Universidad Central de Venezuela
Facultad de Ciencias - Escuela de Computación
Postgrado en Ciencias de la Computación - Tópicos Especiales en Análisis Numéricos.
Dr. Otilio Rojas.

Diferencias Finitas (DF) via Expansiones de Taylor y Coeficientes Indeterminados

1. Diferencia Finita Centrada para u' en x_i:

El gráfico 1 ilustra el objetivo de aproximar la pendiente exacta $u'(x_i)$ por la "*diferencia finita*"

$$D_0 u(x_i) = \frac{u(x_i + h) - u(x_i - h)}{2h} \tag{1}$$

La idea es usar Taylor para construir esta aproximación y a la vez encontrar el Orden del Error Local de Truncamiento (E.L.T.) asociado.

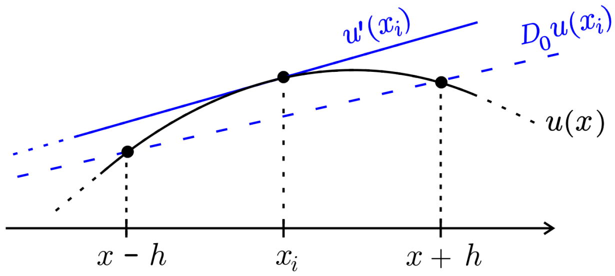

Figura 2.1. ...

Si expandimos u via Taylor alrededor de x_i, obtenemos:

$$u(x) = u(x_i) + u'(x_i)(x - x_i) + u''(x_i)\frac{(x - x_i)^2}{2} + u'''(x_i)\frac{(x - x_i)^3}{3!} + \cdots \tag{2}$$

donde x es arbitrario, pero hay condiciones de diferenciabilidad en u en el intervalo que contenga ambos puntos: x y x_i. Al evaluar la expansion (2) en $x = x_i + h$

$$u(x_i + h) = u(x_i) + hu'(x_i) + \frac{h^2}{2}u''(x_i) + \frac{h^3}{3!}u'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}u^{(iv)}(x_i) + \frac{h^5}{5!}u^{(v)} + \cdots \tag{3}$$

Al evaluar ahora en $x = x_i - h$

$$u(x_i - h) = u(x_i) - hu'(x_i) + \frac{h^2}{2}u''(x_i) - \frac{h^3}{3!}u'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}u^{(iv)}(x_i) - \frac{h^5}{5!}u^{(v)} + \cdots \tag{4}$$

al sustraer (4) de (3),

$$u(x_i + h) - u(x_i - h) = 2hu'(x_i) + \frac{2h^3}{3!}u'''(x_i) + \frac{2h^5}{5!}u^{(v)}(x_i) + \cdots \tag{5}$$

y al despejar de la ecuación (5) el valor $u'(x_i)$

$$u'(x_i) = \underbrace{\frac{u(x_i+h)-u(x_i-h)}{2h}}_{D_0(u_i)} - \underbrace{\frac{h^2}{3!}u'''(x_i) - \frac{h^4}{5!}u^{(v)}(x_i) + \cdots}_{E.L.T.} \tag{6}$$

Si aplicamos la fórmula en DF dada por D_0 usando h "pequeño" en la computadora:

(a) $D_0(u_i) \approx u'(x_i)$

(b) E.L.T. será de orden h^2, esto es, $E.L.T. \sim Ch^2$, con C = constante porque los demás infinitos términos de Taylor presentan una magnitud mucho menor a Ch^2, al asumir acotadas las derivadas de orden mayor.

El libro de texto como LeVeque [1] Pág 4, entre otros, por lo general denotan la expresión (6) como:

$$u'(x_i) = D_0(u_i) + \mathcal{O}(h^2), \tag{7}$$

donde D_0 es una aproximación de segundo orden.

Como ejemplo ilustrativo, podemos repetir la aplicación de D_0 presentado por R. LeVeque [1] en la tabla 1.1. Pág 5. En este caso, $u(x) = \operatorname{sen} x$ y $x_i = 1$. El valor exacto lo conocemos, por supuesto, porque sabemos derivar, $u'(x) = \cos x$ y su evaluación en x_i es $\cos(1) \approx 0{,}5403023$.

La pregunta es: ¿cómo haríamos para obtener un resultado más preciso, es decir, más cercano a $u'(x_i)$?

Útil para el ejemplo trivial del LeVeque o a un caso más general aún. Por ahora, les planteo 2 opciones:

Opción 1: Malla Centro-distribuida (Staggered Grid)

$$u'(x_i) = \frac{u(x_i+h/2)-u(x_i-h/2)}{2(h/2)} - \frac{(h/2)^2}{3!}u'''(x_i) + \cdots \tag{8}$$

donde se ha usado D_0, pero con paso $h/2$, entonces

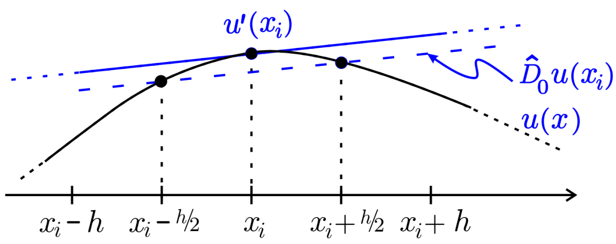

Figura 2.2.

$$u'(x_i) = \underbrace{\frac{u(x_i+h/2)-u(x_i-h/2)}{h}}_{\widehat{D}_0(u_i)} - \underbrace{\frac{h^2}{6\times 4}u'''(x_i) + \cdots}_{E.L.T.} \tag{9}$$

Notas: El E.L.T. sigue siendo $\mathcal{O}(h^2)$, pero con una magnitud de un $1/4$ respecto a $D_0(u_i)$. Computacionalmente, D_0 y $\widehat{D}_0$ *cuestan* las mismas operaciones aritméticas.

Opción 2: Incrementar el número de nodos en la DF y con esto aumenta el orden de la aproximación. Por ejemplo, pasar de $\mathcal{O}(h^2)$ a $\mathcal{O}(h^4)$.

Aquí es poco intuitiva la formulación via pendientes y se pasa directamente a Taylor. Esto es, aplica Taylor a cada uno de los nodos: x_i-2h, x_i-h, x_i+h, x_i+2h, de modo que:

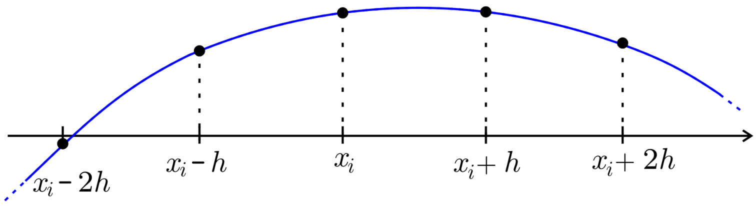

Figura 2.3.

- Para $x = x_i - 2h$

$$u(x_i - 2h) = u(x_i) - 2hu'(x_i) + \frac{4h^2}{2}u''(x_i) - \frac{8h^3}{6}u'''(x_i) + \frac{16h^4}{4!}u^{(iv)}(x_i) - \frac{32h^5}{5!}u^{(v)}(x_i) + \cdots \quad (10)$$

- Para $x = x_i - h$

$$u(x_i - h) = u(x_i) - hu'(x_i) + \frac{h^2}{2}u''(x_i) - \frac{h^3}{6}u'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}u^{(iv)}(x_i) - \frac{h^5}{5!}u^{(v)}(x_i) + \cdots \quad (11)$$

- Para $x = x_i + h$

$$u(x_i + h) = u(x_i) + hu'(x_i) + \frac{h^2}{2}u''(x_i) + \frac{h^3}{6}u'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}u^{(iv)}(x_i) + \frac{h^5}{5!}u^{(v)}(x_i) + \cdots \quad (12)$$

- Para $x = x_i + 2h$

$$u(x_i + 2h) = u(x_i) + 2hu'(x_i) + \frac{4h^2}{2}u''(x_i) + \frac{8h^3}{6}u'''(x_i) + \frac{16h^4}{4!}u^{(iv)}(x_i) + \frac{32h^5}{5!}u^{(v)}(x_i) + \cdots \quad (13)$$

Para combinar linealmente las expansiones anteriores, (10), (11), (12), y (13), se usa el **Método de Coeficientes Indeterminados**. En este caso de 4 ecuaciones se encuentra a, b, c, d de tal manera de *Eliminar tantos términos* del E.L.T. como sea posible en la nueva fórmula en DF:

$$a\big[\text{Ec. (10)}\big] + b\big[\text{Ec. (11)}\big] + c\big[\text{Ec. (12)}\big] + d\big[\text{Ec. (13)}\big] \quad (14)$$

Condiciones a imponer sobre la ecuación (14)

$$\begin{aligned} au(x_i - 2h) + bu(x_i - h) + cu(x_i + h) + du(x_i + 2h) \quad = \quad & (a + b + c + d)u(x_i) \\ & +(-2a - b + c + 2d)hu'(x_i) \\ & +(4a + b + c + 4d)\frac{h^2}{2}u''(x_i) \\ & +(-8a - b + c + 8d)\frac{h^3}{6}u'''(x_i) \\ & +(16a + b + c + 16d)\frac{h^4}{4!}u^{iv}(x_i) + \cdots \end{aligned} \quad (15)$$

se requiere que

$$
\begin{array}{r}
\text{(I)} \\
\text{(II)} \\
\text{(III)} \\
\text{(IV)}
\end{array}
\begin{cases}
-2a - b + c + 2d = 1 \\
\;\;4a + b + c + 4d = 0 \\
-8a - b + c + 8d = 0 \\
16a + b + c + 16d = 0
\end{cases}
\tag{16}
$$

Donde el sistema (16): la ecuación (I) preserva u' en la fórmula DF y las ecuaciones (II), (III) y (IV) forzan los 1^{eros} términos del E.L.T. a cero.

El sistema de Ecuaciones (16) se resuelve en MatLab/Maple/ o usando cálculo tradicional y así se encuentran los **coeficientes del estencil de DF**. En este caso:

$$
a = -d = \frac{1}{12}, \qquad \text{y} \qquad b = -c = -\frac{8}{12}.
$$

Al sustituir estos coeficientes en (15), se obtiene explícitamente la nueva DF

$$
\underbrace{\frac{u(x_i - 2h) - 8u(x_i - h) + 8u(x_i + h) - u(x_i + 2h)}{12h}}_{D_{0,4}(u_i)} = u'(x_i) + \underbrace{\mathcal{O}(h^5)}_{E.L.T.}
\tag{17}
$$

$D_{0,4}(x_i)$ es la fórmula en DF Centrada (subindex 0) con Cuarto Orden (subindex 4) en una malla Nodal. La misma aparece en Fornberg [2], Pág. 702, tabla 1.

2. Nuevas Fórmulas en DF muy útiles y que podrían construirse por Coeficientes Indeterminados

[1] $\widehat{D}_{0,4}(u_i)$: Esta fórmula seria la versión Staggered de la construcción arriba.

Nota. Esta formula DF es muy usada en nuestras aplicaciones y aparece en Fornberg [2].

[2] Fórmula en DF en Malla Centro-distribuida para aproximar $u'(x_0)$ con segundo orden de precisión.

$$
u'(x_0) = \underbrace{\frac{-8/3u_0 + 3u_{1/2} - 1/3u_{3/2}}{h}}_{D_+(u_0)} + \mathcal{O}(h^2) \tag{18}
$$

Nota: El símbolo "+" es usado para denotar "Forward" Differentiation por el LeVeque [1].

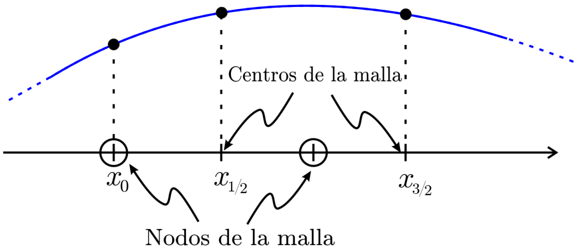

Figura 2.4.

[3] Formula en DF en Malla Staggered para aproximar $u'(x_0)$, pero con 4to orden de precisión. Esto es, $\widehat{D}_{+,4}(u_0)$.

Referencias

[1] LeVeque, Randall J. (2007). Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, USA.

[2] Fornberg, B. (1988). Generation of finite difference formulas on arbitrarily spaced grids. *Mathematics of computation*, 51(184),pp. 699-706.