Ejercicios del tema y su valor:
1-coeficientes indeterminados (1p)
Entrega: un ejercicio obligatorio: el nº 1

Derivación numérica.

1. Como aproximar la derivada de orden k de una función, de la que se conoce su forma analítica, en un punto cualquiera x_0.

   - **diferencias hacia adelante**

     El desarrollo de Taylor de $f(x_0+h)$ en el entorno de x_0 puede escribirse en la forma

     $$f(x_o+h) = f(x_0) + hf^{(1)}(x_0) + \frac{h^2}{2!}f^{(2)}(x_0) + \frac{h^3}{3!}f^{(3)}(x_0) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x_0) + \cdots \tag{1}$$

     y despejando de la ecuación anterior $f^{(1)}(x_0)$ resulta

     $$f^{(1)}(x_0) = \frac{f(x_o+h)-f(x_0)}{h} - \frac{h}{2}f^{(2)}(x_0) - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(x_0) - \frac{h^3}{24}f^{(4)}(x_0) - \cdots \tag{2}$$

     Si en (2) despreciamos los términos en que aparece h elevado a potencias ≥ 2, resulta que la aproximación de la primera derivada puede llevarse a cabo por

     $$f^{(1)}(x_0) = \frac{f(x_o+h)-f(x_0)}{h} + E(h) \tag{3}$$

     donde *E(h)* es el *error de truncamiento* y viene dado por

     $$E(h) \approx -\frac{h}{2}f^{(2)}(x_0) \tag{4}$$

   - **diferencias hacia atrás**

     Procediendo de forma análoga para $f(x_0-h)$, resulta

     $$f(x_o-h) = f(x_0) - hf^{(1)}(x_0) + \frac{h^2}{2!}f^{(2)}(x_0) - \frac{h^3}{3!}f^{(3)}(x_0) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x_0) + \cdots \tag{5}$$

     por lo tanto

     $$f^{(1)}(x_0) = \frac{f(x_0)-f(x_o-h)}{h} + \frac{h}{2}f^{(2)}(x_0) - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(x_0) + \frac{h^3}{24}f^{(4)}(x_0) - \cdots \tag{6}$$

     despreciando en (6) los términos igual o superiores a h^2, nos queda

     $$f^{(1)}(x_0) = \frac{f(x_0)-f(x_o-h)}{h} + E(h) \tag{7}$$

     con el *error de truncamiento*

     $$E(h) \approx \frac{h}{2}f^{(2)}(x_0) \tag{8}$$

- **<u>diferencias centradas</u>**

Si a la ecuación (1) le restamos la ecuación (5), se obtiene

$$f(x_o+h)-f(x_o-h)=2hf^{(1)}(x_0)+\frac{2h^3}{3!}f^{(3)}(x_0)+\cdots \tag{9}$$

con lo que

$$f^{(1)}(x_0)=\frac{f(x_o+h)-f(x_o-h)}{2h}+E(h^2) \tag{10}$$

donde el *error de truncamiento* es

$$E(h)\approx\frac{h^2}{6}f^{(3)}(x_0) \tag{11}$$

Las expresiones (3), (7) y (10) proporcionan el valor de la primera derivada $f^{(1)}(x_0)$ calculando la función en dos puntos. Sin embargo a medida que h decrece, el error de truncamiento es menor en la fórmula centrada. Por ello, dentro de las fórmulas del mismo número puntos, la mayor precisión en los resultados corresponde al proporcionado por las fórmulas centradas.

Es posible deducir expresiones de $f^{(1)}(x_0)$ con un error de truncamiento menor que el obtenido en (11). Para ello, procedamos como sigue

$$f(x_o+2h)=f(x_0)+2hf^{(1)}(x_0)+\frac{4h^2}{2!}f^{(2)}(x_0)+\frac{8h^3}{3!}f^{(3)}(x_0)+\frac{16h^4}{4!}f^{(4)}(x_0)+\cdots \tag{12}$$

y

$$f(x_o-2h)=f(x_0)-2hf^{(1)}(x_0)+\frac{4h^2}{2!}f^{(2)}(x_0)-\frac{8h^3}{3!}f^{(3)}(x_0)+\frac{16h^4}{4!}f^{(4)}(x_0)+\cdots \tag{13}$$

de forma que al restar las dos ecuaciones anteriores, se llega a que

$$f(x_o+2h)-f(x_o-2h)=4hf^{(1)}(x_0)+\frac{16h^3}{3!}f^{(3)}(x_0)+\frac{64h^5}{5!}f^{(5)}(x_0)+\cdots \tag{14}$$

Ahora, si a la ecuación (9) la multiplicamos por 8 y al resultado obtenido le restamos la ecuación (14), nos queda

$$-f(x_o+2h)+8f(x_o+h)-8f(x_o-h)+f(x_o-2h)=12hf^{(1)}(x_0)-\frac{48h^5}{120}f^{(5)}(x_0)+\cdots \tag{15}$$

lo que finalmente nos conduce a

$$f^{(1)}(x_0)=\frac{-f(x_o+2h)+8f(x_o+h)-8f(x_o-h)+f(x_o-2h)}{12h}+E(h^4) \tag{16}$$

siendo el *error de truncamiento*

$$E(h^4)\approx\frac{h^4}{30}f^{(5)}(x_0) \tag{17}$$

Tanto la expresión (10) como la (16) proporcionan el valor de $f^{(1)}(x_0)$, si embargo el valor obtenido por esta última converge más rápidamente a la solución, como puede verse en la

h	ecuación (10)	ecuación (16)
1.0000000000	-2.88000000	-3.88000000
0.1000000000	-3.87000000	-3.88000000
0.0100000000	-3.87990000	-3.88000000
0.0010000000	-3.87999900	-3.88000000
0.0001000000	-3.87999999	-3.88000000
0.0000100000	-3.87999999	-3.88000000
0.0000010000	-3.87999999	-3.87999999
0.0000001000	-3.87999999	-3.87999999
0.0000000100	-3.88000001	-3.88000000
0.0000000010	-3.88000032	-3.88000054
0.0000000001	-3.87999854	-3.87999780

Tab. 1: Comparación de los resultados obtenidos de $f^{(1)}$ mediante las ecuaciones (10) y (16)

tabla 1.

El mismo procedimiento que se ha seguido al deducir fórmulas para calcular numéricamente las derivadas primeras puede usarse para construir derivadas de orden superior partiendo del desarrollo de Taylor y eliminando las derivadas primeras. Por ejemplo, para la segunda derivada podríamos obtener

con tres puntos

$$f^{(2)}(x_0) = \frac{f(x_o + h) - 2f(x_o) + f(x_o - h)}{h^2} \tag{18}$$

con cinco puntos

$$f^{(2)}(x_0) = \frac{-f(x_o + 2h) + 16f(x_o + h) - 30f(x_o) + 16f(x_o - h) - f(x_o - 2h)}{12h^2} \tag{19}$$

EJERCICIO 1:
Implementar un programa que realice la derivación numérica de la función $f(x) = x^3 - 3x^2 - x + 3$ en el punto $x_0 = 1.2$ mediante las ecuaciones (10) y (16) y compare los resultados de ambos métodos (ver tabla 1).

- **coeficientes indeterminados**

Supongamos que deseamos calcular la derivada $f^{(k)}(x)$ en el punto x_0 y para ello conocemos el valor que toma la función $f(x)$ en n puntos x_i obtenidos a partir de x_0 por la expresión $x_i = x_0 + b_i h$, donde b_i son números reales previamente elegidos.

El valor de la derivada de orden k , $k \leq n-1$, puede obtenerse a partir de los valores $f(x_i)$ por la expresión

$$f^{(k)}(x_0) = \frac{a_1 f(x_o + b_1 h) + a_2 f(x_o + b_2 h) + \cdots + a_n f(x_o + b_n h)}{h^k} \tag{20}$$

donde $a_1, a_2, \cdots, a_n$ son los *coeficientes indeterminados.*

Si tenemos en cuenta el desarrollo de Taylor, podemos escribir

$$f(x_o+b_ih)=f(x_0)+b_ihf^{(1)}(x_0)+\frac{b_i^2h^2}{2!}f^{(2)}(x_0)+\frac{b_i^3h^3}{3!}f^{(3)}(x_0)+\frac{b_i^4h^4}{4!}f^{(4)}(x_0)+\cdots \tag{21}$$

Teniendo en cuenta este último resultado, la ecuación (20) puede escribirse en la forma

$$\begin{aligned}
f^{(k)}(x_0) &= \frac{a_1}{h^k}\left[f(x_o)+b_1hf^{(1)}(x_0)+\frac{b_1^2h^2}{2!}f^{(2)}(x_0)+\cdots+\frac{b_1^{n-1}h^{n-1}}{(n-1)!}f^{(n-1)}(x_0)\right]\\
&+ \frac{a_2}{h^k}\left[f(x_o)+b_2hf^{(1)}(x_0)+\frac{b_2^2h^2}{2!}f^{(2)}(x_0)+\cdots+\frac{b_2^{n-1}h^{n-1}}{(n-1)!}f^{(n-1)}(x_0)\right]\\
&\vdots\\
&+ \frac{a_k}{h^k}\left[f(x_o)+b_khf^{(1)}(x_0)+\frac{b_k^2h^2}{2!}f^{(2)}(x_0)+\cdots+\frac{b_k^{n-1}h^{n-1}}{(n-1)!}f^{(n-1)}(x_0)\right]\\
&\vdots\\
&+ \frac{a_n}{h^k}\left[f(x_o)+b_nhf^{(1)}(x_0)+\frac{b_n^2h^2}{2!}f^{(2)}(x_0)+\cdots+\frac{b_n^{n-1}h^{n-1}}{(n-1)!}f^{(n-1)}(x_0)\right]
\end{aligned} \tag{22}$$

La ecuación (22) puede escribirse de una forma más adecuada

$$\begin{aligned}
f^{(k)}(x_0) &= f(x_o)\left[a_1+a_2+\cdots+a_n\right]\frac{1}{h^k}\\
&+ f^{(1)}(x_o)\left[a_1b_1+a_2b_2+\cdots+a_nb_n\right]\frac{1}{h^{k-1}}\\
&+ f^{(2)}(x_o)\left[a_1b_1^2+a_2b_2^2+\cdots+a_nb_n^2\right]\frac{1}{2!h^{k-2}}\\
&\vdots\\
&+ f^{(k)}(x_o)\left[a_1b_1^k+a_2b_2^k+\cdots+a_nb_n^k\right]\frac{1}{k!}\\
&\vdots\\
&+ f^{(n-1)}(x_o)\left[a_1b_1^{n-1}+a_2b_2^{n-1}+\cdots+a_nb_n^{n-1}\right]\frac{1}{(n-1)!h^{k+1-n}}
\end{aligned} \tag{23}$$

es decir

$$
\begin{aligned}
a_1 + a_2 + \cdots + a_k + \cdots + a_n &= 0 \\
a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_k b_k + \cdots + a_n b_n &= 0 \\
a_1 b_1^2 + a_2 b_2^2 + \cdots + a_k b_k^2 + \cdots + a_n b_n^2 &= 0 \\
&\vdots \\
a_1 b_1^k + a_2 b_2^k + \cdots + a_k b_k^k + \cdots + a_n b_n^k &= k! \\
&\vdots \\
a_1 b_1^{n-1} + a_2 b_2^{n-1} + \cdots + a_k b_k^{n-1} + \cdots + a_n b_n^{n-1} &= 0
\end{aligned}
\tag{24}
$$

sistema que puede escribirse en notación matricial

$$
\begin{pmatrix}
1 & 1 & \cdots & 1 & \cdots & 1 \\
b_1 & b_2 & \cdots & b_k & \cdots & b_n \\
b_1^2 & b_2^2 & \cdots & b_k^2 & \cdots & b_n^2 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\
b_1^k & b_2^k & \cdots & b_k^k & \cdots & b_n^k \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\
b_1^{n-1} & b_2^{n-1} & \cdots & b_k^{n-1} & \cdots & b_n^{n-1}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_k \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ k! \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}
\tag{25}
$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones anterior, se determinan las constantes indeterminadas $a_1, a_2, \cdots, a_n$ y llevados a la ecuación (20) nos proporciona el valor de la derivada buscada.

EJEMPLO 1: Apliquemos la ecuación (20) para obtener expresión correspondiente a la derivada primera. Si elegimos los números reales b_i de la forma siguiente $b_1 = -1,\ b_2 = 0,\ b_3 = 1$, podremos escribir (25) como

$$
\begin{pmatrix}
1 & 1 & 1 \\
-1 & 0 & 1 \\
1 & 0 & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}
\tag{26}
$$

Resolviendo, resulta:

$$
a_1 = -\frac{1}{2}, \quad a_2 = 0, \quad a_3 = \frac{1}{2}
$$

de forma que (20) adopta la forma

$$
f^{(1)}(x_o) = \frac{-f(x_0 - h) + f(x_o + h)}{2h}
$$

resultado idéntico al expresado por la ecuación (10) .

EJERCICIO 2:

Implementar un programa que realice la derivada numérica de orden k de una función dada, utilizando el método de los coeficientes indeterminados.
Aplicarlo para calcular las tres primeras derivadas a la función $f(x) = x^3 - 3x^2 - x + 3$ en el punto $x_0 = 1.2$

RESULTADO:

```
Derivada por coeficientes indeterminados

Evalúa la función en 5 puntos
x0+h[-2 -1  0  1  2]

La derivada de orden 1 en x0= 1.200000 es: -3.880000

La derivada de orden 2 en x0= 1.200000 es: 1.200000

La derivada de orden 3 en x0= 1.200000 es: 6.000000
```