Diferenciación numérica

Alfredo Villagrán Olguín

Junio, 2020

Segunda derivada

Serie de Taylor

Para el estudio de los métodos numéricos, la serie de Taylor es una herramienta de gran importancia. Gracias a ella puede predecirse el valor de una función y sus derivadas en otro punto. Taylor establece que cualquier función suave puede aproximarse a través de un polinomio.

La serie de Taylor puede comprenderse de manera simple, construyéndola término por término. El primer término de ella, llamado la *aproximación de orden cero* implica que el siguiente valor de f en un punto nuevo es el mismo que su valor anterior. Esto es sumamente probale, si ambos valores de x están muy próximos entre sí. Lo cual serviría sólo con exactitud, si f fuera una constante. El primer término se representa de la siguiente manera:

$$f(x_{i+1}) \approx f(x_i)$$

El siguiente término de la serie, llamado la *aproximación de primer orden*, se obtiene sumando una pendiente $f'(x_i)$ multiplicada por la distancia entre x_{i+1} y x_i. De este modo, la aproximación representa una recta y es posible predecir un inceremento o decremento de f entre x_{i+1} y x_i. Esta nueva aproximación de la serie se expresa como

$$f(x_{i+1}) \approx f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i)$$

De manera similar, la aproximación va teniendo mayor precisión y exactitud, agregando más términos a la serie. Si la función tiene una curvatura, puede agregarse el siguiente término llamado la *aproximación de segundo orden*, como se muestra a continuación

$$f(x_{i+1}) \approx f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}(x_{i+1} - x_i)^2$$

De lo anterior, se comprende que la expansión completa de la serie, y el valor exacto del polinomio, se encontrará con una cantidad infinita de términos agregados. Esta expansión se expresa de la siguiente manera:

$$
\begin{aligned}
f(x) = & f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}(x_{i+1} - x_i)^2 \\
& + \frac{f'''(x_i)}{3!}(x_{i+1} - x_i)^3 \\
& + \frac{f^{(iv)}(x_i)}{4!}(x_{i+1} - x_i)^4 \\
& \vdots \\
& + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(x_{i+1} - x_i)^n + R_n
\end{aligned}
$$

Donde R_n es llamado el residuo de la serie de Taylor, y se expresa para representar los términos desde n+1 hasta el infinito.

En general y para comprender las diferenciaciones numéricas de segundo grado en adelante, es común expresar la serie de la siguiente forma, con un tamaño de paso $h = x_{i+1} - x_i$

$$
\boldsymbol{f(x_{i+1})} = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + \ldots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}h^n + R_n
$$

Si se desarrolla la serie de Taylor, para una función $y = f(x)$ con $x = x + h$, queda de la siguiente manera:

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{f(x+h)} = & f(x) + f'(x+h)h \\
& + \frac{f''(x+h)}{2!}h^2 \\
& + \frac{f'''(x)}{3!}h^3 \\
& \vdots \\
& + \frac{f^{(n)}(x+h)}{n!}h^n + R_n
\end{aligned} \tag{1}
$$

Si se desarrolla la serie de Taylor, para una función $y = f(x)$ con $x = x - h$, queda de la siguiente manera:

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{f(x-h)} = & f(x) - f'(x-h)h \\
& + \frac{f''(x-h)}{2!}h^2 \\
& - \frac{f'''(x)}{3!}h^3 \\
& \vdots \\
& + \frac{f^{(n)}(x-h)}{n!}h^n + R_n
\end{aligned} \tag{2}
$$

Por último, si se desarrolla la serie de Taylor, para una función $y = f(x)$ con $x_{i+2} = x + 2h$, llamada aproximación por segundas diferencias, queda de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{f(x_{i+2})} = & f(x_i) + f'(x_i)2h \\ & + \frac{f''(x_i)}{2!}(2h)^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}(2h)^3 \\ & \vdots \\ & + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(2h)^n + R_n \end{aligned} \tag{3}$$

Segunda derivada

A partir de las expansiones anteriores, si se utilizan los primeros tres términos, restando la segunda expansión a la primera, puede obtenerse la misma aproximación de la **primera derivada por diferenciación**:[1]

$$\boldsymbol{f'(x_i) \approx \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h}}$$

Del mismo modo, si se multiplica la expansión (1) por 2 y se resta con la expansión (3), llega a obtenerse

$$f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) = -f(x_i) + f''(x_i)h^2 + \dots$$

De la que se despeja $f''(x_i)$, para obtener ***la segunda diferenciación hacia adelante***

$$\boldsymbol{f''(x_i) \approx \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2}}$$

Con manipulaciones similares de las expansiones es posible calcular la versión ***hacia atrás***:

$$\boldsymbol{f''(x_i) \approx \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2}}$$

y ***central***:

$$\boldsymbol{f''(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2}}$$

Es importante comprender que de la misma manera en que la segunda derivada es la derivada de la primera derivada, del mismo modo la segunda diferenciación es la diferenciación de dos primeras diferenciaciones.

[1] Como se vio en el documento anterior.

Ejemplos numéricos

I. Para $f(x) = -0.1x^4 - 0.15x^3 - 0.5x^2 - 0.25x + 1.2$

Calcule $f''(x)$, y evalúe en $x = 0.5$

1. Por diferenciación hacia adelante, con:
   (a) $h = 0.1$
   (b) $h = 0.01$
   (c) $h = 0.001$
   (d) $h = 0.0001$
2. Por diferenciación hacia atrás, con:
   (a) $h = 0.1$
   (b) $h = 0.01$
   (c) $h = 0.001$
   (d) $h = 0.0001$
3. Por diferenciación central, con:
   (a) $h = 0.1$
   (b) $h = 0.01$
   (c) $h = 0.001$
   (d) $h = 0.0001$

Solución

Con fines ilustrativos, recuerde que para

$$f(x) = -0.1x^4 - 0.15x^3 - 0.5x^2 - 0.25x + 1.2$$

el calculo analítico de la primera derivada es:

$$f'(x) = -0.4x^3 - 0.45x^2 - x - 0.25$$

el calculo analítico de la segunda derivada es:

$$f''(x) = -1.2x^2 - 0.9x - 1$$

y

$$\boldsymbol{f''(0.5) = -1.75}$$

1. Por diferenciación hacia adelante, con:

(a) $h = 0.1, x_i = 0.5, x_{i+1} = 0.6, x_{i+2} = 0.7$

$$
\begin{aligned}
f''(x_i) &\approx \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.7) - 2f(0.6) + f(0.5)}{(0.1)^2} \\
&\approx \frac{(0.70454) - 2(0.82464) + (0.925)}{0.01} \\
&\approx \frac{(0.70454) - (1.6493) + (0.925)}{0.01} \\
\boldsymbol{f''(0.5)} &\approx \mathbf{-1.9740} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-1.75) - (-1.9740)}{(-1.75)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{12.8\%}
\end{aligned}
$$

(b) $h = 0.01, x_i = 0.5, x_{i+1} = 0.51, x_{i+2} = 0.52$

$$
\begin{aligned}
f''(x_i) &\approx \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.52) - 2f(0.51) + f(0.5)}{(0.01)^2} \\
&\approx \frac{(0.9064) - 2(0.91579) + (0.925)}{0.0001} \\
&\approx \frac{(0.9064) - (1.831) + (0.925)}{0.0001} \\
\boldsymbol{f''(0.5)} &\approx \mathbf{-1.7711} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-1.75) - (-1.7711)}{(-1.75)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{1.2080\%}
\end{aligned}
$$

(c) $h = 0.001, x_i = 0.5, x_{i+1} = 0.501, x_{i+2} = 0.502$

$$
\begin{aligned}
f''(x_i) &\approx \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.502) - 2f(0.501) + f(0.5)}{(0.001)^2} \\
&\approx \frac{(0.92317) - 2(0.92409) + (0.925)}{0.000001} \\
&\approx \frac{(0.92317) - (1.8482) + (0.925)}{0.000001} \\
\boldsymbol{f''(0.5)} &\approx \mathbf{-1.7521} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-1.75) - (-1.7521)}{(-1.75)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{0.12008\%}
\end{aligned}
$$

(d) $h = 0.0001, x_i = 0.5, x_{i+1} = 0.5001, x_{i+2} = 0.5002$

$$
\begin{aligned}
f''(x_i) &\approx \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5002) - 2f(0.5001) + f(0.5)}{(0.0001)^2} \\
&\approx \frac{(0.92482) - 2(0.92491) + (0.925)}{0.00000001} \\
&\approx \frac{(0.92482) - (1.8498) + (0.925)}{0.00000001} \\
\boldsymbol{f''(0.5)} &\approx \mathbf{-1.7502} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-1.75) - (-1.7502)}{(-1.75)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{0.012001\%}
\end{aligned}
$$

2. Por diferenciación hacia atrás, con:

(a) $h = 0.1, x_i = 0.5, x_{i-1} = 0.4, x_{i-2} = 0.3$

$$\begin{aligned}
f''(x_i) &\approx \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5) - 2f(0.4) + f(0.3)}{(0.1)^2} \\
&\approx \frac{0.925 - 2(1.0078) + (1.0751)}{0.01} \\
&\approx \frac{0.925 - (2.0157) + (1.0751)}{0.01} \\
\boldsymbol{f''(0.5)} &\approx \mathbf{-1.5540} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-1.75) - (-1.5540)}{(-1.75)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{11.2\%}
\end{aligned}$$

(b) $h = 0.01, x_i = 0.5, x_{i-1} = 0.49, x_{i-2} = 0.48$

$$\begin{aligned}
f''(x_i) &\approx \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5) - 2f(0.49) + f(0.48)}{(0.01)^2} \\
&\approx \frac{0.925 - 2(0.93404) + (0.9429)}{0.0001} \\
&\approx \frac{0.925 - (1.8681) + (0.9429)}{0.0001} \\
\boldsymbol{f''(0.5)} &\approx \mathbf{-1.7291} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-1.75) - (-1.7291)}{(-1.75)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{1.192\%}
\end{aligned}$$

(c) $h = 0.001, x_i = 0.5, x_{i-1} = 0.499, x_{i-2} = 0.498$

$$f''(x_i) \approx \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2}$$
$$f'(0.5) \approx \frac{f(0.5) - 2f(0.499) + f(0.498)}{(0.001)^2}$$
$$\approx \frac{0.925 - 2(0.92591) + (0.92682)}{0.000001}$$
$$\approx \frac{0.925 - (1.8518) + (0.92682)}{0.000001}$$
$$\boldsymbol{f''(0.5) \approx -1.7479}$$
$$\epsilon_t = \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\%$$
$$= \left| \frac{(-1.75) - (-1.7479)}{(-1.75)} \right| 100\%$$
$$\boldsymbol{\epsilon_t = 0.11992\%}$$

(d) $h = 0.0001, x_i = 0.5, x_{i-1} = 0.4999, x_{i-2} = 0.4998$

$$f''(x_i) \approx \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2}$$
$$f'(0.5) \approx \frac{f(0.5) - 2f(0.4999) + f(0.4998)}{(0.0001)^2}$$
$$\approx \frac{0.925 - 2(0.92509) + (0.92518)}{0.00000001}$$
$$\approx \frac{0.925 - (1.8502) + (0.92518)}{0.00000001}$$
$$\boldsymbol{f''(0.5) \approx -1.7498}$$
$$\epsilon_t = \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\%$$
$$= \left| \frac{(-1.75) - (-1.7498)}{(-1.75)} \right| 100\%$$
$$\boldsymbol{\epsilon_t = 0.011999\%}$$

3. Por diferenciación central, con:

(a) $h = 0.1, x_i = 0.5, x_{i+1} = 0.6, x_{i-1} = 0.4$

$$f''(x) \approx \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2}$$
$$f'(0.5) \approx \frac{f(0.6) - 2f(0.5) + f(0.4)}{(0.1)^2}$$
$$\approx \frac{(0.82464) - 2(0.925) + (1.0078)}{0.01}$$
$$\approx \frac{(0.82464) - (1.85) + (1.0078)}{0.01}$$
$$\boldsymbol{f'(0.5) \approx -1.752}$$
$$\epsilon_t = \left|\frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real}\right| 100\%$$
$$= \left|\frac{(-1.75) - (-1.752)}{(-1.75)}\right| 100\%$$
$$\boldsymbol{\epsilon_t = 0.11429\%}$$

(b) $h = 0.01, x_i = 0.5, x_{i+1} = 0.51, x_{i-1} = 0.49$

$$f''(x) \approx \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2}$$
$$f'(0.5) \approx \frac{f(0.51) - 2f(0.5) + f(0.49)}{(0.01)^2}$$
$$\approx \frac{(0.91579) - 2(0.925) + (0.93404)}{0.0001}$$
$$\approx \frac{(0.91579) - (1.85) + (0.93404)}{0.0001}$$
$$\boldsymbol{f'(0.5) \approx -1.75}$$
$$\epsilon_t = \left|\frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real}\right| 100\%$$
$$= \left|\frac{(-1.75) - (-1.75)}{(-1.75)}\right| 100\%$$
$$\boldsymbol{\epsilon_t = 0\%}$$

(c) $h = 0.001, x_i = 0.5, x_{i+1} = 0.501, x_{i-1} = 0.499$

$$
\begin{aligned}
f''(x) &\approx \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} \\
f'(0.5) &\approx \frac{0.501) - 2f(0.5) + f(0.499}{(0.001)^2} \\
&\approx \frac{(0.92409) - 2(0.925) + (0.92591)}{0.000001} \\
&\approx \frac{(0.92409) - (1.85) + (0.92591)}{0.000001} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \boldsymbol{-1.75} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-1.75) - (-1.75)}{(-1.75)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \boldsymbol{0\%}
\end{aligned}
$$

(d) $h = 0.0001, x_i = 0.5, x_{i+1} = 0.5001, x_{i-1} = 0.4999$

$$
\begin{aligned}
f''(x) &\approx \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5001) - 2f(0.5) + f(0.4999)}{(0.0001)^2} \\
&\approx \frac{(0.92491) - 2(0.925) + (0.92509)}{0.00000001} \\
&\approx \frac{(0.92491) - (1.85) + (0.92509)}{0.00000001} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \boldsymbol{-1.75} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-1.75) - (-1.75)}{(-1.75)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \boldsymbol{0\%}
\end{aligned}
$$

Como puede observarse en todos los cálculos, entre más pequeño es el valor de h menor es el error en el cálculo. Sin embargo, puede observarse que el método por **Diferenciación Central** es el que estima una aproximación con menor error, cuando se comparan los tres métodos entre sí con el mismo valor de h. Es por esto, que es el que más se utiliza en la práctica.