

Diferenciación numérica

Temario

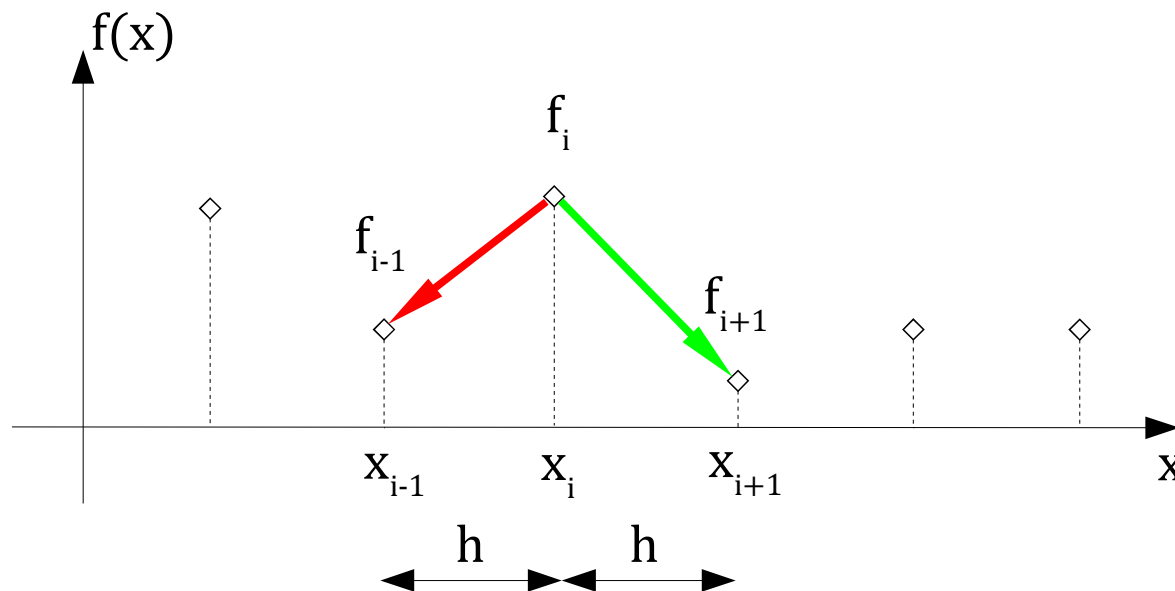
- Introducción a la diferenciación numérica
- Método general para obtención de fórmulas y su error
- Diferencia finita progresiva, regresiva, centrada y asimétrica
- Diferencia finita de derivadas de orden superior
- Ejemplos de aplicación
- Extrapolación de Richardson

Introducción a la Diferenciación numérica

Disponemos de una cantidad finita de pares ordenados (x,y) 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.

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

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

$$\frac{df}{dx}(x_0) = \frac{f_1 - f_0}{h} - \left\{ \frac{d^2 f}{dx^2}(x_0) \frac{h}{2!} + \frac{d^3 f}{dx^3}(x_0) \frac{h^2}{3!} + \dots \right\}$$

↑
Fórmula de
cálculo

↑
Error de
truncamiento

Introducción a la Diferenciación numérica

El error de truncamiento se puede caracterizar mediante la notación de orden de magnitud \mathbf{O} .

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

Formalmente decimos que existe una constante positiva \mathbf{K} múltiplo de \mathbf{h} que acota al error para todo \mathbf{x} .

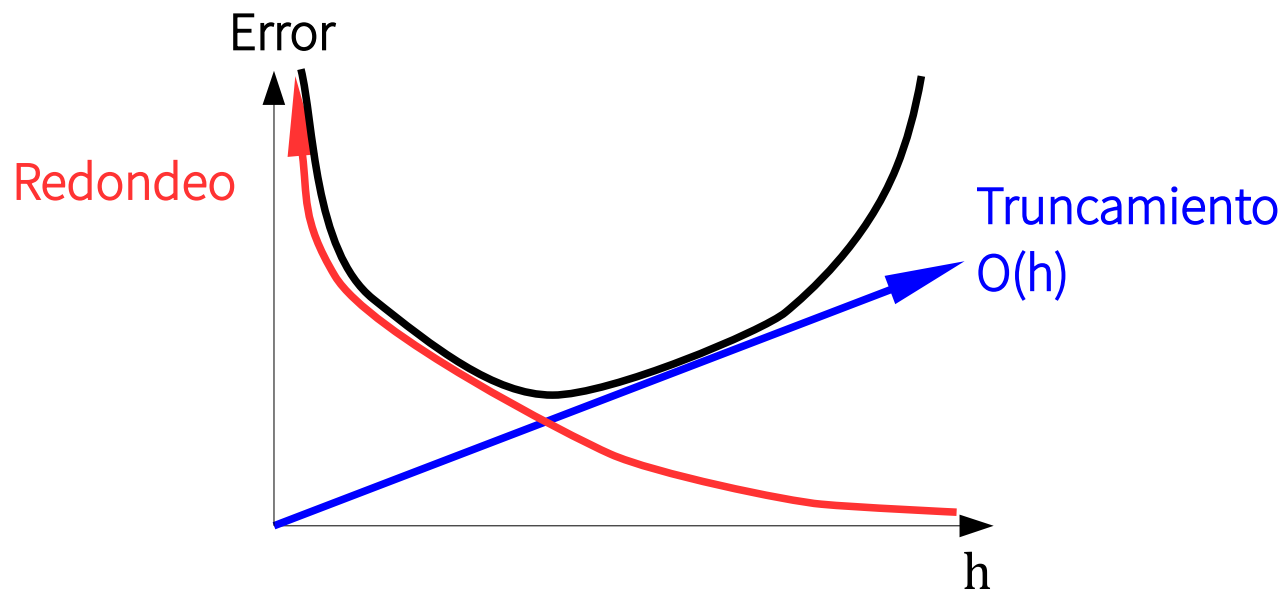
$$\mathbf{ET} = \mathbf{O}(h) \Rightarrow \exists K \in \mathcal{R}^+ / |\mathbf{ET}| \leq K|h| \forall \mathbf{x}$$

La notación de orden nos dice cómo se comporta \mathbf{ET} cuando \mathbf{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

Expansión por series de Taylor:

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

Procedimiento:

- 1) Se realizan expansiones en series de Taylor para **k+m** puntos.
- 2) Se combinan linealmente las expansiones y se divide por **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

Aproxime la **derivada primera** en \mathbf{x}_0 con un error de $\mathbf{O}(\mathbf{h})$.

Se pide primer derivada ($\mathbf{k}=1$) y error de orden 1 ($\mathbf{m}=1$), entonces necesitamos 2 puntos.

Ya se cuenta con \mathbf{x}_0 , entonces surgen 2 opciones, usar el punto siguiente \mathbf{x}_1 o el anterior \mathbf{x}_{-1} . Veamos la primer opción.

$$f(\mathbf{x}_0) = f_0$$

$$f(\mathbf{x}_1) = f_0 + \frac{df}{dx}(\mathbf{x}_0)h + \frac{d^2f}{dx^2}(\mathbf{x}_0)\frac{h^2}{2!} + \dots$$

Se combinan linealmente las expansiones y se divide por \mathbf{h}

$$\frac{af_0 + bf_1}{h} = \frac{(a+b)f_0}{h} + (b)\frac{df}{dx}(\mathbf{x}_0) + (b)\frac{d^2f}{dx^2}(\mathbf{x}_0)\frac{h}{2!} + \dots$$

Ejemplo

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

Se impone la eliminación de los términos de menor orden

$$\begin{matrix} a+b=0 \\ b=1 \end{matrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{La solución es } a=-1, b=1$$

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

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

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

Ejemplo 2

Dado un punto central \mathbf{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 \mathbf{x}_0 , entonces **hay tres opciones**:

usar el punto anterior \mathbf{x}_{-1} y el próximo \mathbf{x}_1 (**esquema centrado**),

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

Primero veamos el caso centrado.

$$f(\mathbf{x}_0) = f(\mathbf{x}_0)$$

$$f(\mathbf{x}_{-1}) = f(\mathbf{x}_0) - \frac{df}{dx}(\mathbf{x}_0)h + \frac{d^2f}{dx^2}(\mathbf{x}_0)\frac{h^2}{2!} - \frac{d^3f}{dx^3}(\mathbf{x}_0)\frac{h^3}{3!} + \dots$$

$$f(\mathbf{x}_1) = f(\mathbf{x}_0) + \frac{df}{dx}(\mathbf{x}_0)h + \frac{d^2f}{dx^2}(\mathbf{x}_0)\frac{h^2}{2!} + \frac{d^3f}{dx^3}(\mathbf{x}_0)\frac{h^3}{3!} + \dots$$

Ejemplo 2 – esquema centrado

Se combinan linealmente:

$$\frac{af(x_{-1})+bf(x_0)+cf(x_1)}{h} = \frac{(a+b+c)f(x_0)}{h} + (-a+c)\frac{df}{dx}(x_0) + \dots$$

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

Se imponen las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned} a+b+c=0 \\ -a+c=1 \\ a+c=0 \end{aligned} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{Cuya solución es } a=1/2, b=0, c=1/2$$

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

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

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

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

Se combinan linealmente:

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

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

Ejemplo 2 – esquema asimétrico

Se imponen las condiciones

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

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

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

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

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

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

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

Ejemplo

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

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

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

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

h	Diferencia progresiva	Error relativo	Beta				
			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

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