# Computación científica LFIS-126

Profesor: Julio C. Marín

Departamento de Meteorología, Universidad de Valparaíso

Segundo Semestre

# Temas de la clase

- Derivadas
- Diferencias finitas adelantadas, atrasadas y centradas
- Errores en estimación de derivadas
- Derivadas de orden superior
- Segunda derivada

# Diferenciación numérica

- Lo opuesto de una integración numérica es una derivada numérica.
- En general vamos a usar menos las derivadas numéricas por ciertas razones:
  - Derivadas de funciones conocidas siempre pueden derivarse analíticamente. No hay tanta necesidad de usar métodos numéricos.
  - Sin embargo, hay situaciones como en la resolución de ecuaciones diferenciales parciales, donde son importantes.

# Diferenciación numérica

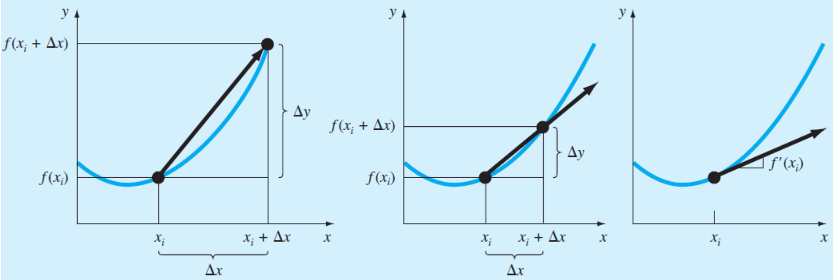
- Hay funciones difíciles o imposibles de diferenciar analíticamente
- Situaciones donde tenemos solo valores discretos de una variable.
  - Ejemplo: Mediciones de distancia o velocidad

Ambos casos es necesario utilizar métodos de diferenciación numérica para calcular derivadas.

Matemáticamente, derivada representa tasa de cambio de variable dependiente con respecto a variable independiente.

- Definición matemática derivada parte de aprox. en diferencias:

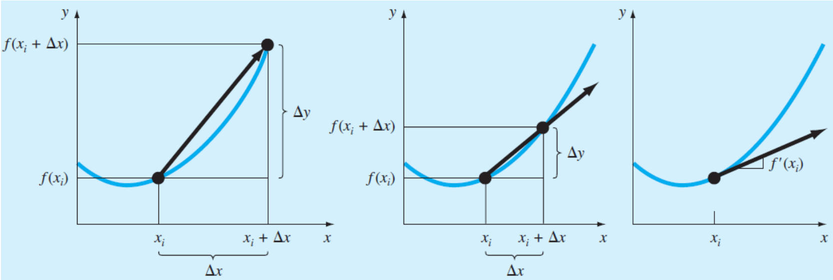
$$\frac{\triangle y}{\triangle x} = \frac{f(x_i + \triangle x) - f(x_i)}{\triangle x}$$



$$\frac{\triangle y}{\triangle x} = \frac{f(x_i + \triangle x) - f(x_i)}{\triangle x}$$

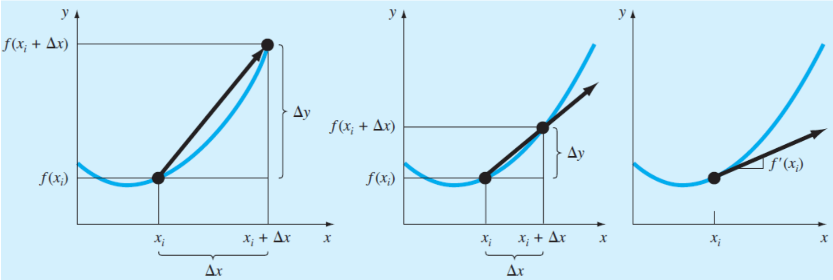
- $y$, $f(x)$: var. dependiente y $x$: var. independiente.
- A medida que $\triangle x \to 0 \Rightarrow$ la diferencia se vuelve derivada:

$$\frac{dy}{dx} = lim_{\triangle x \to 0} \frac{f(x_i + \triangle x) - f(x_i)}{\triangle x}$$



$$\frac{dy}{dx} = lim_{\triangle x \to 0} \frac{f(x_i + \triangle x) - f(x_i)}{\triangle x}$$

- Derivada representa pendiente de tangente a curva en pto $x_i$.
- 2da derivada nos dice cuán rápido cambia la pendiente.
- 2da derivada también se conoce como "curvatura".
- Valor grande de 2da derivada significa gran curvatura.



- Derivadas parciales se usan en funciones que dependen de + de 1 variable.
- Significa calcular derivada de función en pto manteniendo todas las demás variables ctes.
- Derivada de $f = f(x, y)$ con respecto a $x$ en pto $(x, y)$:
$$\frac{\partial f}{\partial x} = lim_{\triangle x \to 0} \frac{f(x + \triangle x, y) - f(x, y)}{\triangle x}$$
- Derivada de $f = f(x, y)$ con respecto a $y$ en pto $(x, y)$:
$$\frac{\partial f}{\partial y} = lim_{\triangle y \to 0} \frac{f(x, y + \triangle y) - f(x, y)}{\triangle y}$$

### Teorema de Taylor

Cualquier función suave y continua puede aproximarse por un polinomio.

### Teorema de Taylor

Cualquier función suave y continua puede aproximarse por un polinomio.

### Serie de Taylor

Valor de función en pto $x_{i+1}$ puede determinarse por valor y derivadas de función en otro pto $x_i$.

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

donde $h = (x_{i+1} - x_i)$

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

donde $h = (x_{i+1} - x_i)$

- Serie de Taylor es infinita $\Rightarrow R_n$: Términos de $n+1$ a $\infty$

$$R_n = \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}h^{n+1}$$

$\xi$: cualquier valor entre $x_i$ y $x_{i+1}$

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

donde $h = (x_{i+1} - x_i)$

- Si truncamos la serie después del término de 1era derivada:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + R_1$$

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

donde $h = (x_{i+1} - x_i)$

- Si truncamos la serie después del término de 1era derivada:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + R_1$$

- Despejando para calcular 1era derivada:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} - \frac{R_1}{(x_{i+1} - x_i)}$$

Primer término de la derecha es aproximadamente de 1er orden y 2do término es error de truncamiento

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} - \frac{R_1}{(x_{i+1} - x_i)}$$

$$\frac{R_1}{(x_{i+1} - x_i)} = \frac{f''(\xi)}{2!}(x_{i+1} - x_i) = O(x_{i+1} - x_i)$$

$\xi$: cualquier valor entre $x_i$ y $x_{i+1}$

$$f'(x_i) \cong \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} + O(x_{i+1} - x_i)$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} - \frac{R_1}{(x_{i+1} - x_i)}$$

$$\frac{R_1}{(x_{i+1} - x_i)} = \frac{f''(\xi)}{2!}(x_{i+1} - x_i) = O(x_{i+1} - x_i)$$

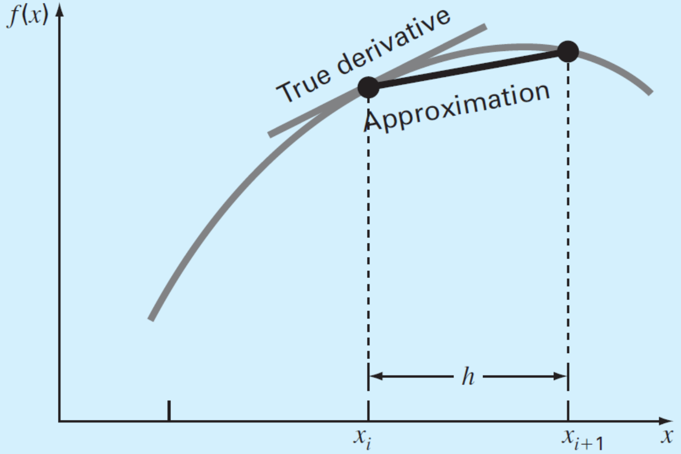
$\xi$: cualquier valor entre $x_i$ y $x_{i+1}$

$$f'(x_i) \cong \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} + O(x_{i+1} - x_i)$$

**Método diferencias finitas adelantado**

Error de truncamiento del orden de $(x_{i+1} - x_i)$.
Error de estimación $\propto$ distancia entre ptos $x_i$ y $x_{i+1}$.

Término diferencias finitas "adelantado" aparece al usar datos en $x_i$ y $x_{i+1}$ para calcular derivada



- Si se estima valor de función en $x_{i-1}$ utilizando $x_i$ se obtiene:

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

- Si se estima valor de función en $x_{i-1}$ utilizando $x_i$ se obtiene:

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

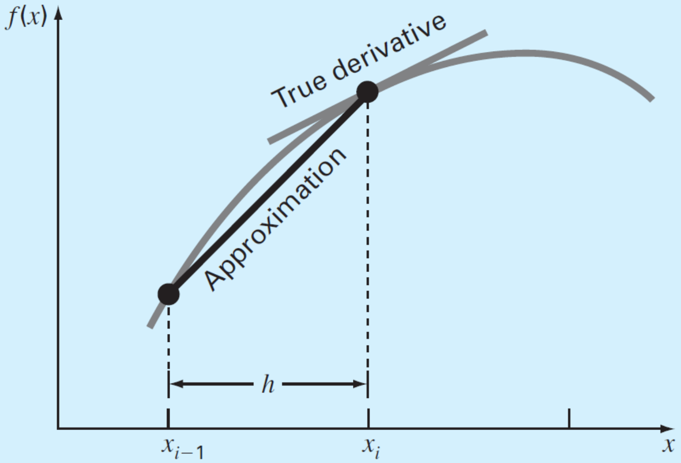
- Despejando $f'(x_i)$ se obtiene nueva relación:

$$f'(x_i) \cong \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})} + O(x_i - x_{i-1})$$

**Método diferencias finitas atrasado**

Error de truncamiento del orden de $(x_i - x_{i-1})$.
Error de estimación $\propto$ distancia entre ptos $x_{i-1}$ y $x_i$.

Término diferencias finitas "atrasado" aparece al usar datos en $x_{i-1}$ y $x_i$ para calcular derivada



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

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

Si realizamos operación ec. (1) - ec. (2):

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

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

Si realizamos operación ec. (1) - ec. (2):

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

Despejando $f'(x_i)$:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2(x_{i+1} - x_i)} - 2f^{(3)}(x_i)\frac{h^2}{6!} + \ldots$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2(x_{i+1} - x_i)} - 2f^{(3)}(x_i)\frac{h^2}{6!} + \dots$$

- Método diferencia finita centrada para estimar 1era derivada

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

- Error de truncamiento del orden de $h^2$ a diferencia del método diferencias adelantado y atrasado.
- Diferencia centrada es método más exacto que diferencias finitas adelantada y atrasada

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2(x_{i+1} - x_i)} - 2f^{(3)}(x_i)\frac{h^2}{6!} + \ldots$$

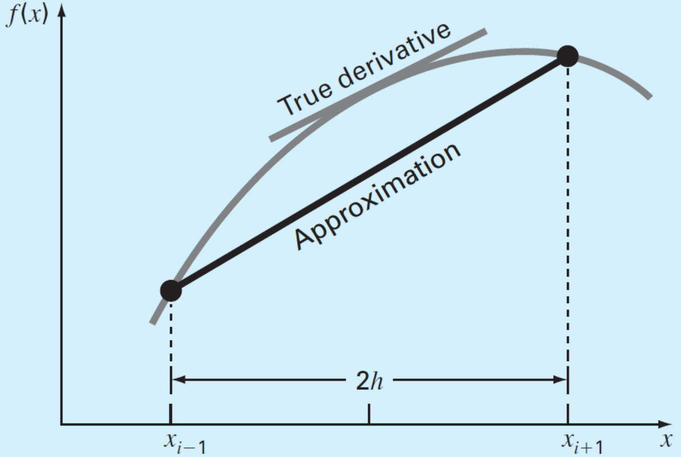
- Método diferencia finita centrada para estimar 1era derivada

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

- Error de truncamiento del orden de $h^2$ a diferencia del método diferencias adelantado y atrasado.
- Diferencia centrada es método más exacto que diferencias finitas adelantada y atrasada

Si $h$ disminuye la mitad, error de truncamiento en diferencias finitas atrasada y adelantada disminuye la mitad y diferencias finitas centradas disminuye en cuatro.

Término diferencias finitas “centrada” aparece al usar datos en $x_{i-1}$ y $x_{i+1}$ para calcular derivada



Problema: Use aprox. diferencias finitas atrasadas, adelantadas y centradas para estimar 1era derivada de función:

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

en $x = 0.5$ usando intervalo $h$ =0.25. Valor real $f'(0.5) = -0.9125$

$x_{i-1}$ =0.25, $x_i$ =0.5, $x_{i+1}$ =0.75

Problema: Use aprox. diferencias finitas atrasadas, adelantadas y centradas para estimar 1era derivada de función:

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

en $x = 0.5$ usando intervalo $h$ =0.25. Valor real $f'(0.5) = -0.9125$

$x_{i-1}$ =0.25, $x_i$ =0.5, $x_{i+1}$ =0.75

$f(x_{i-1})$ =1.103515, $f(x_i)$ =0.925, $f(x_{i+1})$ =0.63632813

- Diferencias finitas adelantadas

$$f'(0.5) \cong \frac{0.63632813\text{-}0.925}{0.25} = -1.155 \qquad E_r = 26.5\%$$

Problema: Use aprox. diferencias finitas atrasadas, adelantadas y centradas para estimar 1era derivada de función:

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

en $x = 0.5$ usando intervalo $h$ =0.25. Valor real $f'(0.5) = -0.9125$

- Diferencias finitas atrasadas

$$f'(0.5) \cong \frac{0.925 \text{ - } 1.103515}{0.25} = -0.714 \qquad E_r = 21.7\%$$

- Diferencias finitas centradas

$$f'(0.5) \cong \frac{0.63632813 \text{ - } 1.103515}{2{*}0.25} = -0.934 \qquad E_r = 2.4\%$$

Expansión serie Taylor puede usarse para estimar derivadas de orden superior.

Relación llamada "2da diferencia finita adelantada":

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

Relación llamada "2da diferencia finita atrasada":

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

Aproximación en diferencias finitas centrada

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

- Usando expansiones en serie de Taylor se obtuvieron aproximaciones en diferencias finitas de derivadas.
- Estimaciones que se obtuvieron (diferencias atrasadas, adelantadas y centradas) tienen error de $O(h)$ y $O(h^2)$.

Nivel de exactitud en aproximación se debe a No. de términos en serie de Taylor que se retienen en fórmulas de diferencias finitas.

Fórmulas diferencias finitas de mayor exactitud pueden generarse incluyendo más términos en expansión en serie de Taylor.

- Expansión en serie de Taylor adelantada es:

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

- Se excluyen términos de orden 2 y superiores y se obtiene:

$$f'(x_i) \cong \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + O(h)$$

- Expansión en serie de Taylor adelantada es:

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

- Se excluyen términos de orden 2 y superiores y se obtiene:

$$f'(x_i) \cong \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + O(h)$$

- Si se retiene término 2da derivada y se sustituye por fórmula diferencias finitas adelantada:

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

Reemplazando en ecuación se obtiene:

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

- Agrupando términos queda:

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h} + O(h^2)$$

- Inclusión término 2da derivada mejoró exactitud de método a $O(h^2)$
- Fórmulas similares pueden obtenerse para aprox. diferencias finitas atrasada y centrada.

| First Derivative | Error |
|---|---|
| $f'(x_i) = \dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}$ | $O(h)$ |
| $f'(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h}$ | $O(h^2)$ |
| **Second Derivative** | |
| $f''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2}$ | $O(h)$ |
| $f''(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+3}) + 4f(x_{i+2}) - 5f(x_{i+1}) + 2f(x_i)}{h^2}$ | $O(h^2)$ |
| **Third Derivative** | |
| $f'''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+3}) - 3f(x_{i+2}) + 3f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h^3}$ | $O(h)$ |
| $f'''(x_i) = \dfrac{-3f(x_{i+4}) + 14f(x_{i+3}) - 24f(x_{i+2}) + 18f(x_{i+1}) - 5f(x_i)}{2h^3}$ | $O(h^2)$ |
| **Fourth Derivative** | |
| $f''''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+4}) - 4f(x_{i+3}) + 6f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^4}$ | $O(h)$ |
| $f''''(x_i) = \dfrac{-2f(x_{i+5}) + 11f(x_{i+4}) - 24f(x_{i+3}) + 26f(x_{i+2}) - 14f(x_{i+1}) + 3f(x_i)}{h^4}$ | $O(h^2)$ |

| First Derivative | Error |
|---|---|
| $f'(x_i) = \dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h}$ | $O(h^2)$ |
| $f'(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{12h}$ | $O(h^4)$ |
| **Second Derivative** | |
| $f''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2}$ | $O(h^2)$ |
| $f''(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+2}) + 16f(x_{i+1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{12h^2}$ | $O(h^4)$ |
| **Third Derivative** | |
| $f'''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + 2f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{2h^3}$ | $O(h^2)$ |
| $f'''(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+3}) + 8f(x_{i+2}) - 13f(x_{i+1}) + 13f(x_{i-1}) - 8f(x_{i-2}) + f(x_{i-3})}{8h^3}$ | $O(h^4)$ |
| **Fourth Derivative** | |
| $f''''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + 6f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^4}$ | $O(h^2)$ |
| $f''''(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+3}) + 12f(x_{i+2}) - 39f(x_{i+1}) + 56f(x_i) - 39f(x_{i-1}) + 12f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{6h^4}$ | $O(h^4)$ |