Curso MNNS. - Hoja de notas N°1. Lunes 15/Agosto/2005

Fórmulas de aproximación de derivadas por diferencias finitas.

Consideramos el desarrollo de Taylor de $\phi(x)$ en torno a x_i :

$$\phi(x)=\phi(x_i)+\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i\cdot(x-x_i)+\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i\cdot\frac{(x-x_i)^2}{2!}+\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_i\cdot\frac{(x-x_i)^3}{3!}+\left(\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\right)_i\cdot\frac{(x-x_i)^4}{4!}+$$
$$+\left(\frac{\partial^5\phi}{\partial x^5}\right)_i\cdot\frac{(x-x_i)^5}{5!}+\left(\frac{\partial^6\phi}{\partial x^6}\right)_i\cdot\frac{(x-x_i)^6}{6!}+\ldots+\left(\frac{\partial^n\phi}{\partial x^n}\right)_i\cdot\frac{(x-x_i)^n}{n!}+o\left((x-x_i)^{n+1}\right) \qquad (1)$$

Realizando combinaciones lineales de evaluaciones de este desarrollo en distintos puntos aledaños a x_i (..., x_{i-2}, x_{i-1}, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}, ...) podemos obtener fórmulas de aproximación con error de truncamiento del orden deseado.

En estas notas se considera únicamente el caso equi-espaciado : $x \in [x_0, x_L]$ discretizado en n+1 puntos (x_i) i=1,2,..n+1 :

$$h=\frac{(x_L-x_0)}{n}, \qquad x_i=x_0+(i-1)\cdot h, \qquad (x_{i+k}-x_i)^n=k^n\cdot h^n \qquad (2)$$

Evaluando (1) en x_{i+k} y utilizando (2) queda :

$$\phi(x_{i+k})=\phi(x_i)+\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i\cdot h\cdot k+\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i\cdot h^2\cdot\frac{k^2}{2!}+\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_i\cdot h^3\cdot\frac{k^3}{3!}+\left(\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\right)_i\cdot h^4\cdot\frac{k^4}{4!}+$$
$$+\left(\frac{\partial^5\phi}{\partial x^5}\right)_i\cdot h^5\cdot\frac{k^5}{5!}+\left(\frac{\partial^6\phi}{\partial x^6}\right)_i\cdot h^6\cdot\frac{k^6}{6!}+\ldots+\left(\frac{\partial^n\phi}{\partial x^n}\right)_i\cdot h^n\cdot\frac{k^n}{n!}+o\left(h^{n+1}\right)$$

1) Aproximación de la derivada primera.

1.1) Fórmula de primer orden

Basta considerar una única evaluación de (1) en x_{i-1} o bien x_{i+1} (k=-1 ó k=+1) :

$$\phi(x_{i-1})=\phi(x_i)+\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i\cdot(x_{i-1}-x_i)+\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i\cdot\frac{(x_{i-1}-x_i)^2}{2!}+o\left(h^3\right)$$
$$\phi_{i-1}=\phi_i+\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i\cdot(-h)+\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i\cdot\frac{h^2}{2}+o\left(h^3\right)$$

$$\boxed{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i\approx\frac{\phi_i-\phi_{i-1}}{h}+o(h)} \quad \text{(BDS)}$$

o bien

$$\boxed{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i\approx\frac{\phi_{i+1}-\phi_i}{h}+o(h)} \quad \text{(FDS)}$$

Las designaciones (BDS) y (FDS) provienen del inglés y significan ‘Forward difference scheme’ y ‘Backward difference scheme’ respectivamente.

1.2) Fórmula 'centrada' de segundo orden

Evaluando en x_{i-1} y x_{i+1} (k=-1 y k=+1) y combinando : $\phi(x_{i+1}) - \phi(x_{i-1})$ se anulan las potencias pares de ambos desarrollos y se obtiene:

$$\phi(x_{i+1}) - \phi(x_{i-1}) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i \cdot 2h + \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_i \cdot 2\,\frac{h^3}{3!} + o\left(h^5\right)$$

$$\boxed{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h} + o\left(h^2\right)} \quad \text{(CDS)}$$

La designación (CDS) significa 'Central difference scheme'.

1.3) Fórmula 'centrada' de cuarto orden

Evaluando en cuatro puntos en torno a x_i : x_{i-2}, x_{i-1}, x_{i+1}, x_{i+2} puede anularse también el término de potencia 3 (además de las potencias pares) combinando de la siguiente forma :

$$\phi(x_{i+1}) - \phi(x_{i-1}) - \frac{1}{8}\left(\phi(x_{i+2}) - \phi(x_{i-2})\right) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i \cdot \frac{12}{8}\,h + \left(\frac{\partial^5 \phi}{\partial x^5}\right)_i \cdot \left(-\frac{48}{8}\right)\frac{h^5}{5!} + o\left(h^7\right)$$

$$\boxed{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i \approx \frac{-\phi_{i+2} + 8 \cdot \phi_{i+1} - 8 \cdot \phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{12 \cdot h} + o\left(h^4\right)}$$

1.4) Fórmula 'no centrada' de segundo orden

En la implementación de condiciones de borde suele ser necesario disponer de fórmulas de aproximación de derivadas que involucren un menor número de puntos hacia el lado de la frontera.

Combinando evaluaciones en : x_{i+1} y x_{i+2} puede obtenerse una fórmula de segundo orden para la derivada primera en x_i que sólo requiere puntos a la derecha de x_i:

$$\boxed{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i \approx \frac{-\phi_{i+2} + 4 \cdot \phi_{i+1} - 3 \cdot \phi_i}{2 \cdot h} + o\left(h^2\right)}$$

En particular, para i=1 :

$$\boxed{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_1 \approx \frac{-\phi_3 + 4 \cdot \phi_2 - 3 \cdot \phi_1}{2 \cdot h} + o\left(h^2\right)}$$

Observación : En el extremo opuesto (i=n) las fórmulas 'no centradas' para la derivada primera son análogas cambiando los signos de los coeficientes (es equivalente a cambiar el signo de h en la fórmula):

$$\boxed{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_n \approx \frac{+\phi_{n-2} - 4 \cdot \phi_{n-1} + 3 \cdot \phi_n}{2 \cdot h} + o\left(h^2\right)}$$

1.5) Fórmula 'no centrada' de cuarto orden

Combinando evaluaciones en : x_{i-1}, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3} puede obtenerse una fórmula de cuarto orden para la derivada primera en x_i que sólo requiere un punto a la izquierda (x_{i-1}) :

$$\boxed{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i \approx \frac{+\phi_{i+3} - 6\cdot\phi_{i+2} + 18\cdot\phi_{i+1} - 10\cdot\phi_i - 3\cdot\phi_{i-1}}{12\cdot h} + o(h^4)}$$

Observación : La fórmula (3.36) del 'Ferziger' está equivocada. Considerando el primer punto interior (i=2) la fórmula anterior queda :

$$\boxed{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_2 \approx \frac{+\phi_5 - 6\cdot\phi_4 + 18\cdot\phi_3 - 10\cdot\phi_2 - 3\cdot\phi_1}{12\cdot h} + o(h^4)}$$

2) Aproximación de la derivada segunda.

2.1) Fórmula 'centrada' de segundo orden

Evaluando en x_{i-1} y x_{i+1} (k=-1 y k=+1) y combinando : $\phi(x_{i+1}) + \phi(x_{i-1})$ se anulan las potencias impares de ambos desarrollos y se obtiene:

$$\phi(x_{i+1}) + \phi(x_{i-1}) = \phi(x_i)\cdot 2 + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i \cdot 2\,\frac{h^2}{2} + \left(\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\right)_i \cdot 2\,\frac{h^4}{4!} + o(h^6)$$

$$\boxed{\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - 2\cdot\phi_i + \phi_{i-1}}{h^2} + o(h^2)}$$

2.2) Fórmula 'centrada' de cuarto orden

Evaluando en cuatro puntos en torno a x_i : x_{i-2}, x_{i-1}, x_{i+1}, x_{i+2} puede anularse también el término de potencia 4 (además de las potencias impares) combinando de la siguiente forma :

$$\phi(x_{i+1}) + \phi(x_{i-1}) - \frac{1}{16}\left(\phi(x_{i+2}) + \phi(x_{i-2})\right) = \phi(x_i)\cdot\frac{30}{16} + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i \cdot \frac{12}{16}\,\frac{h^2}{2} + \left(\frac{\partial^6\phi}{\partial x^6}\right)_i \cdot (-2)\,\frac{h^6}{6!} + o(h^8)$$

$$\boxed{\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i \approx \frac{-\phi_{i+2} + 16\cdot\phi_{i+1} - 30\cdot\phi_i + 16\cdot\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{12\cdot h^2} + o(h^4)}$$

2.3) Fórmula 'no centrada' de tercer orden

En la implementación de condiciones de borde puede ser útil la siguiente fórmula obtenida combinando evaluaciones en x_{i-1}, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3} :

$$\boxed{\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i \approx \frac{-\phi_{i+3} + 4\cdot\phi_{i+2} + 6\cdot\phi_{i+1} - 20\cdot\phi_i + 11\cdot\phi_{i-1}}{12\cdot h^2} + o(h^3)}$$

Obs : La fórmula (3.37) del 'Ferziger' está equivocada. Considerando el primer punto interior (i=2) la fórmula anterior queda :

$$\boxed{\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_2 \approx \frac{-\phi_5 + 4\cdot\phi_4 + 6\cdot\phi_3 - 20\cdot\phi_2 + 11\cdot\phi_1}{12\cdot h^2} + o(h^3)}$$

<u>Ejemplo:</u> En relación al ejercicio 1 del repartido N°2, puede obtenerse un esquema de cuarto orden para el problema de advección-difusión lineal de la siguiente forma.

Para los puntos interiores no afectados por la frontera (i=3,...n-2) utilizamos las fórmulas 1.3) y 2.2) para escribir :

$$\frac{Pe}{L}\left(\frac{-\phi_{i+2}+8\cdot\phi_{i+1}-8\cdot\phi_{i-1}+\phi_{i-2}}{12\cdot h}\right)-\left(\frac{-\phi_{i+2}+16\cdot\phi_{i+1}-30\cdot\phi_{i}+16\cdot\phi_{i-1}-\phi_{i-2}}{12\cdot h^{2}}\right)=0$$

Para el primer punto interior de cada lado (i=2 e i=n-1) es necesario utilizar fórmulas no centradas como las 1.5) y 2.3). En i=2 se tiene :

$$\frac{Pe}{L}\left(\frac{+\phi_{5}-6\cdot\phi_{4}+18\cdot\phi_{3}-10\cdot\phi_{2}-3\cdot\phi_{1}}{12\cdot h}\right)-\left(\frac{-\phi_{5}+4\cdot\phi_{4}+6\cdot\phi_{3}-20\cdot\phi_{2}+11\cdot\phi_{1}}{12\cdot h^{2}}\right)=0$$

Para i=n-1 se obtiene una esquema análogo (cambiando los signos de los coeficientes en la fórmula de la derivada primera.

Para los puntos de frontera en los extremos i=1 e i=n se impone directamente las condiciones de borde de Dirichlet. El script ‘ej02a.m’ que acompaña estas notas presenta una posible implementación de este esquema.

<u>Anexo :</u> <u>Obtención sistemática de fórmulas de aproximación.</u>

Los coeficientes involucrados en las fórmulas anteriores pueden obtenerse en forma sistemática planteando sistemas lineales de ecuaciones a partir de combinaciones genéricas y con el objetivo de anular los términos no deseados del desarrollo.

Por ejemplo para la obtención de la fórmula ‘no centrada’ de cuarto orden para la derivada primera (1.4) podemos escribir una combinación lineal de las evaluaciones en x_{i-1}, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3} del desarrollo de Taylor para $\phi(x)$ en x_i :

$$a\cdot\phi(x_{i-1})+b\cdot\phi(x_{i+1})+c\cdot\phi(x_{i+2})+d\cdot\phi(x_{i+3})=\phi(x_i)\cdot(a+b+c+d)+$$

$$+\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i}\cdot(-a+b+2c+3d)\cdot h\ +\left(\frac{\partial^{2}\phi}{\partial x^{2}}\right)_{i}\cdot(a+b+4c+9d)\cdot\frac{h^{2}}{2!}+$$

$$+\left(\frac{\partial^{3}\phi}{\partial x^{3}}\right)_{i}\cdot(-a+b+8c+27d)\cdot\frac{h^{3}}{3!}+\left(\frac{\partial^{4}\phi}{\partial x^{4}}\right)_{i}\cdot(a+b+16c+81d)\cdot\frac{h^{4}}{4!}+o(h^{5})$$

Nos interesa anular los términos en h^2, h^3 y h^4 :

$$\begin{aligned}+a+b+4c+9d&=0\\-a+b+8c+27d&=0\\+a+b+16c+81d&=0\end{aligned}$$

eligiendo d=+1 tenemos c=-6, b=+18, a=-3, y resulta la fórmula de (1.5).

Con este procedimiento pueden obtenerse todas las formulas anteriores y en general fórmulas de aproximación de orden arbitrario, centradas o no-centradas, etc.