Tema 5. Diferenciación numérica

5.1 Derivación numérica. Error de aproximación y paso
5.2 Diferencia divididas progresivas y regresivas
5.3 Diferencias divididas progresivas y regresivas. Exactitud.
5.4 Formula de diferencia dividida centrada.
5.5 Extrapolación de Richardson.
5.6 Derivadas de mayor orden.
5.7 Derivación por polinomio de Newton.

Derivación numérica. Error de aproximación y paso.

La **derivada** de una función $f(x)$ en punto x es

$$f'(x)=\lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$ donde paso $h=x+h-x$

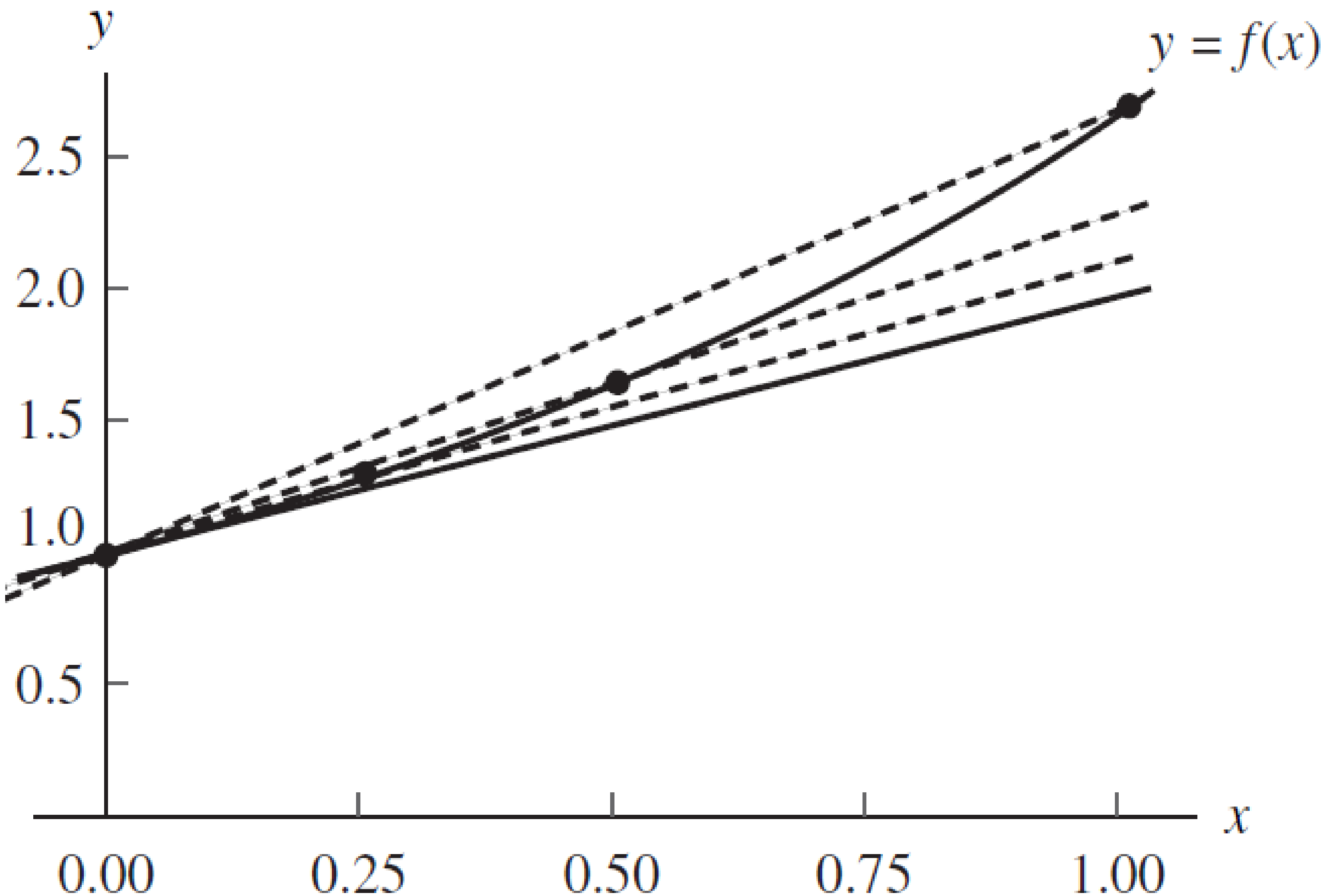
Aproximación numérica de la derivada es $f'(x)\approx\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$

Para calcular la aproximación numérica de la derivada en un punto, **debemos tomar una sucesión** $\{h_k\}$, tal que $h_k\to 0$ y calcular el cociente

$$D_k=\frac{f(x+h_k)-f(x)}{h_k}, \qquad k=1,\dots,n$$

De sucesión $\{D_1,D_2,\dots,D_n\}$ solo una D_k es la aproximación deseada, **el problema esta en conocer valor de** h_k **cual garantiza una buena aproximación**, ya que si se toma un valor de h_k muy grande la aproximación no es aceptable, y si se toma un valor muy pequeño la diferencia $f(x+h_k)-f(x)\approx 0$ ya que hay perdida de dígitos significativos.

Derivación numérica. Error de aproximación y paso.



Lineas secantes para $f(x) = e^x$

Derivación Numérica. Error de aproximación y paso.

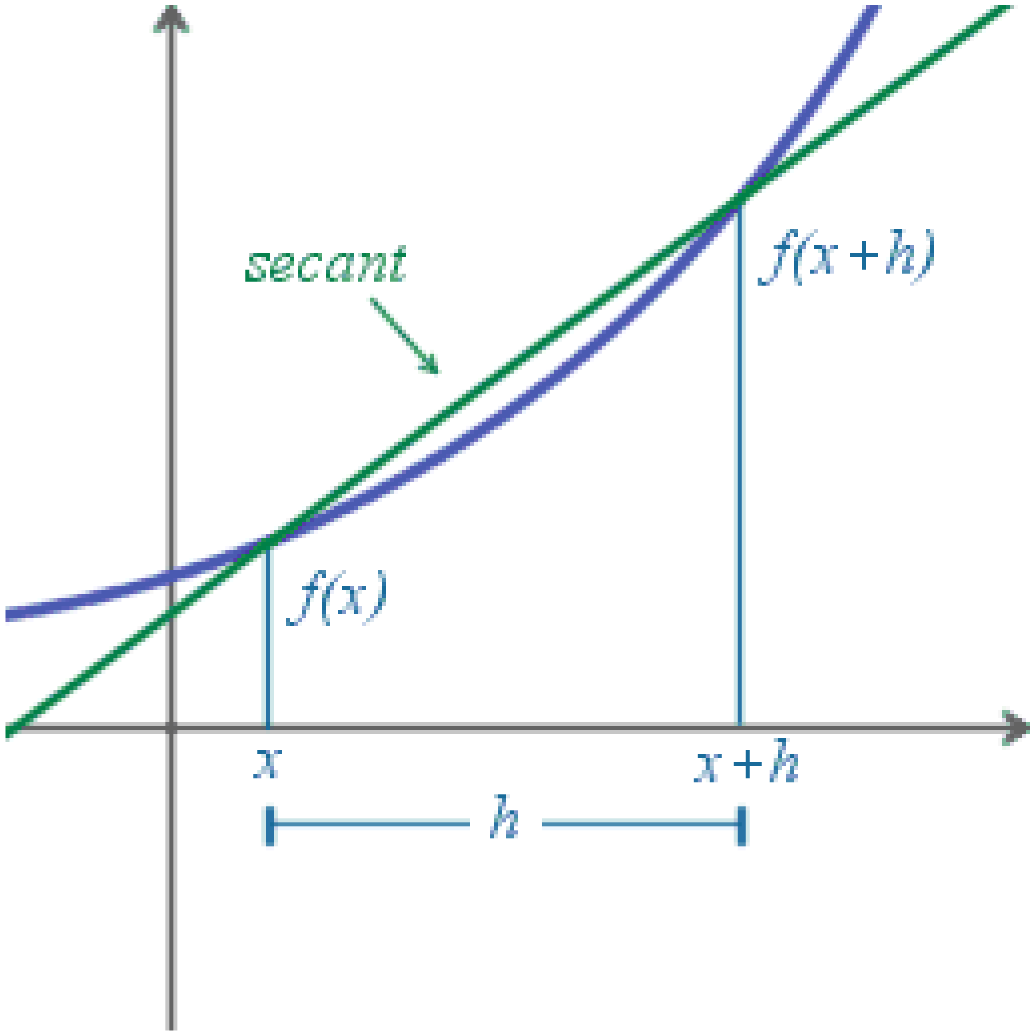
$D_k = \frac{e^{1+h_k} - e^1}{h_k}$ es aproximación de la derivada de $f(x) = e^x$ a $x = 1$ con nueve cifras significativas.

h_k	$f_k = f(1+h_k)$	$f_k - e$	$D_k = (f_k - e)/h_k$
$h_1 = 0.1$	3.004166024	0.285884196	2.858841960
$h_2 = 0.01$	2.745601015	0.027319187	2.731918700
$h_3 = 0.001$	2.721001470	0.002719642	2.719642000
$h_4 = 0.0001$	2.718553670	0.000271842	2.718420000
$h_5 = 0.00001$	2.718309011	0.000027183	2.718300000
$h_6 = 10^{-6}$	2.718284547	0.000002719	2.719000000
$h_7 = 10^{-7}$	2.718282100	0.000000272	2.720000000
$h_8 = 10^{-8}$	2.718281856	0.000000028	2.800000000
$h_9 = 10^{-9}$	2.718281831	0.000000003	3.000000000
$h_{10} = 10^{-10}$	2.718281828	0.000000000	0.000000000

Solución exacta es $f'(1) \approx 2.718281828$. Entonces $h_5 = 10^{-5}$ nos da mejor aproximación $D_5 = 2.7183$.

Es posible usar siguiente criterio: calcular $\{D_k\}$ con $h_k \to 0$ hasta $|D_{N+1} - D_N| \geq |D_N - D_{N-1}|$. Ejemplo: OptStep.sce

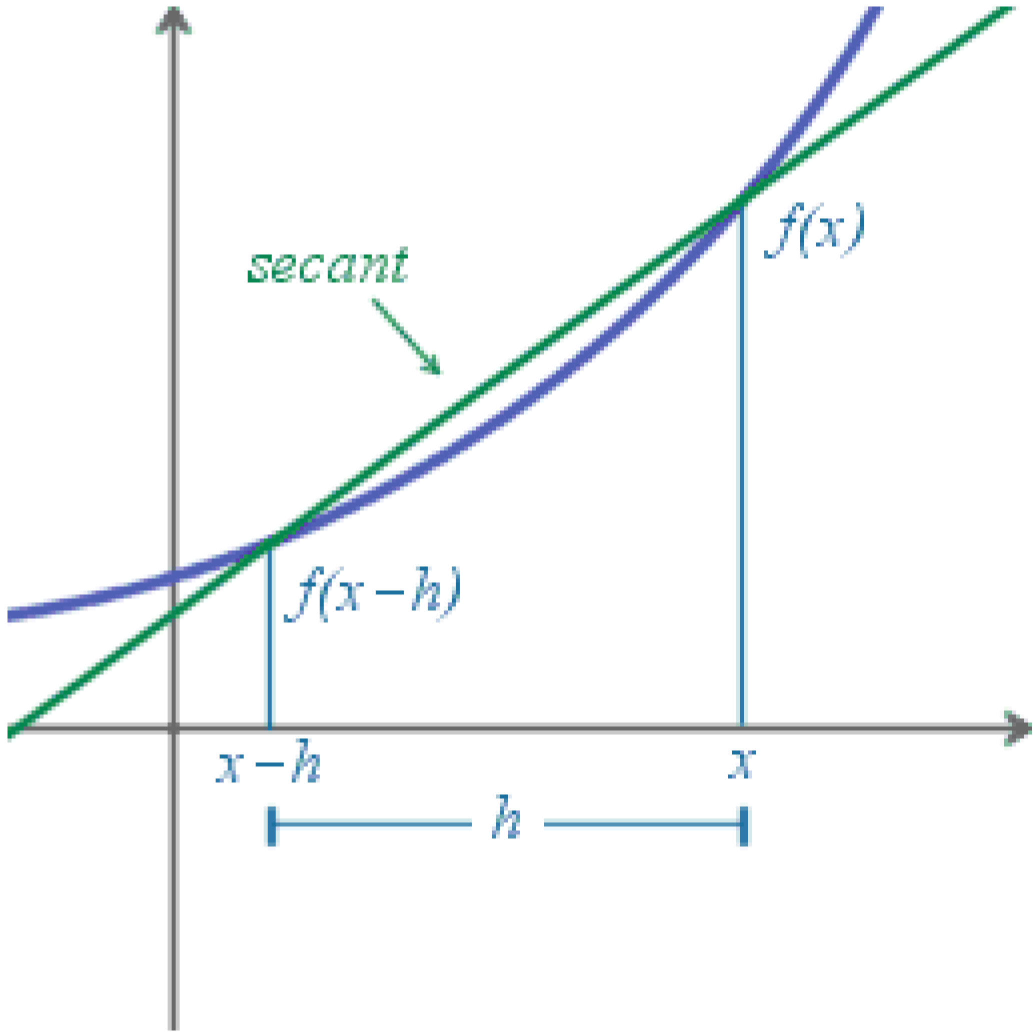
Derivada progresiva



Aproximación numérica de la derivada por **diferencia dividida progresiva.**

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Derivada regresiva



Aproximación numérica de la derivada por **diferencia dividida regresiva.**

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}$$

Primera derivada progresiva. Error de aproximación.

Serie de Taylor de $f(x)$ en punto $x+h$ es

$$f(x+h)=f(x)+f'(x)(x+h-x)+\frac{f''(x)}{2!}(x+h-x)^2+\frac{f^{(3)}(x)}{3!}(x+h-x)^3+\ldots$$

Solo tomamos términos hasta el segundo orden inclusive.

$$f(x+h)\approx f(x)+f'(x)h+\frac{f''(x)}{2!}h^2$$

Despejamos primera derivada, obtenemos

$$f'(x)\approx\frac{f(x+h)-f(x)}{h}-\frac{f''(x)}{2}h$$ donde

$$\boxed{f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x)}{h}}$$ es aproximación numérica de primera derivada progresiva y **el error** de la aproximación **es orden de *h*.**

$$err=\frac{f''(x)}{2}h=O(h)$$

Esto significa **que si nuevo** $h=h/2$ **entonces y nuevo** $err=err/2$ **.**

Primera derivada regresiva. Error de aproximación.

Serie de Taylor de $f(x)$ en punto $x-h$ es

$$f(x-h)=f(x)+f'(x)(x-h-x)+\frac{f''(x)}{2!}(x-h-x)^2+\frac{f^{(3)}(x)}{3!}(x-h-x)^3+\ldots$$

Solo tomamos términos hasta el segundo orden inclusive.

$$f(x-h)\approx f(x)-f'(x)h+\frac{f''(x)}{2!}h^2$$

Despejamos primera derivada, obtenemos

$$f'(x)\approx\frac{f(x)-f(x-h)}{h}+\frac{f''(x)}{2}h$$ donde

$$\boxed{f'(x)=\frac{f(x)-f(x-h)}{h}}$$ es aproximación numérica de primera derivada regresiva y **el error** de la aproximación es orden de *h*

$$err=\frac{f''(x)}{2}h=O(h)$$

Esto significa **que si nuevo** $h=h/2$ **entonces y nuevo** $err=err/2$ **.**

Primera derivada centrada. Error de aproximación.

Si la función $f(x)$ puede ser calculada en ambos lados de x, entonces la mejor fórmula de dos puntos va usar las **abscisas** que se eligen **simétricamente** con respecto a x.

Escribimos la serie de Taylor para los puntos $x+h$ y $x-h$. Nos restringimos solo a los primeros miembros al grado 3 inclusive.

$$f(x+h)\approx f(x)+f'(x)(x+h-x)+\frac{f''(x)}{2!}(x+h-x)^2+\frac{f^{(3)}(x)}{3!}(x+h-x)^3 \quad \text{o}$$

$$f(x+h)\approx f(x)+f'(x)h+\frac{f''(x)}{2}h^2+\frac{f^{(3)}(x)}{6}h^3 \quad (1)$$

$$f(x-h)\approx f(x)+f'(x)(x-h-x)+\frac{f''(x)}{2!}(x-h-x)^2+\frac{f^{(3)}(x)}{3!}(x-h-x)^3 \quad \text{o}$$

$$f(x-h)\approx f(x)-f'(x)h+\frac{f''(x)}{2}h^2-\frac{f^{(3)}(x)}{6}h^3 \quad (2)$$

Restamos (2) de (1), tenemos:

$$f(x+h)-f(x-h)\approx 2f'(x)h+2\frac{f^{(3)}(x)}{6}h^3$$

Primera derivada centrada. Error de aproximación.

Despejamos primera derivada, obtenemos

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} - \frac{f^{(3)}(x)}{6}h^2$$ donde

$$\boxed{f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}} \qquad (3)$$

es aproximación numérica de primera derivada centrada y **el error** de la aproximación es orden de $O(h^2)$

$$err = \frac{f^{(3)}(x)}{6}h^2 = O(h^2)$$

Esto significa que si nuevo $h = h/2$ entonces y nuevo $err = err/4$.

Si tomamos más puntos, podemos obtener la **primera derivada centrada con un error de aproximación de orden** $\boldsymbol{O(h^4)}$

$$f'(x) = \frac{-f(x+2h)+8f(x+h)-8f(x-h)+f(x-2h)}{12h} + E_{trunc}(f,h) \quad (4)$$

donde error de truncamiento es $E_{trunc}(f,h) = \frac{h^4 f^{(5)}(c)}{30} = \boldsymbol{O}(h^4)$.

Extrapolación de Richardson

Relación entre diferencias centradas de orden $O(h^2)$ y $O(h^4)$

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} \qquad (5)$$

$$f'(x)=\frac{-f(x+2h)+8f(x+h)-8f(x-h)+f(x-2h)}{12h} \qquad (6)$$

Supongamos que tenemos dos aproximaciones de $f'(x)$ obtenidos con uso de formula de diferencia centrada de orden $O(h^2)$ para pasos h y $2h$

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} \qquad (7)$$

y $f'(x)=\dfrac{f(x+2h)-f(x-2h)}{4h}$ (8)

Multiplicamos (7) por 4 y sustraemos (8)

Extrapolación de Richardson

$$3f'(x)=\frac{4(f(x+h)-f(x-h))}{2h}-\frac{f(x+2h)-f(x-2h)}{4h} \quad \text{o}$$

$$f'(x)=\frac{8f(x+h)-8f(x-h)-f(x+2h)+f(x-2h)}{12h} \quad (9)$$

Ecuación (9) es formula de una **derivada centrada de orden** $\boldsymbol{O}(h^4)$

Entonces **con dos aproximaciones de** $\boldsymbol{O}(h^2)$ **podemos recibir una aproximación de orden** $\boldsymbol{O}(h^4)$ **.**

Caso general. Supongamos que hay dos aproximaciones, $D_{k-1}(h)$ y $D_{k-1}(2h)$, del orden de $\boldsymbol{O}(h^{2k})$ para la $f'(x_0)$ y aproximaciones satisfacen las relaciones

$$f'(x_0)=D_{k-1}(h)+c_1h^{2k}+c_2h^{2k+2}+\ldots$$

$$f'(x_0)=D_{k-1}(2h)+4^kc_1h^{2k}+4^{k+1}c_2h^{2k+2}+\ldots$$

Entonces aproximación de mayor orden es

$$f'(x_0)=D_k(h)+\boldsymbol{O}(h^{2k+2})=\frac{4^kD_{k-1}(h)-D_{k-1}(2h)}{4^k-1}+\boldsymbol{O}(h^{2k+2})$$

Derivadas de mayor orden. Segunda derivada centrada.

Recibimos formula para $f''(x)$ centradad de orden $O(h^2)$. Escribimos la serie de Taylor para los puntos $x+h$ y $x-h$. Nos restringimos solo a los primeros miembros al grado 4 inclusive.

$$f(x+h) \approx f(x)+f'(x)(x+h-x)+\frac{f''(x)}{2!}(x+h-x)^2+$$
$$+\frac{f^{(3)}(x)}{3!}(x+h-x)^3+\frac{f^{(4)}(x)}{4!}(x+h-x)^4$$

o

$$f(x+h) \approx f(x)+f'(x)h+\frac{f''(x)}{2}h^2+\frac{f^{(3)}(x)}{6}h^3+\frac{f^{(4)}(x)}{24}h^4 \quad (1)$$

$$f(x-h) \approx f(x)+f'(x)(x-h-x)+\frac{f''(x)}{2!}(x-h-x)^2+$$
$$+\frac{f^{(3)}(x)}{3!}(x-h-x)^3+\frac{f^{(4)}(x)}{4!}(x-h-x)^4$$

o

$$f(x-h) \approx f(x)-f'(x)h+\frac{f''(x)}{2}h^2-\frac{f^{(3)}(x)}{6}h^3+\frac{f^{(4)}(x)}{24}h^4 \quad (2)$$

Sumamos (1) y (2), tenemos:

Derivadas de mayor orden. Segunda derivada centrada.

$$f(x+h)+f(x-h)\approx 2f(x)+\frac{2h^2 f''(x)}{2}+\frac{2h^4 f^{(4)}(x)}{24}$$

Despejamos segunda derivada, obtenemos

$$f''(x)\approx\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}-\frac{2h^2 f^{(4)}(x)}{24}$$ donde

$$f''(x)\approx\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2} \qquad (3)$$ es aproximación numérica de segunda derivada centrada y **el error** de la aproximación es orden de $O(h^2)$

$$err=\frac{h^2 f^{(4)}(x)}{12}=O(h^2)$$

Formulas de diferencias centradas de orden $O(h^2)$

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$

$$f''(x)\approx\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}$$

$$f^{(3)}(x)\approx\frac{f(x+2h)-2f(x+h)+2f(x-h)-f(x-2h)}{2h^3}$$

$$f^{(4)}(x)\approx\frac{f(x+2h)-4f(x+h)+6f(x)-4f(x-h)+f(x-2h)}{h^4}$$

Formulas de diferencias centradas de orden $O(h^4)$

$$f'(x_0) \approx \frac{-f_2 + 8f_1 - 8f_{-1} + f_{-2}}{12h}$$

$$f''(x_0) \approx \frac{-f_2 + 16f_1 - 30f_0 + 16f_{-1} - f_{-2}}{12h^2}$$

$$f^{(3)}(x_0) \approx \frac{-f_3 + 8f_2 - 13f_1 + 13f_{-1} - 8f_{-2} + f_{-3}}{8h^3}$$

$$f^{(4)}(x_0) \approx \frac{-f_3 + 12f_2 - 39f_1 + 56f_0 - 39f_{-1} + 12f_{-2} - f_{-3}}{6h^4}$$

donde $f_0 = f(x_0)$, $f_1 = f(x+h)$, $f_{-1} = f(x-h)$, $f_2 = f(x+2h)$, $f_{-2} = f(x-2h)$, $f_3 = f(x+3h)$ y $f_{-3} = f(x-3h)$

Fórmulas de Diferencias Progresivas y Regresivas

Fórmulas de Diferencias Progresivas de orden $O(h^2)$

$$(9) \qquad f'(x_0) \approx \frac{-3f_0 + 4f_1 - f_2}{2h}$$

$$(10) \qquad f''(x_0) \approx \frac{2f_0 - 5f_1 + 4f_2 - f_3}{h^2}$$

$$(11) \qquad f^{(3)}(x_0) \approx \frac{-5f_0 + 18f_1 - 24f_2 + 14f_3 - 3f_4}{2h^3}$$

$$(12) \qquad f^{(4)}(x_0) \approx \frac{3f_0 - 14f_1 + 26f_2 - 24f_3 + 11f_4 - 2f_5}{h^4}$$

$$f_k = f(x_0 + kh); \qquad k = 0, 1, 2, 3, 4, 5$$

Fórmulas de Diferencias Progresivas y Regresivas

Fórmulas de Diferencias Regresivas de orden $O(h^2)$

$$(13) \qquad f'(x_0) \approx \frac{3f_0 - 4f_{-1} + f_{-2}}{2h}$$

$$(14) \qquad f''(x_0) \approx \frac{2f_0 - 5f_{-1} + 4f_{-2} - f_{-3}}{h^2}$$

$$(15) \qquad f^{(3)}(x_0) \approx \frac{5f_0 - 18f_{-1} + 24f_{-2} - 14f_{-3} + 3f_{-4}}{2h^3}$$

$$(16) \qquad f^{(4)}(x_0) \approx \frac{3f_0 - 14f_{-1} + 26f_{-2} - 24f_{-3} + 11f_{-4} - 2f_{-5}}{h^4}$$

$$f_k = f(x_0 + kh); \qquad k = -5, -4, -3, -2, -1, 0$$

Derivación Numérica. Polinomio de Newton.

Recordar que el **polinomio interpolador de Newton** $P(t)$ de grado $N=2$ que aproxima $f(t)$ usando los nodos t_0, t_1 y t_2, viene dado por

$$P(t)=a_0+a_1(t-t_0)+a_2(t-t_0)(t-t_1)$$

donde los coeficientes de polinomio son

$$a_0=f(t_0)\ ,\quad a_1=\frac{f(t_1)-f(t_0)}{t_1-t_0}\ ,\text{ y }\quad a_2=\frac{\dfrac{f(t_2)-f(t_1)}{t_2-t_1}-\dfrac{f(t_1)-f(t_0)}{t_1-t_0}}{t_2-t_0}$$

La derivada de $P(t)$ es

$$P'(t)=a_1+[a_2(t-t_1)+a_2(t-t_0)]=a_1+a_2[(t-t_1)+(t-t_0)]$$

Derivada del polinomio $P(t)$ en punto t_0 es

$$P'(t_0)=a_1+a_2(t_0-t_1)\approx f'(t_0)$$

Ordenando los nodos de maneras distintas obtendremos fórmulas de aproximación a $f'(x)$ distintas.

Derivación Numérica. Polinomio de Newton.

Caso 1: Si $t_0 = x$, $t_1 = x + h$, $t_2 = x + 2h$, entonces

$$a_1 = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

$$a_2 = \frac{\frac{f(x+2h) - f(x+h)}{h} - \frac{f(x+h) - f(x)}{h}}{2h} = \frac{f(x) - 2f(x+h) + f(x+2h)}{2h^2}$$

y al sustituir estos valores en $P'(x)$, obtenemos

$$P'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h[f(x) - 2f(x+h) + f(x+2h)]}{2h^2} =$$

$$= \frac{2f(x+h) - 2f(x)}{2h} - \frac{f(x) + 2f(x+h) - f(x+2h)}{2h} =$$

$$= \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h}$$

que es la fórmula de diferencia progresiva (9).

Derivación Numérica. Polinomio de Newton.

Caso 2: Si $t_0=x$, $t_1=x+h$, $t_2=x-h$, entonces

$$a_1=\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$

$$a_2=\frac{\frac{f(x-h)-f(x+h)}{-2h}-\frac{f(x+h)-f(x)}{h}}{-h}=\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{2h^2}$$

y al sustituir estos valores en $P'(x)$, obtenemos

$$P'(x)=\frac{f(x+h)-f(x)}{h}-\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{2h}=$$

$$=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$

que es la fórmula de diferencia centrada.

Derivación Numérica. Polinomio de Newton.

Caso 3: Si $t_0 = x$, $t_1 = x - h$, $t_2 = x - 2h$, entonces

$$a_1 = \frac{f(x-h) - f(x)}{-h} = \frac{f(x) - f(x-h)}{h}$$

$$a_2 = \frac{\dfrac{f(x-2h) - f(x-h)}{-h} - \dfrac{f(x) - f(x-h)}{h}}{-2h} =$$

$$= \frac{-f(x-h) + f(x-2h) + f(x) - f(x-h)}{2h^2}$$

y al sustituir estos valores en $P'(x)$, obtenemos

$$P'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{f(x) - 2f(x-h) + f(x-2h)}{2h} =$$

$$= \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h}$$

que es la fórmula de diferencia regresiva (13).

Derivación Numérica. Polinomio de Newton.

Generalización:

El polinomio interpolador de Newton $P(t)$ de grado N que aproxima $f(t)$ usando los nodos t_0 , t_1 , ..., t_N viene dado por

$$P(t)=a_0+a_1(t-t_0)+a_2(t-t_0)(t-t_1)+a_3(t-t_0)(t-t_1)(t-t_2)+...$$

$$+a_N(t-t_0)...(t-t_{N-1}) \ .$$

La derivada de $P(t)$ es

$$P'(t)=a_1+a_2[(t-t_0)+(t-t_1)]+a_3[(t-t_0)(t-t_1)+(t-t_0)(t-t_2)+(t-t_1)(t-t_2)]+$$

$$+...+a_N\sum_{k=0}^{N-1}\prod_{j=0}^{N-1}(t-t_j) \quad \text{para} \quad j\neq k \ .$$

Evaluando $P'(t)$ en $t=t_0$,

$$P'(t_0)=a_1+a_2(t_0-t_1)+a_3(t_0-t_1)(t_0-t_2)+.....$$

$$...+a_N(t_0-t_1)(t_0-t_2)(t_0-t_3)...(t_0-t_{N-1})$$

Derivación Numérica. Polinomio de Newton.

Generalización:

$$P'(t_0)=a_1+a_2(t_0-t_1)+a_3(t_0-t_1)(t_0-t_2)+\ldots.. \quad (1)$$

$$\ldots+a_N(t_0-t_1)(t_0-t_2)(t_0-t_3)\ldots(t_0-t_{N-1})$$

suma parcial k-ésimo en el lado derecho de formula es una **derivada de un polinomio de Newton de orden** k, construida sobre primeros k nodos.

Si $|t_0-t_1|\leq|t_0-t_2|\leq\ldots\leq|t_0-t_N|$ y si $\{t_j, 0\}_{j=0}^{N}$ es un conjunto equiespaciado (quizá reordenándolos) de $N+1$ nodos, entonces l**a suma parcial** k **-ésima es una aproximación a** $f'(t_0)$ **de orden** $\boldsymbol{O}(h^N)$.

Supongamos que $N=5$. Si los cinco nodos son $t_k=x+hk$ para $k=0,1,2,3,4$, entonces (1) es una forma para calcular la fórmula de **diferencia progresiva** para $f'(x)$ de orden $\boldsymbol{O}(h^4)$. Si los cinco nodos (t_k) son escogidos para ser $t_0=x$, $t_1=x+h$, $t_2=x-h$, $t_3=x+2h$, y $t_4=x-2h$, entonces (1) es **la fórmula de diferencia centrada** de $f'(x)$ de orden $\boldsymbol{O}(h^4)$. Cuando los cinco nodos son $t_k=x-kh$, entonces (1) es la fórmula de **diferencia regresiva** de $f'(x)$ de orden $\boldsymbol{O}(h^4)$.

Preguntas de autoevaluación

1. Derivación numérica. Paso y error de aproximación
2. Diferencias divididas progresivas y regresivas. Orden de error de aproximación
3. Diferencia dividida centrada. Orden de error de aproximación
4 Extrapolación de Richardson.
5. Derivadas de segundo orden. Orden de error de aproximación
6. Derivación por polinomio de Newton.