# Diferenciación numérica

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

## Temario

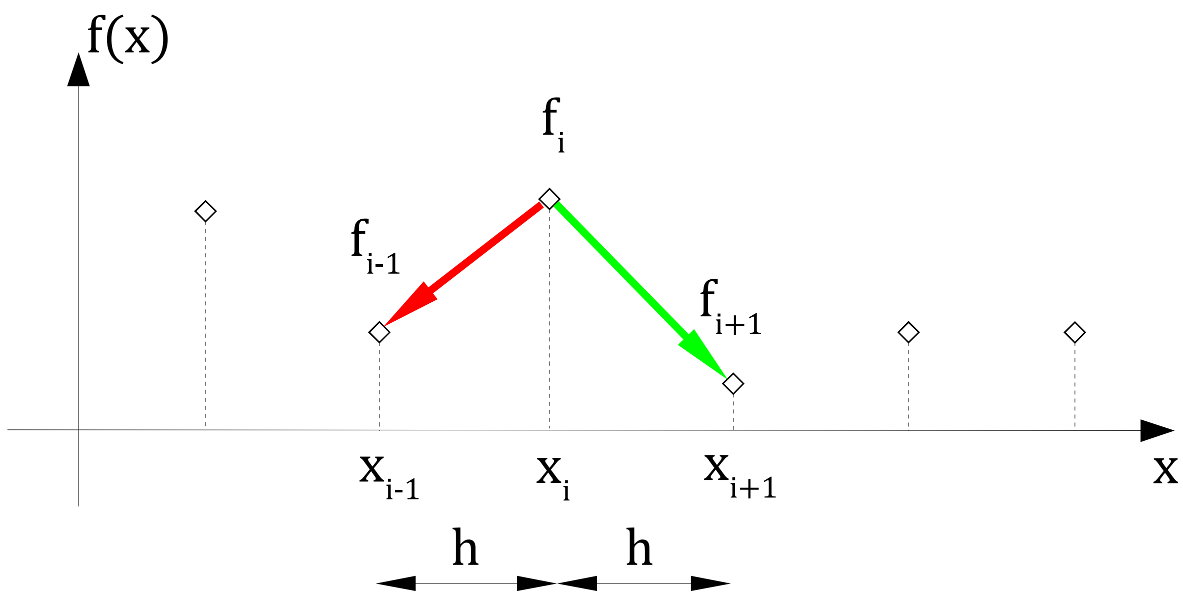
- Introducción a la diferenciación numérica
- Método general para obtención de fórmulas y su error
- Diferencia finita progresiva, regresiva, centrada y asimétrica
- Diferencia finita de derivadas de orden superior
- Ejemplos de aplicación

# Introducción a la Diferenciación numérica

Disponemos de un conjunto de pares ordenados $(x_i, f(x_i))$ a partir de los cuales se desean obtener las derivadas.

La diferenciación numérica se puede obtener:

- **Interpolando un polinomio** localmente y luego derivándolo analíticamente.
- Realizando una **expansión por series de Taylor** de la función $f(x)$ alrededor del punto $x$.




$$x_{i+1} = x_i + h$$

$$f_{i+1} = f(x_{i+1})$$

# Introducción a la Diferenciación numérica



Expansión en series de Taylor de un punto vecino.

$$f(x_0+\Delta x)=f(x_0)+\frac{df}{dx}(x_0)\Delta x+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x^2}{2!}+\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^3}{3!}+\sum_{i=4}^{\infty}\frac{d^{(i)}f}{dx^i}(x_0)\frac{\Delta x^i}{i!}$$

Si queremos aproximar la derivada primera y conocemos $(x_0,f_0),(x_1,f_1)$

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\underbrace{\frac{f_1-f_0}{h}}_{\text{Fórmula de cálculo}}-\underbrace{\left\{\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{h}{2!}+\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{h^2}{3!}+\dots\right\}}_{\text{Error de truncamiento}}$$

# Introducción a la Diferenciación numérica

El error de truncamiento se puede caracterizar mediante la notación de orden de magnitud **O**.

$$\left\{\frac{d^2 f}{dx^2}(x_0)\frac{h}{2!}+\frac{d^3 f}{dx^3}(x_0)\frac{h^2}{3!}+\ldots\right\}=O(h)$$

Formalmente decimos que existe una constante positiva **K** múltiplo de **h** que acota al error para todo **x**.

$$ET=O(h)\Rightarrow\exists K\in\Re^+/|ET|\leq K|h|\forall x$$

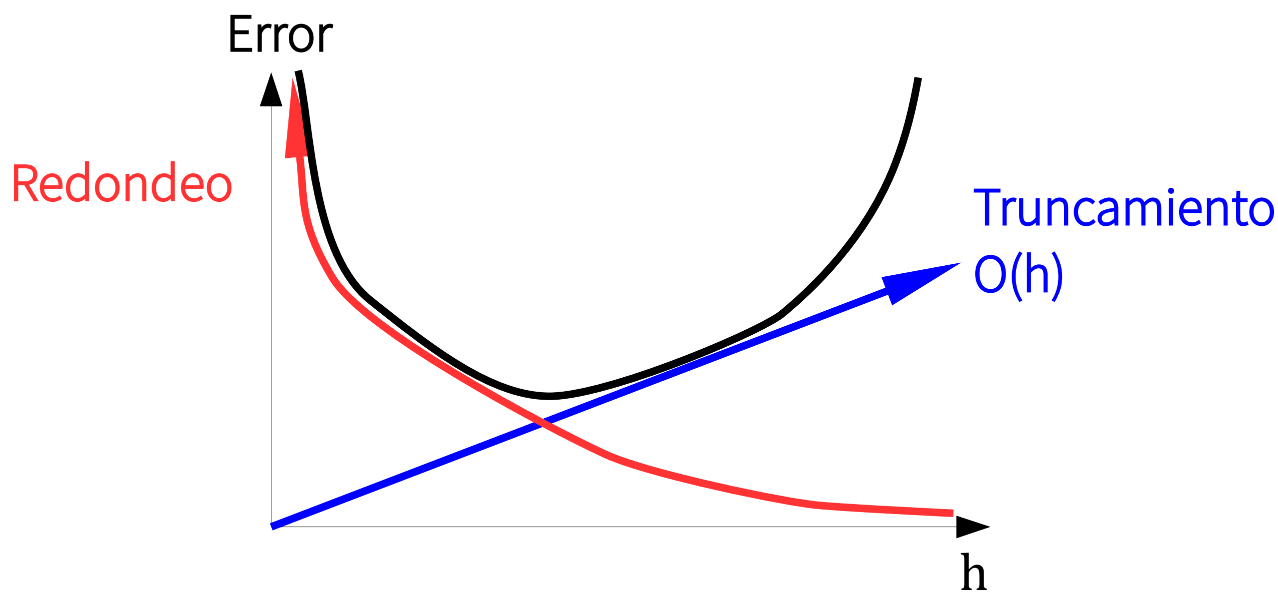
La notación de orden nos dice cómo se comporta **ET** cuando **h** tiende a cero.

# Introducción a la Diferenciación numérica



Idealmente para eliminar el **ET** se debería usar un **h** suficientemente pequeño, sin embargo, a medida que **h** se reduce, aumentan los errores de redondeo producidos por la aritmética de punto flotante.

Por lo tanto, existe un compromiso entre el error de truncamiento y el error de redondeo.



# Método general para obtención de fórmulas y su error

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

**Expansión por series de Taylor:**

Queremos determinar una fórmula de diferencias finitas que aproxime la **k-ésima** derivada con un cierto **orden de error** $\mathbf{m}$, $O(h^m)$.

Procedimiento:

1) Se realizan expansiones en series de Taylor para $\mathbf{k+m}$ puntos.

2) Se combinan linealmente las expansiones y se divide por $\mathbf{h^k}$.

3) Se imponen las siguientes condiciones:

- los términos asociados a las derivadas de orden menor se anulan.
- el término que acompaña a la derivada que se busca vale 1.

Finalmente se resuelve el SEL para determinar los coeficientes de la combinación.

# Ejemplo

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Aproxime la **derivada primera** en $x_0$ con un error de $O(h)$.
Se pide primer derivada $(k=1)$ y error de orden 1 $(m=1)$, entonces necesitamos 2 puntos.
Ya se cuenta con $x_0$, entonces surgen 2 opciones, usar el punto siguiente $x_1$ o el anterior $x_{-1}$. Veamos la primer opción.

$$f(x_0)=f_0$$

$$f(x_1)=f_0+\frac{df}{dx}(x_0)h+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{h^2}{2!}+\dots$$

Se combinan linealmente las expansiones y se divide por $h$

$$\frac{af_0+bf_1}{h}=\frac{(a+b)f_0}{h}+(b)\frac{df}{dx}(x_0)+(b)\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{h}{2!}+\dots$$

# Ejemplo

FCEN FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

$$\frac{a f_0 + b f_1}{h} = \frac{(a+b) f_0}{h} + (b)\frac{df}{dx}(x_0) + (b)\frac{d^2 f}{dx^2}(x_0)\frac{h}{2!} + \dots$$

Se impone la eliminación de los términos de menor orden

$$\begin{aligned} a+b&=0 \\ b&=1 \end{aligned} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

La solución es $a=-1$, $b=1$

La fórmula que aproxima la primer derivada con error de orden 1 es:

$$\frac{df}{dx}(x_0) = \frac{1 f_1 - 1 f_0}{h} + O(h)$$

Como se utiliza el punto siguiente la fórmula obtenida se denomina **diferencia finita hacia adelante o progresiva**.

# Ejemplo 2

Dado un punto central $x_0$ queremos determinar una fórmula de diferencias finitas que aproxime la **primer derivada** con un error de $O(h^2)$.

Necesitamos 3 puntos incluyendo $x_0$, entonces **hay tres opciones**:

usar el punto anterior $x_{-1}$ y el próximo $x_1$(**esquema centrado**),

usar los dos puntos anteriores o los dos siguientes (**esquemas asimétricos**).

Primero veamos el caso centrado.

$$f(x_0)=f(x_0)$$

$$f(x_{-1})=f(x_0)-\frac{df}{dx}(x_0)h+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{h^2}{2!}-\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{h^3}{3!}+\ldots$$

$$f(x_1)=f(x_0)+\frac{df}{dx}(x_0)h+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{h^2}{2!}+\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{h^3}{3!}+\ldots$$

# Ejemplo 2 – esquema centrado

Se combinan linealmente:

$$\frac{a\,f(x_{-1})+b\,f(x_0)+c\,f(x_1)}{h}=\frac{(a+b+c)f(x_0)}{h}+(-a+c)\frac{df}{dx}(x_0)+\ldots$$

$$\ldots+(a+c)\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{h}{2!}+(-a+c)\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{h^2}{3!}+\ldots$$

Se imponen las siguientes condiciones:

$$\begin{array}{l} a+b+c=0 \\ -a+c=1 \\ a+c=0 \end{array} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Cuya solución es $a=1/2$, $b=0$, $c=1/2$

La fórmula centrada para la derivada primera es:

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\frac{1f_1-1f_{-1}}{2h}+O(h^2)$$

# Ejemplo 2 – esquema asimétrico

$$f(x_0)=f(x_0)$$

$$f(x_1)=f(x_0)+\frac{df}{dx}(x_0)h+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{h^2}{2!}+\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{h^3}{3!}+\ldots$$

$$f(x_2)=f(x_0)+\frac{df}{dx}(x_0)2h+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{4h^2}{2!}+\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{8h^3}{3!}+\ldots$$

Se combinan linealmente:

$$\frac{af(x_0)+bf(x_1)+cf(x_2)}{h}=\frac{(a+b+c)f(x_0)}{h}+(b+2c)\frac{df}{dx}(x_0)+\ldots$$

$$\ldots+(b+4c)\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{h}{2!}+(b+8c)\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{h^2}{3!}+\ldots$$

# Ejemplo 2 – esquema asimétrico

Se imponen las condiciones

$$\begin{aligned} a+b+c&=0 \\ b+2c&=1 \\ b+4c&=0 \end{aligned} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

La solución es $a=-3/2, b=2, c=-1/2$

La fórmula asimétrica para la derivada primera es:

$$\frac{df}{dx}(x_0) = \frac{-3f_0 + 4f_1 - 1f_2}{2h} + O(h^2)$$

# Resumen – derivadas de primer orden

FCEN FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\frac{-1\,f_{-1}+1\,f_0}{h}+O(h)=\frac{1}{h}\begin{bmatrix}-1 & 1\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}f_{-1}\\ f_0\end{bmatrix}+O(h)$$

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\frac{-1\,f_0+1\,f_1}{h}+O(h)=\frac{1}{h}\begin{bmatrix}-1 & 1\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}f_0\\ f_1\end{bmatrix}+O(h)$$

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\frac{-1\,f_{-1}+1\,f_1}{2h}+O(h^2)=\frac{1}{2h}\begin{bmatrix}-1 & 0 & 1\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}f_{-1}\\ f_0\\ f_1\end{bmatrix}+O(h^2)$$

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\frac{-3\,f_0+4\,f_1-1\,f_2}{2h}+O(h^2)=\frac{1}{2h}\begin{bmatrix}-3 & 4 & -1\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}f_0\\ f_1\\ f_2\end{bmatrix}+O(h^2)$$

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\frac{1\,f_{-2}-4\,f_{-1}+3\,f_0}{2h}+O(h^2)=\frac{1}{2h}\begin{bmatrix}1 & -4 & 3\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}f_{-2}\\ f_{-1}\\ f_0\end{bmatrix}+O(h^2)$$

# Ejemplo

FCEN FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Aproximar la derivada de la función exponencial inversa en $x=0$

| h | $x_{i-1}$ | $x_{i+1}$ | progresiva | regresiva | error relativo | centrada | error relativo |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | -1 | 1 | -0,632121 | -1,718282 | | -1,175201 | |
| 0,5 | -0,5 | 0,5 | -0,786939 | -1,297443 | -24,49 % | -1,042191 | -11,32 % |
| 0,25 | -0,25 | 0,25 | -0,884797 | -1,136102 | -12,44 % | -1,010449 | -3,05 % |
| 0,125 | -0,125 | 0,125 | -0,940025 | -1,065188 | -6,24 % | -1,002606 | -0,78 % |
| 0,0625 | -0,0625 | 0,0625 | -0,969391 | -1,031911 | -3,12 % | -1,000651 | -0,19 % |
| 0,03125 | -0,03125 | 0,03125 | -0,984536 | -1,015789 | -1,56 % | -1,000163 | -0,05 % |
| 0,015625 | -0,015625 | 0,015625 | -0,992228 | -1,007853 | -0,78 % | -1,000041 | -0,01 % |
| 0,007813 | -0,007813 | 0,007813 | -0,996104 | -1,003916 | -0,39 % | -1,00001 | 0,00 % |

# Extrapolación de Richardson

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

La extrapolación de Richardson es un método que **permite eliminar el primer término del error de truncamiento** de los métodos numéricos donde **el error es de la forma** $O(h^p)$,

Se evalúa la derivada con un método de orden $O(h_1{}^p)$ y con un cierto paso $h_1$

$$\frac{df}{dx}(x_0) = g(h_1) + O(h_1^p)$$

Se evalúa la derivada con un método de orden $O(h_2{}^p)$ y con un cierto paso $h_2$

$$\frac{df}{dx}(x_0) = g(h_2) + O(h_2^p)$$

A partir de los resultados obtenidos se obtiene una aproximación de orden $p+2$

$$\frac{df}{dx}(x_0) = \frac{\beta\, g(h_2) - g(h_1)}{\beta - 1} + O(h_1^{p+2}) \quad \text{siendo} \quad \beta = \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^p$$

# Ejemplo

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\frac{\beta g(h_2)-g(h_1)}{\beta-1}+O\left(h_1^{p+2}\right) \qquad \beta=\left(\frac{h_1}{h_2}\right)^p$$

| | | | Beta | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| h | Diferencia progresiva | Error relativo | 2 | 8 | 32 | 128 | 512 |
| 1,00000 | -0,6321 | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 0,50000 | -0,7869 | 24,49 % | -0,9418 | --- | --- | --- | --- |
| 0,25000 | -0,8848 | 12,44 % | -0,9827 | -0,988 | --- | --- | --- |
| 0,12500 | -0,9400 | 6,24 % | -0,9953 | -0,997 | -0,997 | --- | --- |
| 0,06250 | -0,9694 | 3,12 % | -0,9988 | -0,999 | -0,999 | -0,999 | --- |
| 0,03125 | -0,9845 | 1,56 % | -0,9997 | -1,000 | -1,000 | -1,000 | -1,000 |

$$f(x)=e^{(-x)},\, x_0=0 \rightarrow f'(0)=-1$$