diferencias finitas

May 9, 2022

0.1 Diferencias Finitas

Recordemos que: dada una función $f: R \to R$ diremos que f es diferenciable en $x = x_0$ si el siguiente límite existe:

$$\lim_{dx\to 0} \frac{f(x+dx) - f(x)}{dx}$$

tanto para dx positivo como negativo.

El proceso de límite es fundamental en la definición y es lo que introduce lo nuevo en el concepto.

Hay una suposición subyasente en muchas áreas de la física y es que: los modelos y las leyes que nos permiten explicar el comportamiento de la materia se basan en la hipótesis del contínuo y en la existencia de leyes diferenciales. Es decir, modelamos aspectos de la realidad que observamos usando funciones que toman valores en contínuos y las ecuaciones que describen el funcionamiento son relaciones entre derivadas.

Por ejemplo, las ecuaciones de Newton nos dicen,

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = F(t, x).$$

Es decir una relación entre las derivadas segundas de un observable, la posición, es proporcional a las fuerzas aplicadas.

Sin embargo, en muchas circunstancias es preciso calcular aproximaciones a las derivadas de funciones cuando solo conocemos sus valores en un conjunto finito de puntos y por lo tanto no existe la posibilidad tomar límites.

Esta situación sucede habitualmente en dos circunstancias:

- 1. Cuando tenemos datos experimentales y por lo tanto tenemos un número finito de datos con que trabajar, en general pares $\{(x_i,y_i)\}$, $i=1\dots n$ donde los $\{x_i\}$ son parámetros que podemos variar (con cierta libertad) en nuestra configuración experimental y los $\{y_i\}$ son los resultados experimentales. Por ejemplo si queremos medir la presión de un gas $\{p_i\}$, cuando vamos cambiando su volúmen $\{V_i\}$ mientras mantenemos la temperatura constante. Los errores inherentes en las mediciones hacen que estas sean en efecto discretas.
- 2. Cuando queremos realizar cálculos numéricos concretos sobre funciones y solo las podemos representar como conjuntos de valores en ciertos puntos. Por ejemplo, en el caso de las ecuaciones de Newton, describiremos a la función x(t) como un conjunto de puntos x_i definidos a los tiempos t_i . Otro ejemplo usual es cuando queremos calcular cómo se mueve una onda en

un canal la representaremos como un conjunto de alturas a distintas posiciones (usualmente equiespaciadas), $\{A_i\}$ $\{x_i\}$.

0.1.1 Aproximación a la derivada primera de primer orden

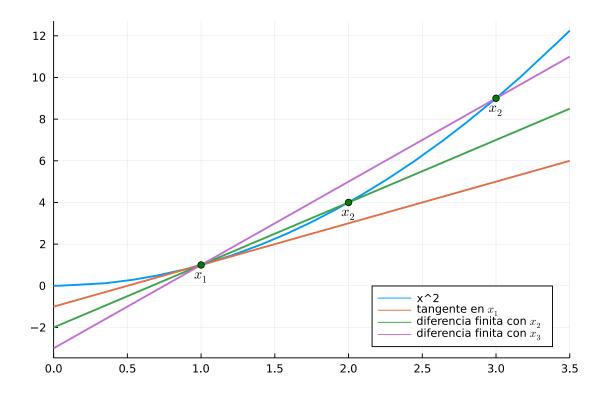
Como explicado anteriormente, supondremos que los valores que tenemos en los conjuntos $\{(x_i, y_i)\}$ provienen de evaluaciones de funciones f(x) que son suaves. Con esta suposición queremos aproximar la primer derivada de f en uno de los puntos x_i .

Utilizando dos puntos, x_1 y x_2 podemos aproximar la derivada por el cociente de las diferencias, lo que llamamos una diferencia finita, ya que no estamos pensando en tomar el límite $x_2 \to x_1$, pero si tomar intervalos pequeños pero finitos,

$$D_1 f := \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$$
 Diferencia finita por la derecha

```
[18]: using Plots
      using LaTeXStrings
      f(x) = x^2
      x1 = 1
      x2 = 2
      x3 = 3
      a2 = (f(x2) - f(x1))/(x2-x1)
      b2 = f(x1) - a2*x1
      a3 = (f(x3) - f(x1))/(x3-x1)
      b3 = f(x1) - a3*x1
      plot(f, xlim=(0,3.5), lw = 2, label="x^2", legend=:bottomright)
      \#plot!([1], [f(1)], label="x_1", lw=3)
      plot!(x-> 2*x1*x - x1^2, 1w = 2, label="tangente en \$x_1\$")
      plot!(x-> a2*x + b2, lw = 2, label="differencia finita con \$x 2\$")
      plot!(x-> a3*x + b3, lw = 2, label="differencia finita con \$x_3\$")
      scatter!([x1], [f(x1)], c="green", ann=(x1, f(x1) - 0.5, L"x_1", 10), label="")
      scatter!([x2], [f(x2)], c="green", ann=(x2, f(x2) - 0.5, L"x_2", 10), label="")
      scatter!([x3], [f(x3)], c="green", ann=(x3, f(x3) - 0.5, L"x_2", 10), label="")
```

[18]:



Cuál es el error en que incurrimos cuando hacemos esto? Naturalmente puede ser muy grande, pero el teorema de Taylor nos ayuda a cuantificarlo, y sobre todo ver que decrece cuando tomamos intervalos más y más pequeños.

Recordemos el teorema Taylor:

Sea $f \in C^2[a,b]$, luego existe $\zeta \in [a,b]$ tal que

$$f(x_2) = f(x_1) + f^{'}(x_1)(x_2 - x_1) + \frac{1}{2}f^{''}(\zeta) \ (x_2 - x_1)^2$$

Vemos entonces que:

$$D_1f-f^{'}(x_1):=\frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1}-f^{'}(x_1)=\frac{1}{2}f^{''}(\zeta)(x_2-x_1)$$

Y por lo tanto,

$$Error := |D_1 f - f^{'}(x_1)| \leq |\frac{1}{2} f^{''}(\zeta)| \; |(x_2 - x_1)|$$

Podemos notar dos aspectos de esta desigualdad:

1. El error depende de la magnitud de la derivada segunda. Si por alguna razón podemos estimar dicha magnitud podremos estimar el error.

- 2. El error depende linealmente de la diferencia entre los puntos tomados. A menor diferencia menor error. Veremos que podemos encontrar métodos donde el error disminuye apreciablemente.
- 3. Si tenemos dos pares de puntos entonces sabemos que hay un único polinomio interpolante conectando dichos puntos, la recta que los une. Tomando la derivada de dicho polinomio vemos que coincide con la diferencia finita de orden 1.

Ejemplo: Supongamos que tenemos la serie de mediciones $\{(x_i, t_i)\}$ representando la caída vertical de un cuerpo bajo la influencia de la gravedad, y quizá algún efecto de rozamiento.

Si queremos estimar la velocidad, $\frac{dx}{dt}$ usando las diferencias divididas,

$$\frac{x_{i+1} - x_i}{t_{i+1} - t_i},$$

podemos estimar el error ya que la derivada segunda de x con respecto a t es la acelaración y esta estará relacionada con las fuerzas y la masa a través de la ley de Newton:

$$\left|\frac{d^2x}{dt^2}\right| \le \left|\frac{F}{m}\right| \le \left|\frac{mg}{m}\right| \le g$$

Conociendo este hecho entonces podemos diseñar nuestro aparato de medición de forma que tome intervalos consecutivos de las posiciones y tiempos de forma tal que los intervalos temporales sean tales que nos acoten el error en la velocidad a los niveles deseados.

0.1.2 Errores en puntos intermedios

El cálculo anterior nos dió una cota para el error cuando estimamos la derivada por diferencias finitas justo en el punto x_1 . Cuál es el error en puntos intermedios entre x_1 y x_2 ?. Notemos que si aplicamos el teorema del valor medio comenzando con el punto x_2 llegaremos exactamente a la misma expresión para el error y su cota, excepto que ahora el término de las derivadas segundas tendrá el signo contrario. El error tiene la misma estimación para este punto! Es de esperar entonces que el error será similar para todos los puntos intermedios.

Para ver esto ahora usamos el teorema de Taylor para un punto arbitrario en el intervalo $x \in [x_1, x_2]$

$$f(x_1)-f(x)=f^{'}(x)(x_1-x)+\frac{1}{2}f^{''}(\zeta_1)(x_1-x)^2$$

Usando ahora x_2 ,

$$f(x_2) - f(x) = f^{'}(x)(x_2 - x) + \frac{1}{2}f^{''}(\zeta_2)(x_2 - x)^2$$

Y restando la primera de la segunda obtenemos,

$$f(x_2) - f(x_1) = -f^{'}(x)(x_1 - x) + f^{'}(x)(x_2 - x) - \frac{1}{2}f^{''}(\zeta_1)(x_1 - x)^2 + \frac{1}{2}f^{''}(\zeta_2)(x_2 - x)^2$$

Por lo tanto,

$$\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} = f'(x) - \frac{1}{2} [f''(\zeta_1) \frac{(x_1 - x)^2}{x_2 - x_1} - f''(\zeta_2) \frac{(x_2 - x)^2}{x_2 - x_1}].$$

Finalmente obtenemos:

$$Error = |\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - f^{'}(x)| \leq \max_{\zeta \in [x_1, x_2]} |f^{''}(\zeta)| \; |x_2 - x_1|.$$

Y constatamos que el error tiene una cota similar para los puntos intermedios.

Ejemplo: Sea $f(x) = x^2$ luego las diferencias finitas nos dan,

$$D_1 f(x) = \frac{(x + \Delta x)^2 - x^2}{\Delta x} = 2x + \Delta x,$$

y por lo tanto,

$$D_1 f(x) - f'(x) = \Delta x$$

Recordando que $f^{''}(x) = 2$ vemos que el error es justamente el de la cota anterior.

0.1.3 Diferencias finitas de mayor orden.

Podemos lograr aproximaciones mejores? Es decir aproximaciones que para un mismo tamaños de los intervalos entre las x_i nos aproximemos mejor a la derivada?

La respuesta es que si usamos más de dos puntos podemos lograr mejores aproximaciones a las derivadas. Por ejemplo con tres puntos equiespaciados, $(x_1, x_2 = x_1 + \Delta x, x_3 = x_1 + 2\Delta x)$, podemos lograr una aproximación mucho mejor para algunos puntos en particular:

Afirmación:

$$D_2 f := \frac{f(x_3) - f(x_1)}{x_3 - x_1}$$

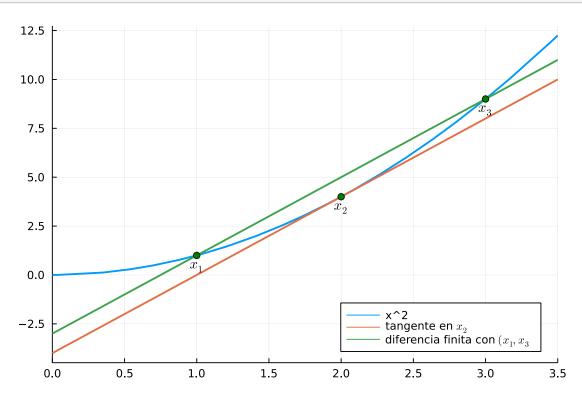
Es una aproximación a la derivada en el punto x_2 que es precisa orden Δx^2 . Se la denomina diferencia finita centrada

```
[21]: x1=1
    x2=2
    x3=3
    a3 = (f(x3) - f(x1))/(x3-x1)
    b3 = f(x1) - a3*x1
    plot(f, xlim=(0,3.5), label="x^2", lw = 2, legend=:bottomright)
    #plot!([1], [f(1)], label="x_1", lw=3)

plot!(x-> 2*x2*x - x2^2, lw = 2, label="tangente en \$x_2\$")
    plot!(x-> a3*x + b3, lw = 2, label="differencia finita con \$(x_1,x_3\$")
```

```
scatter!([x1], [f(x1)], c="green", ann=(x1, f(x1) - 0.5, L"x_1", 10), label="") scatter!([x2], [f(x2)], c="green", ann=(x2, f(x2) - 0.5, L"x_2", 10), label="") scatter!([x3], [f(x3)], c="green", ann=(x3, f(x3) - 0.5, L"x_3", 10), label="")
```

[21]:



Esto lo podemos ver de varias maneras:

- 1. Usando el polinomio interpolante. En efecto, si tomamos 3 puntos entonces habrá un único polinomio interpolante de orden 2 conectándo los mismos. Lo podemos calcular y tomar las derivadas del mismo. El resultado será exacto si la función que estamos considerando en un polinomio de orden 2. El error dependerá entonces de las al menos de orden 3.
- 2. Usando expansión en serie de Taylor tal como lo haremos a continuación.

Para ver esto ahora usamos el teorema de Taylor (pero para un orden de derivada más) para el punto x_2 ,

$$f(x_1) - f(x_2) = f^{'}(x_2)(x_1 - x_2) + \frac{1}{2}f^{''}(x_2)(x_1 - x_2)^2 + \frac{1}{6}f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^3$$

Similarmente intercambiando x_1 por x_3 ,

$$f(x_3) - f(x_2) = f^{'}(x_2)(x_3 - x_2) + \frac{1}{2}f^{''}(x_2)(x_3 - x_2)^2 + \frac{1}{6}f^{'''}(\zeta_3)(x_3 - x_2)^3$$

Y restando la primera de la segunda obtenemos,

$$f(x_3) - f(x_1) = f^{'}(x_2)(x_3 - x_1) + \frac{1}{2}f^{''}(x_2)(x_3 - x_2)^2 - \frac{1}{2}f^{''}(x_2)(x_1 - x_2)^2 + \frac{1}{6}f^{'''}(\zeta_3)(x_3 - x_2)^3 - \frac{1}{6}f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^3 + \frac{1}{6}f^{'''}(\zeta_2)(x_3 - x_2)^3 - \frac{1}{6}f^{'''}(\zeta_3)(x_3 - x_2)^3 - \frac{1}{6}f^{''}(\zeta_3)(x_3 - x_2)^3 - \frac{1}{6}f^{''}(\zeta_3)(x_3 - x_2)^3 - \frac{1}{6}f^{'''}(\zeta_3)(x_3 - x_2)^3 - \frac{1}{6}f^{'$$

Por lo tanto,

$$\frac{f(x_3)-f(x_1)}{x_3-x_1}=f^{'}(x_2)+\frac{1}{2}f^{''}(x_2)[\frac{(x_3-x_2)^2}{x_3-x_1}-\frac{(x_1-x_2)^2}{x_3-x_1}]+\frac{1}{6}[f^{'''}(\zeta_1)\frac{(x_1-x_2)^3}{x_3-x_1}-f^{'''}(\zeta_2)\frac{(x_3-x_2)^3}{x_3-x_1}].$$

Imponiendo ahora la condición de que los intervalos son iguales $(x_3-x_2=x_2-x_1=\Delta x)$ los términos en derivadas primeras se cancelan y obtenemos:

$$Error = |\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - f^{'}(x_2)| \leq \frac{1}{6} \max_{\zeta \in [x_1, x_2]} |f^{'''}(\zeta)| \; \Delta x^2.$$

Notemos que:

- 1. El error va a cero como Δx^2 , por lo tanto, para un mismo Δx el error de la diferencia centrada es mucho menor.
- 2. Notemos que usamos solo dos puntos, o sea el costo en la evaluación de f (de ser necesaria) es el mismo que para la diferencia finita inicial que vimos.
- 3. Si las distancias entre los puntos no son iguales los términos no se cancelan y debemos usar los 3 puntos para construir una diferencia finita que aproxime a ese orden.

Ejercicio 1: Vea que para el caso donde los intervalos entre las x_i no son iguales de todos modos hay una diferencia finita, usando los 3 puntos, que también es de orden cuadrático. Ayuda, multiplique cada término arriba por un factor tal que los términos en derivadas segundas se cancelan en la resta.

Ejercicio 2: De la misma manera, pero usando más puntos cercanos, podemos obtener diferencias finitas de mayor orden. Constate que si tomamos una función lineal, luego la diferencia finita D_x es exactamente igual a la derivada de la misma y del mismo modo la diferencia finita centrada de un polinomio de segundo grado coincide con la derivada del mismo. Que se podrá afirmar en general?

Ejercicio 3: Podemos usar el hecho que una diferencia finita de orden n de un polinomio de orden hasta el grado n coincide con la derivada de los mismos $(D_n P^m(x) = \frac{dP^m}{dx}(x)$ si $m \le n)$ para encontrar los coeficientes de estas diferencias finitas?

Ejemplo: Calcularemos ambas diferencias finitas de la función sin(x) entre 0 y 2π y compararemos con la derivada exacta cos(x).

```
[38]: dx = /10

x = 0:dx:2

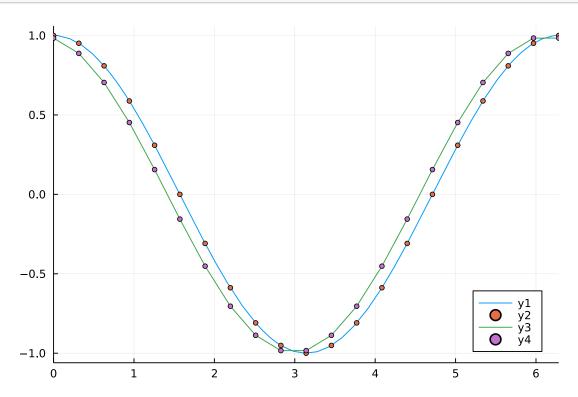
v = \sin.(x)

dv(dx) = (\sin.(x.+dx) - \sin.(x))/dx;

dv0(dx) = (\sin.(x.+dx) - \sin.(x.-dx))/2/dx;
```

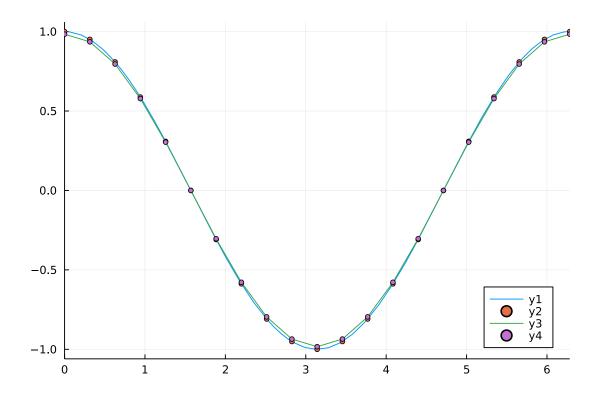
```
[39]: plot(x -> cos.(x), xlim=(0,2), legend=:bottomright)
scatter!(x,cos.(x),ms=3)
plot!(x,dv(dx))
scatter!(x,dv(dx),ms=3)
```

[39]:



```
[40]: plot(x -> cos.(x), xlim=(0,2), legend=:bottomright)
    scatter!(x,cos.(x),ms=3)
    plot!(x,dv0(dx))
    scatter!(x,dv0(dx),ms=3)
```

[40]:



Ahora calcularemos el error total como función de dx

[6]:
$$Error_1(dx) = sqrt(sum(dv(dx) - cos.(x)).^2)*dx$$

$$Error_2(dx) = sqrt(sum(dv0(dx) - cos.(x)).^2)*dx$$

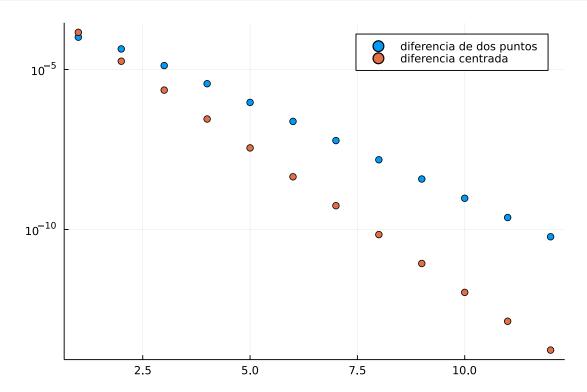
[6]: Error_2 (generic function with 1 method)

[7]:
$$rdx = [2.0^{(-i)}*0.5 \text{ for i in } 1:12]$$

- [7]: 12-element Vector{Float64}:
 - 0.25
 - 0.125
 - 0.0625
 - 0.03125
 - 0.015625
 - 0.0078125
 - 0.00390625
 - 0.001953125
 - 0.0009765625
 - 0.00048828125
 - 0.000244140625
 - 0.0001220703125

[8]: scatter(Error_1.(rdx), yscale=:log10, label="differencia de dos puntos") scatter!(Error_2.(rdx), label="differencia centrada")

[8]:



0.1.4 Fórmula para puntos a distancias arbitrarias.

Si hizo el **Ejercicio 1** más arriba ya sabe la solución. Si no lo hizo es el momento de hacerlo antes de seguir.

Partimos de la expresión general para las diferencias finitas con distancias arbitrarias obtenidas por expansión de Taylor para dos conjuntos arbitrarios de puntos:

$$\frac{f(x_1) - f(x_2)}{x_1 - x_2} = f^{'}(x_2) + \frac{1}{2}f^{''}(x_2)(x_1 - x_2) + \frac{1}{6}f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2$$

Substituyendo x_1 por x_3 tenemos,

$$\frac{f(x_3) - f(x_2)}{x_3 - x_2} = f'(x_2) + \frac{1}{2}f''(x_2)(x_3 - x_2) + \frac{1}{6}f'''(\zeta_3)(x_3 - x_2)^2$$

Multiplicando la primera por $(x_3 - x_2)$ y la segunda por $(x_1 - x_2)$, y restando obtenemos una expresión donde hemos eliminado los términos con derivadas segundas,

$$\frac{f(x_1)-f(x_2)}{x_1-x_2}(x_3-x_2)-\frac{f(x_3)-f(x_2)}{x_3-x_2}(x_1-x_2)=f^{'}(x_2)[(x_3-x_2)-(x_1-x_2)]+\frac{1}{6}f^{'''}(\zeta_1)(x_1-x_2)^2(x_3-x_2)-\frac{1}{6}f^{'''}(\zeta_3)(x_1-x_2)=f^{'}(x_2)[(x_3-x_2)-(x_1-x_2)]+\frac{1}{6}f^{'''}(\zeta_1)(x_1-x_2)^2(x_3-x_2)$$

Despejando,

$$f^{'}(x_{2}) = \frac{f(x_{1}) - f(x_{2})}{(x_{1} - x_{2})(x_{3} - x_{1})}(x_{3} - x_{2}) - \frac{f(x_{3}) - f(x_{2})}{(x_{3} - x_{2})(x_{3} - x_{1})}(x_{1} - x_{2}) + \frac{1}{6(x_{3} - x_{1})}[f^{'''}(\zeta_{1})(x_{1} - x_{2})^{2}(x_{3} - x_{2}) - f^{'''}(\zeta_{3})(x_{1} - x_{2})^{2}(x_{3} - x_{2})^{2}(x_{3} - x_{2}) - f^{'''}(\zeta_{3})(x_{1} - x_{2})^{2}(x_{3} - x_{2})^{2}(x_{3} - x_{2}) - f^{'''}(\zeta_{3})(x_{1} - x_{2})^{2}(x_{3} - x_{2}$$

La expresión se puede arreglar un poquito para dejarla como:

$$f^{'}(x_2) = \frac{f(x_1)(x_3 - x_2)}{(x_1 - x_2)(x_3 - x_1)} - \frac{f(x_3)(x_1 - x_2)}{(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)} + f(x_2)[\frac{1}{x_2 - x_1} + \frac{1}{x_2 - x_3}] + \frac{1}{6(x_3 - x_1)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2) - \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)}] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{'''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3 - x_2)] + \frac{1}{2(x_3 - x_2)(x_3 - x_2)}[f^{''}(\zeta_1)(x_1 - x_2)^2(x_3$$

Chequeamos cuando $x_1=x_2-\Delta x$ y $x_3=x_2+\Delta x$, es decir el caso de diferencias finitas centradas:

$$f^{'}(x_{2}) = \frac{f(x_{1}) - f(x_{2})}{(-\Delta x)(2\Delta x)} \Delta x - \frac{f(x_{3}) - f(x_{2})}{\Delta x(2\Delta x)} (-\Delta x) + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{3})(\Delta x)^{2}(-\Delta x)] + \frac{1}{6(2\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{'''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x) + f^{''}(\zeta_{1})(-\Delta x)^{2}(\Delta x)$$

$$f'(x_2) = \frac{f(x_3) - f(x_1)}{2\Delta x} + \frac{1}{12} [f'''(\zeta_1) + f'''(\zeta_3)] \Delta x^2 \quad \text{OK}$$

Ejercicio: Usando la expresión del polinomio interpolante en la forma de Lagrange que se obtiene de estos 3 puntos, calcule la derivada del mismo en $x=x_2$ y compare! Ayuda: comienze con la fórmula de la derivada del polinomio interpolante y luego trate de reescribir la expresión de arriba para llegar a esa fórmula.

$$PL(f)(x) = \frac{f(x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} + \frac{f(x_2)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} + \frac{f(x_3)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_3-x_2)(x_3-x_1)}$$

0.1.5 Diferencias finitas cerca de los puntos iniciales o finales de una sucesión.

Cuando necesitamos aproximar una derivada cerca de un borde no podemos usar las fórmulas centradas ya que solo podremos usar puntos hacia un solo lado. O al menos de forma no simétrica.

Un caso simple es cuando tenemos una sucesión de N puntos y queremos estimar la derivada en el último punto, N.

Primer orden: En el caso de la aproximación de primer orden aplicaremos,

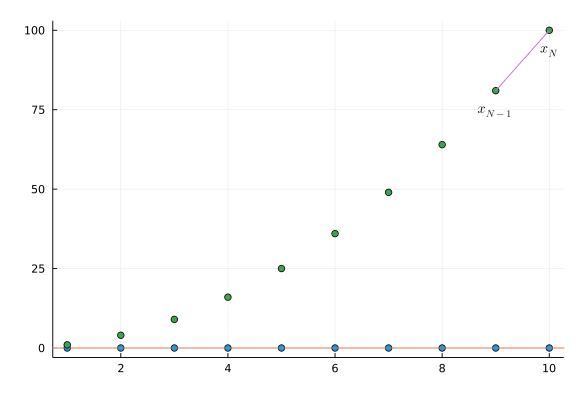
$$D_x f(x_N) = \frac{f(x_N) - f(x_{N-1})}{x_N - x_{N-1}}$$

Y para todo el resto de los puntos, incluso el primero, usaremos.

$$D_x f(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$$

Note que en los dos últimos puntos las aproximaciones son las mismas!

[30]:



Mayor orden: Veamos el caso de segundo orden utilizando la expresión general obtenida anteriormente pero nos restringiremos al caso más común, el de puntos equiespaciados:

Para ver que sucede en el borde izquierdo cuando hacemos la aproximación de tres puntos elegimos, $x_1 = x_2 + \Delta x$ y $x_3 = x_2 + 2\Delta x$ (note que cambiamos el órden de los puntos, el primero será x_2 , seguido de x_1 y luego x_3) para obtener:

$$f^{'}(x_2) = \frac{f(x_1) - f(x_2)}{\Delta x (\Delta x)} (2\Delta x) - \frac{f(x_3) - f(x_2)}{(2\Delta x)(\Delta x)} (\Delta x) + \frac{1}{6(\Delta x)} [f^{'''}(\zeta_1)(\Delta x)^2 (2\Delta x) - f^{'''}(\zeta_3)(2\Delta x)^2 (\Delta x)]$$

$$f^{'}(x_2) = \frac{-3f(x_2) + 4f(x_1) - f(x_3)}{2\Delta x} + \frac{1}{3}[f^{'''}(\zeta_1) - f^{'''}(\zeta_3)]\Delta x^2$$

Definimos así, (renombrando los puntos en el orden lógico):

$$D_2(f)_{x_1} := \frac{-3f(x_1) + 4f(x_2) - f(x_3)}{2\Delta x}$$

Ejercicio: Encuentre la expresión para el borde derecho, o sea la definición de $D_2(f)_{x_N}$

Ejercicio: Compruebe que para $f(x) = x^2 + x + 1$ la aproximación es exacta.

Aproximaciones de orden superior Para muchas aplicaciones prácticas las aproximaciones a orden 2 (o sea donde el error escala como Δx^2) son insuficientes y es necesario ir a órdenes superiores.

Por ejemplo las diferencias finitas centradas de orden 4 vienen dadas por:

$$D_4(f)_{x_i} = \frac{1}{12}(-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))$$

Naturalmente, para los puntos en los extremos, x_1 , x_2 , x_{N-1} y x_N necesitaremos fórmulas alternativas, las cuales pueden ser encontradas en los libros del tema o calculadas usando los polinomios interpolantes del orden requerido.

Nota: Para algunos problemas no es aconsejable usar cerca de los bordes las diferencias finitas del mismo orden que en el interior, por ejemplo, para integrar ecuaciones de onda se utilizan diferencias finitas distintas a las genéricas cerca de los contornos para obtener estabilidad.

Ejercicio: Vea que es exacta para polinomios de grado ≤ 4 .

0.1.6 Aproximaciones a las derivadas segundas.

En principio uno podría aplicar dos veces la misma diferencia finita y obtener así una aproximación a la derivada segunda de una función. Note por ejemplo que si hiciésemos eso con la de primer orden obtendríamos:

$$DD(f)_{x_i} := \frac{1}{\Delta x} D(f(x_{i+1}) - f(x_i)) = \frac{1}{\Delta x^2} (f(x_{i+2}) - f(x_{i+1})) - (f(x_{i+1}) - f(x_i)) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{\Delta x^2}$$

O sea, estaríamos usando 3 puntos para obtener una aproximación de $primer\ orden$ para la derivada segunda, es decir,

$$DD(f)_{x_i} = f^{''}(x_i) + \mathcal{O}(\Delta x)$$

Para obtener mejores aproximaciones podemos utilizar el método del polinomio interpolante, tomando esta vez derivadas segundas de los mismos.

Una diferencia muy usada en la encontrada más arriba, pero pensada para el punto intermedio! Es decir una diferencia centrada:

$$D^2(f)_{x_i} := D^+(D^-(f)_{x_i}) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{\Delta x^2}$$

Donde $D^+f_{x_i}:=\frac{f(x_{i+1})-f(x_i)}{\Delta x}$ y $D^-f_{x_i}:=\frac{f(x_i)-f(x_{i-1})}{\Delta x}.$

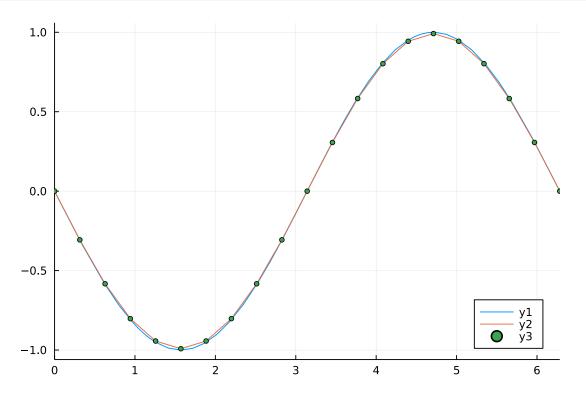
Haciendo una expansión en serie de Taylor hasta términos de orden 4 en Δx se puede ver que:

$$Error_D^2(f) = |D^2(f)_{x_i} - f''(x_i)| \leq \frac{1}{12} \max_{\zeta \in [x_{i-1}, x_{i+1}]} |f^{''''}(\zeta)| \Delta x^2$$

Ejercicio: Muestre explicitamente que esta aproximación es exacta para polinomios hasta orden 3.

```
[35]: scatter!(x,-sin.(x),ms=3)
plot(x -> -sin(x), xlim=(0,2), legend=:bottomright)
plot!(x,dvv0(dx))
scatter!(x,dvv0(dx),ms=3)
```

[35]:

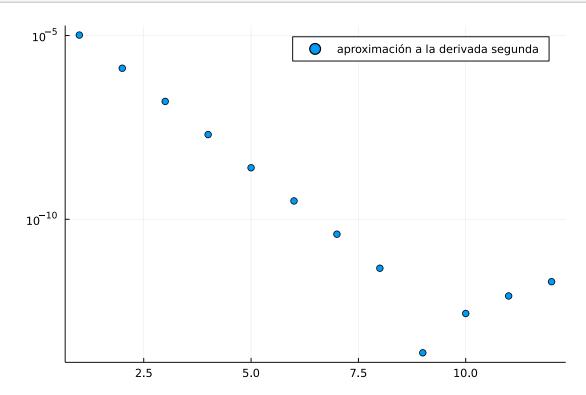


```
[12]: Error_{22}(dx) = sqrt(sum(dvv0(dx) + sin.(x)).^2)*dx
```

[12]: Error_22 (generic function with 1 method)

[16]: scatter(Error_22.(rdx), yscale= :log10, label="aproximación a la derivada∟ ⇒segunda")

[16]:



[]: