Tema 4

Métodos Numéricos Aplicados I

Diferenciación numérica

Índice

Esquema

DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA

TAYLOR

Datos o f conocidos

- Aproximaciones de las derivadas
- Orden del error

RICHARDSON

f conocida

- Error con todos los términos del orden
- Error con los términos pares

Ideas clave

4.1 Introducción y objetivos

La diferenciación numérica consiste en la estimación de las funciones derivadas sin el conocimiento de la misma. Ante esta situación, podemos tener un conjunto de datos o disponer de una función f cuyas sucesivas derivadas no conozcamos.

Cuando trabajamos con un conjunto de datos podremos obtener su variación o sus derivadas a partir del desarrollo en serie de Taylor. En el caso en que conozcamos la función f, podremos utilizar tanto el desarrollo en serie de Taylor como la técnica de la extrapolación de Richardson.

Los objetivos que trataremos de alcanzar en este tema serán los siguientes:

- Estimar las funciones derivadas a partir del polinomio de Taylor
- Conocer la extrapolación de Richardson

4.2 Diferenciación de alta precisión

El desarrollo en serie de Taylor de una función nos permite expresar dicha función alrededor de un punto en forma de serie polinómica. Recordemos su expresión.

Teorema 1: Teorema de Taylor

Sea la función f y sus primeras $n+1$ derivadas continuas en un intervalo que contiene a y x. Entonces, el valor de la función f en x viene dada por

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2}(x-a)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + R_n, \quad (1)$$

donde a R_n se le denomina residuo, y viene dado por

$$R_n = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-a)^{n+1}, \quad \xi \in (a, x). \quad (2)$$

Aproximaciones de la primera derivada

Cuando trabajamos con diferencias finitas, y asumiendo nodos equiespaciados, podemos aproximar la primera derivada por la diferencia finita

- progresiva

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + \mathcal{O}(h), \quad (3)$$

- regresiva

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + \mathcal{O}(h), \quad (4)$$

- central

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + \mathcal{O}(h^2). \quad (5)$$

Vemos en las tres expresiones que el error es de orden h. ¿Podríamos obtener alguna expresión con un error de menor orden?

Partimos del desarrollo en serie de Taylor (1) de f en x_{i+1} y en x_{i+2} alrededor de x_i como

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2}f''(x_i) + R_2, \quad (6)$$

$$f(x_{i+2}) = f(x_i) + 2hf'(x_i) + 2h^2 f''(x_i) + R_2, \quad (7)$$

respectivamente. Obtenemos (7)-2(6),

$$f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) = -f(x_i) + h^2 f''(x_i) + \mathcal{O}(h^3) \leftrightarrow$$
$$\leftrightarrow f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} + \mathcal{O}(h). \tag{8}$$

Reemplazamos (8) en (6)

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} + \mathcal{O}(h^3) \leftrightarrow$$
$$\leftrightarrow f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h} + \mathcal{O}(h^2). \tag{9}$$

La aproximación de la derivada en (9) consigue reducir el orden; sin embargo, requiere del conocimiento de la función en tres puntos.

Se puede observar que la expresión (9) es una diferencia progresiva, puesto que se obtiene la derivada en el punto x_i tomando ese punto y los siguientes. Toda expresión en diferencias progresivas tiene su equivalente en regresivas. Desarrollando un procedimiento similar, se obtiene

$$f'(x_i) = \frac{(3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{2h} \tag{10}$$

La diferencia central, siguiendo esta técnica, da lugar a la expresión

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{12h} + \mathcal{O}(h^4). \tag{11}$$

Ejemplo 1. Sea la función $f(x) = x^2 e^{-x}$. Obtén el valor de $f'(0.5)$ a partir de los nodos $x = \{0, 0.25, 0.5, 0.75, 1\}$ y el valor de f en dichos nodos utilizando la aproximación de las derivadas.

En primer lugar, generamos los nodos y evaluamos la función f en dichos nodos.

```
>> h=.25;
>> x=0:h:1;
>> f=x.^2.*exp(-x);
```

A continuación vamos a aplicar las aproximaciones de la derivada. Comencemos por las diferencias progresivas (3) y (9).

```
>> dph=[1/h*(f(2:end)-f(1:end-1))];
>> dph2=[1/2/h*(-f(3:end)+4*f(2:end-1)-3*f(1:end-2))];
```

Los resultados son

x_i	0	0.25	0.5	0.75	1
$f'(x_i)$ (3)	0.1947	0.4118	0.4563	0.4087	-
$f'(x_i)$ (9)	0.0861	0.3896	0.4801	-	-

Continuamos con las diferencias regresivas (4) y (10).

```
>> drh=[1/h*(f(2:end)-f(1:end-1))];
>> drh2=[1/2/h*(3*f(3:end)-4*f(2:end-1)+f(1:end-2))];
```

Los resultados son

x_i	0	0.25	0.5	0.75	1
$f'(x_i)$ (4)	-	0.1947	0.4118	0.4563	0.4087
$f'(x_i)$ (10)	-	-	0.5204	0.4785	0.3849

Finalicemos con las diferencias centrales, recogidas en (5) y (11).

```
>> dch2=1/2/h*(f(3:end)-f(1:end-2))
>> dch4=1/12/h*(-f(5:end)+8*f(4:end-1)-...
8*f(2:end-3)+f(1:end-4));
```

Los resultados son

x_i	0	0.25	0.5	0.75	1
$f'(x_i)$ (5)	-	0.3033	0.4341	0.4325	-
$f'(x_i)$ (11)	-	-	0.4561	-	-

Sabiendo que el valor analítico de $f'(0.5)$ es 0.4549, en la siguiente tabla recogemos los valores de $f'(0.5)$ y el error cometido con cada una de las aproximaciones.

Aproximación	(3)	(9)	(4)	(10)	(5)	(11)
$f'(x_i)$	0.4563	0.4801	0.4118	0.5204	0.4341	0.4561
ϵ	0.0014	0.0252	0.0431	0.0655	0.0208	0.0012

Aproximaciones de derivadas de orden superior

La Tabla 1 lista una serie de aproximaciones de la segunda derivada. Se utiliza la notación $f_i = f(x_i)$.

Derivada	Tipo	Expresión	Error
$f''(x_i)$	P	$\frac{1}{h^2}(f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i)$	$\mathcal{O}(h)$
		$\frac{1}{h^2}(-f_{i+3} + 4f_{i+2} - 5f_{i+1} + 2f_i)$	$\mathcal{O}(h^2)$
	R	$\frac{1}{h^2}(f_i - 2f_{i-1} + f_{i-2})$	$\mathcal{O}(h)$
		$\frac{1}{h^2}(2f_i - 5f_{i-1} + 4f_{i-2} - f_{i-3})$	$\mathcal{O}(h^2)$
	C	$\frac{1}{h^2}(f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})$	$\mathcal{O}(h^2)$
		$\frac{1}{12h^2}(-f_{i+2} + 16f_{i+1} - 30f_i + 16f_{i-1} - f_{i-2})$	$\mathcal{O}(h^4)$

Tabla 1: Aproximaciones de las segundas derivadas: (P) progresiva, (R) regresiva, (C) central

La Tabla 2 recoge las aproximaciones de la tercera derivada. Se utiliza la notación $f_i = f(x_i)$.

Derivada	Tipo	Expresión	Error
$f'''(x_i)$	P	$\frac{1}{h^3}(f_{i+3} - 3f_{i+2} + 3f_{i+1} - f_i)$	$\mathcal{O}(h)$
		$\frac{1}{2h^3}(-3f_{i+4} + 14f_{i+3} - 24f_{i+2} + 18f_{i+1} - 5f_i)$	$\mathcal{O}(h^2)$
	R	$\frac{1}{h^3}(f_i - 3f_{i-1} + 3f_{i-2} - f_{i-3})$	$\mathcal{O}(h)$
		$\frac{1}{2h^3}(5f_i - 18f_{i-1} + 24f_{i-2} - 14f_{i-3} - 3f_{i-4})$	$\mathcal{O}(h^2)$
	C	$\frac{1}{2h^3}(f_{i+2} - 2f_{i+1} + 2f_{i-1} - f_{i-2})$	$\mathcal{O}(h^2)$
		$\frac{1}{8h^3}(-f_{i+3} + 8f_{i+2} - 13f_{i+1} + 13f_{i-1} - 8f_{i-2} + f_{i-3})$	$\mathcal{O}(h^4)$

Tabla 2: Aproximaciones de las terceras derivadas: (P) progresiva, (R) regresiva, (C) central

Accede al vídeo: Desarrollo de la segunda derivada por diferencias finitas progresivas de $\mathcal{O}(h^2)$

4.3 Extrapolación de Richardson

Para mejorar la precisión de la aproximación de la derivada podemos reducir el tamaño del paso h o utilizar más términos del desarrollo en serie de Taylor. Hay más posibilidades, como vamos a mostrar en este apartado.

La extrapolación de Richardson se utiliza cuando se dispone de una expresión del error del tipo

$$\sum_{i=1}^{p-1} k_i h^{q_i} + \mathcal{O}(h^{q_p}),$$

donde k_i son constantes y $q_1 < q_2 < \cdots < q_p$.

Supongamos que $M \approx N_1(h)$, es decir, que el valor de M se puede aproximar por $N_1(h)$ cometiendo un error de truncamiento tal que

$$M = N_1(h) + k_1 h + k_2 h^2 + k_3 h^3 + \cdots \ , \tag{12}$$

siendo el error $\mathcal{O}(h)$.

Veremos dos situaciones diferentes: aquellas en las que están todas las potencias de h, ajustándose a la expresión (12), y una situación particular en la que solo hay potencias pares, por lo que (12) pasa a ser

$$M = N_1(h) + k_2 h^2 + k_4 h^4 + k_6 h^6 + \cdots \ , \tag{13}$$

siendo el error $\mathcal{O}(h^2)$.

Error con todos los términos

Tomemos (12) y dividamos el paso por 2, de modo que

$$M = N_1\left(\frac{h}{2}\right) + k_1\frac{h}{2} + k_2\frac{h^2}{4} + k_3\frac{h^3}{8} + \cdots \tag{14}$$

Operando 2(14)$-$(12),

$$M = N_1\left(\frac{h}{2}\right) + \left[N_1\left(\frac{h}{2}\right) - N_1(h)\right] - k_2\frac{h^2}{2} - k_3\frac{3h^3}{4} + \cdots, \tag{15}$$

hemos eliminado el término de $\mathcal{O}(h)$. Si nombramos

$$N_2(h) = N_1\left(\frac{h}{2}\right) + \left[N_1\left(\frac{h}{2}\right) - N_1(h)\right],$$

entonces (15) es

$$M = N_2(h) - k_2\frac{h^2}{2} - k_3\frac{3h^3}{4} + \cdots, \tag{16}$$

lo que supone una expresión de $\mathcal{O}(h^2)$.

Este procedimiento se puede continuar cuantas veces se desee. Demos un paso más. Tomemos (16) y dividamos el paso por 2, de modo que

$$M = N_2\left(\frac{h}{2}\right) - k_2\frac{h^2}{8} - k_3\frac{3h^3}{32} + \cdots. \tag{17}$$

Operando $\frac{4(17)-(16)}{3}$,

$$M = N_2\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{3}\left[N_2\left(\frac{h}{2}\right) - N_2(h)\right] + k_3\frac{h^3}{8} + \cdots, \tag{18}$$

hemos eliminado el término $\mathcal{O}(h^2)$. Nombrando

$$N_3(h) = N_2\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{3}\left[N_2\left(\frac{h}{2}\right) - N_2(h)\right],$$

entonces (18) queda como

$$M = N_3(h) + k_3 \frac{h^3}{8} + \cdots, \tag{19}$$

que es una expresión de $\mathcal{O}(h^3)$

Ejemplo 2. Desarrolla la aproximación de diferencias progresivas de $\mathcal{O}(h)$ hasta obtener una expresión de $\mathcal{O}(h^3)$.

La expresión de las diferencias progresivas, con la notación de la extrapolación de Richardson, es

$$N_1(h) = \frac{f(x_i+h) - f(x_i)}{h},$$

de modo que

$$\begin{aligned} N_2(h) &= N_1\left(\tfrac{h}{2}\right) + \left[N_1\left(\tfrac{h}{2}\right) - N_1(h)\right] = \\ &= \tfrac{1}{h}\left(-f(x_i+h) + 4f\left(x_i + \tfrac{h}{2}\right) - 3f(x_i)\right), \end{aligned}$$

con lo que obtenemos una expresión de $\mathcal{O}(h^2)$. Demos un paso más.

$$\begin{aligned} N_3(h) &= N_2\left(\tfrac{h}{2}\right) + \tfrac{1}{3}\left[N_2\left(\tfrac{h}{2}\right) - N_2(h)\right] = \\ &= \tfrac{1}{3h}\left(f(x_i+h) - 12f\left(x_i + \tfrac{h}{2}\right) + 32f\left(x_i + \tfrac{h}{4}\right) - 21f(x_i)\right), \end{aligned}$$

obteniendo una expresión de $\mathcal{O}(h^3)$. De este modo, podremos aproximar la derivada por

$$f'(x_i) = \frac{1}{3h}\left(f(x_i+h) - 12f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) + 32f\left(x_i + \frac{h}{4}\right) - 21f(x_i)\right).$$

Ejemplo 3. Obtén el valor de $f'(1.8)$ siendo $f(x) = \ln(x)$ con $h = 0.1$ utilizando diferencias progresivas de $\mathcal{O}(h)$. Utiliza la extrapolación de Richardson para mejorar la aproximación hasta $\mathcal{O}(h^2)$.

Sabemos que $f'(1.8) = \frac{1}{1.8} = 0.5556$. Utilizando diferencias divididas progresivas de $\mathcal{O}(h)$, su valor es

$$\begin{aligned} f'(1.8)|_{h=0.1} &= \frac{f(1.9) - f(1.8)}{0.1} = 0.5407, \\ f'(1.8)|_{h=0.05} &= \frac{f(1.85) - f(1.8)}{0.05} = 0.5480, \end{aligned}$$

de modo que

$$N_1(h) = 0.5407, N_1\left(\frac{h}{2}\right) = 0.5480.$$

Obtengamos $N_2(h)$ como

$$N_2(h) = N_1\left(\frac{h}{2}\right) + \left[N_1\left(\frac{h}{2}\right) - N_1(h)\right] = 0.5480 + 0.0073 = 0.5553.$$

Error con los términos de potencias pares

Si tomamos $\frac{4(13)-(12)}{3}$, entonces

$$M = \frac{1}{3}\left[4N_1\left(\frac{h}{2}\right) - N_1(h)\right] - k_4\frac{h^4}{4} - k_6\frac{5h^6}{16} + \cdots, \tag{20}$$

dando lugar a una expresión de $\mathcal{O}(h^4)$. Nombrando

$$N_2(h) = N_1\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{3}\left[N_1\left(\frac{h}{2}\right) - N_1(h)\right],$$

(20) queda como

$$M = N_2(h) - k_4\frac{h^4}{4} - k_6\frac{5h^6}{16} + \cdots, \tag{21}$$

Dividamos el paso por 2, obteniendo

$$M = N_2\left(\frac{h}{2}\right) - k_4\frac{h^4}{64} - k_6\frac{5h^6}{1024} + \cdots. \tag{22}$$

Operando $\frac{16(22)-(21)}{15}$,

$$M = \frac{1}{15}\left[16N_2\left(\frac{h}{2}\right) - N_2(h)\right] + k_6\frac{h^6}{64} + \cdots, \tag{23}$$

dando lugar a una expresión de $\mathcal{O}(h^6)$, de modo que nombramos

$$N_3(h) = N_2\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{15}\left[N_2\left(\frac{h}{2}\right) - N_2(h)\right].$$

Ejemplo 4. Desarrolla la aproximación de diferencias progresivas de $\mathcal{O}(h^2)$ hasta obtener una expresión de $\mathcal{O}(h^6)$.

La expresión de las diferencias progresivas, con la notación de la extrapolación de Richardson, es

$$N_1(h) = \frac{-f(x_i+2h)+4f(x_i+h)-3f(x_i)}{2h},$$

de modo que

$$\begin{aligned} N_2(h) &= N_1\left(\tfrac{h}{2}\right) + \tfrac{1}{3}\left[N_1\left(\tfrac{h}{2}\right) - N_1(h)\right] = \\ &= \tfrac{1}{6h}\left[f(x_i+2h) - 12f(x_i+h) + 32f(x_i+\tfrac{h}{2}) - 21f(x_i)\right] \end{aligned}$$

con lo que obtenemos una expresión de $\mathcal{O}(h^4)$. Demos un paso más.

$$\begin{aligned} N_3(h) &= N_2\left(\tfrac{h}{2}\right) + \tfrac{1}{15}\left[N_2\left(\tfrac{h}{2}\right) - N_2(h)\right] = \\ &= \tfrac{1}{90h}\left[-f(x_i+2h) + 44f(x_i+h) - 416f(x_i+\tfrac{h}{2}) + \right. \\ &\quad \left. + 1024f(x_i+\tfrac{h}{4}) - 651f(x_i)\right], \end{aligned}$$

obteniendo una expresión de $\mathcal{O}(h^6)$. Por tanto, podemos aproximar la derivada por

$$\begin{aligned} f'(x_i) &= \tfrac{1}{90h}\left[-f(x_i+2h) + 44f(x_i+h) - 416f(x_i+\tfrac{h}{2}) + \right. \\ &\quad \left. + 1024f(x_i+\tfrac{h}{4}) - 651f(x_i)\right]. \end{aligned}$$

Accede al vídeo: Aproximación de la derivada por extrapolación de Richardson de diferencias centrales de $\mathcal{O}(h^2)$ a $\mathcal{O}(h^4)$

Ejemplo 5. Obtén el valor de $f'(1.8)$ siendo $f(x) = \ln(x)$ con $h = 0.1$ utilizando diferencias progresivas de $\mathcal{O}(h^2)$. Utiliza la extrapolación de Richardson para mejorar la aproximación hasta $\mathcal{O}(h^6)$.

Con los resultados del Ejemplo 4, sabemos que

$$\begin{aligned} f'(x_i) &= \tfrac{1}{90h}\left[-f(x_i+2h)+44f(x_i+h)-416f(x_i+\tfrac{h}{2})+\right.\\ &\left.+\,1024f(x_i+\tfrac{h}{4})-651f(x_i)\right]. \end{aligned}$$

Aplicando esta expresión sobre los datos del problema, obtenemos

$$\begin{aligned} f'(1.8) &= \tfrac{1}{90\cdot 0.1}\left[-f(2)+44f(1.9)-416f(1.85)+\right.\\ &\left.+\,1024f(1.825)-651f(1.8)\right] = 0.55555398. \end{aligned}$$