3}$, $B = -\frac{1}{\Delta x^3}$, $C = 0$, $D = \frac{1}{\Delta x^3}$, $E = -\frac{1}{2\Delta x^3}$

$$\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_j = \frac{f_{j+2} - 2f_{j+1} + 2f_{j-1} - f_{j-2}}{2\Delta x^3} + O(\Delta x^2)$$

En general, $$\left(\frac{\partial^m f}{\partial x^m}\right)_j = \sum_{i=j-q}^{j+p} \gamma_i f_i \quad , \quad p+q \geq m$$

Para encontrar los valores de γ_i se resuelve el sistema,

$$\sum_{i=j-q}^{j+p} \frac{\gamma_i}{n!}(x_i - x_j)^n = c_n \qquad n = 0, 1, \ldots, p+q \qquad c_n = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$$

se obtiene una expresión de $O(\Delta x^{p+q-m+1})$ o $O(\Delta x^{p+q-m+2})$

si es centrado, m par y grilla regular

<u>ejemplo</u>: $m=1\,,\; p=0\,,\; q=1 \qquad \left(\dfrac{\partial f}{\partial x}\right)_j = \gamma_{j-1} f_{j-1} + \gamma_j f_j$

$$n=0 \quad , \quad \gamma_{j-1} + \gamma_j = 0$$

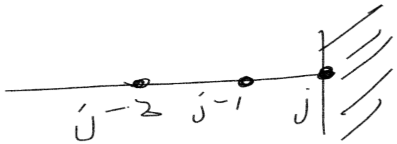
$$n=1 \quad , \quad -\Delta x\, \gamma_{j-1} = 1$$

$$\gamma_{j-1} = -\frac{1}{\Delta x} \quad , \quad \gamma_j = \frac{1}{\Delta x}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j = \frac{f_j - f_{j-1}}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

<u>otro ejemplo</u>: usando dos puntos *a izq*, por ejemplo si estoy en un *borde*,

$$m=1\,,\; p=0\,,\; q=2 \qquad \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j = \gamma_{j-2} f_{j-2} + \gamma_{j-1} f_{j-1} + \gamma_j f_j$$



$$n=0 \quad , \quad \gamma_{j-2} + \gamma_{j-1} + \gamma_j = 0$$

$$n=1 \quad , \quad -2\Delta x\, \gamma_{j-2} - \Delta x\, \gamma_{j-1} = 1$$

$$n=2 \quad , \quad \frac{(-2\Delta x)^2}{2}\gamma_{j-2} + \frac{(-\Delta x)^2}{2}\gamma_{j-1} = 0$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j = \frac{f_{j-2} - 4f_{j-1} + 3f_j}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

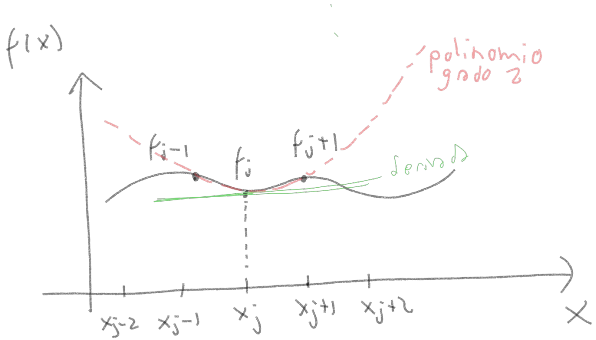
derivada no centrada

Otra forma de obtener estas aproximaciones a derivadas: con *polinomios de Lagrange*

la idea es buscar un polinomio que pase por los mismos puntos discretos que la función f(x) y aproximar la derivada de la función en esos puntos por la derivada del polinomio

Por ejemplo, busco un polinomio de grado 2 que pase por los puntos: $(x_{j-1}, f_{j-1}), (x_j, f_j), (x_{j+1}, f_{j+1})$

$$\begin{aligned} P_2(x) \quad &= f_{j+1}\frac{(x-x_{j-1})(x-x_j)}{(x_{j+1}-x_{j-1})(x_{j+1}-x_j)} \\ &+ f_j\frac{(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})}{(x_j-x_{j+1})(x_j-x_{j-1})} \\ &+ f_{j-1}\frac{(x-x_j)(x-x_{j+1})}{(x_{j-1}-x_j)(x_{j-1}-x_{j+1})} \end{aligned}$$



$$P_2(x_j) = f(x_j),\ P_2(x_{j+1}) = f(x_{j+1}),\ P_2(x_{j-1}) = f(x_{j-1})$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j \simeq \left(\frac{\partial P_2}{\partial x}\right)_j = \frac{f_{j+1}\Delta x}{2\Delta x^2} + \frac{f_j(-\Delta x)}{\Delta x(-\Delta x)} + \frac{f_j \Delta x}{\Delta x(-\Delta x)} + \frac{f_{j-1}(-\Delta x)}{(-\Delta x)(-2\Delta x)}$$

(supusimos grilla regular, pero no es obligatorio hacerlo)

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\Delta x}$$

Si quiero la derivada segunda, usando los puntos j-2, j-1, j construyo

$$P_2(x) = f_{j-2}\frac{(x-x_{j-1})(x-x_j)}{(x_{j-2}-x_{j-1})(x_{j-2}-x_j)} + f_j\frac{(x-x_{j-1})(x-x_{j-2})}{(x_j-x_{j-2})(x_j-x_{j-1})} + f_{j-1}\frac{(x-x_j)(x-x_{j-2})}{(x_{j-1}-x_j)(x_{j-1}-x_{j-2})}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_j \simeq \left(\frac{\partial^2 P_2}{\partial x^2}\right)_j = \frac{f_{j-2} - 2f_{j-1} + f_j}{\Delta x^2}$$

Digresión: error de redondeo y error de truncamiento

al evaluar $f(x_j)$ hay un error de redondeo (precisión de la máquina ~ 10^{-6})

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j = \frac{(f(x_{j+1}) + \epsilon_{j+1}) - (f(x_{j-1}) + \epsilon_{j-1})}{2 \triangle x} + \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\frac{\triangle x^2}{3!} + \ldots$$

$$error = \frac{\epsilon_{j+1} - \epsilon_{j-1}}{2 \triangle x} + \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\frac{\triangle x^2}{3!} + \ldots$$

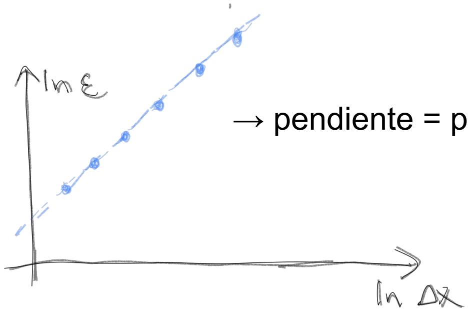
$$Si\ \Delta x \ll 1 \Rightarrow \frac{\epsilon_{j+1} - \epsilon_{j-1}}{2 \triangle x} > \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\frac{\triangle x^2}{3!}$$

y el error de redondeo puede superar al de truncamiento

El error de truncamiento es de la forma $\varepsilon = C\,(\Delta x)^p$

lo que nos indica cómo se va a comportar cuando achiquemos Δx

tomando logaritmo, $\ln \varepsilon = p\, \ln \Delta x + cte$



→ pendiente = p

es decir, si graficamos el error vs el espaciado de grilla en escala log-log nos daría una recta cuya pendiente nos indica el *orden de precisión* de la diferenciación numérica

Para obtener el error necesitamos la solución exacta, que se supone no la tenemos !

→ se usa alguna función de prueba para ver la “bondad” de la aproximación numérica

Otro aspecto de la aproximación → Análisis de Fourier

(o cuando las diferencias finitas empiezan a *teclear*)

Supongamos f(x) es un *modo Fourier* con número de onda k entero

$$f(x) = Ae^{ikx\frac{2\pi}{L}} \qquad \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial x} = iAk\frac{2\pi}{L}e^{ikx\frac{2\pi}{L}} = f(x).\,i.\,\frac{2\pi}{L}k$$ exacto

Supongamos calculamos la derivada con diferencias finitas $O(\Delta x^2)$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j \simeq \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\Delta x}$$

y usamos $f_j = f(x_j) = Ae^{ikx_j\frac{2\pi}{L}}$ $\qquad x_{j\pm1} = x_j \pm \Delta x$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j \simeq \frac{Ae^{ikx_{j+1}\frac{2\pi}{L}} - Ae^{ikx_{j-1}\frac{2\pi}{L}}}{2\triangle x} = Ae^{ikx_j\frac{2\pi}{L}}\frac{e^{ik\Delta x\frac{2\pi}{L}} - e^{-ik\Delta x\frac{2\pi}{L}}}{2\triangle x} = f(x_j).\,i.\sin\left(k\triangle x\frac{2\pi}{L}\right)\frac{1}{\Delta x}$$

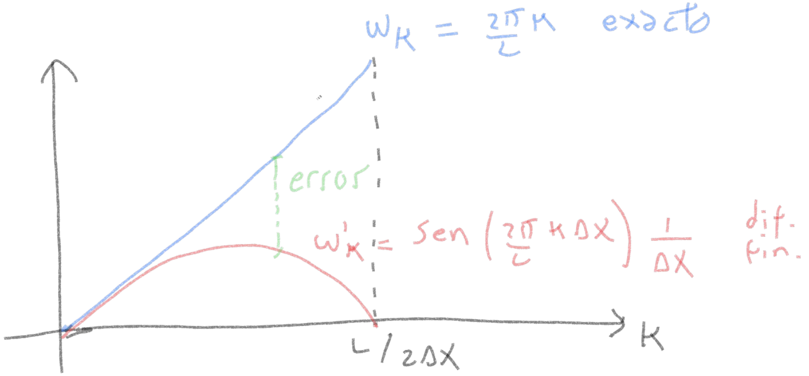
El resultado exacto entonces es, $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j = i w_k f(x_j) \quad , \; w_k = \frac{2\pi}{L} k$

y el aproximado por diferencias finitas es,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j = i\tilde{w}_k(x_j) \quad , \; \tilde{w}_k = \sin\left(\frac{2\pi}{L}k\Delta x\right)\frac{1}{\Delta x} = \frac{1}{\Delta x}\left[\frac{2\pi}{L}k\Delta x - \left(\frac{2\pi}{L}k\Delta x\right)^3\frac{1}{3!} + \ldots\right] = \frac{2\pi}{L}k\left[1 - \left(\frac{2\pi}{L}k\Delta x\right)^2\frac{1}{6} + \ldots\right]$$

Vemos que entre la derivada exacta y la aproximada hay un factor

$$\left[1 - \left(\tfrac{2\pi}{L}k\Delta x\right)^2 \tfrac{1}{6} + \ldots\right]$$



dif. finitas dan dispersión

Este error puede ser grande para k grandes, o sea, longitudes de onda cortas, o sea, funciones que varían mucho en distancias cortas...

ver "*Compact finite differences with spectral-like resolution*", S. Lele, JCP 1992