

Computación Numérica

Tema 5 (I). Derivación numérica.

Irene Parada

irene.parada@upc.edu

Departamento de Matemáticas

Universitat Politècnica de Catalunya · BarcelonaTech

6 de mayo de 2024

Repaso

Breve recordatorio del Tema 4

- ▶ **Raíces** simples y múltiples. Estrategia de resolución numérica. Localización y separación.
- ▶ Aproximación: **intervalos encajados**. Métodos de la bisección y Regula Falsi.
- ▶ Aproximación: **métodos iterativos**. Métodos de Newton-Raphson, de la secante y del punto fijo.
- ▶ **Convergencia** y estimación del **error** de los métodos de aproximación.
- ▶ **Aceleración de la convergencia**: preceso de Aitken y método de Steffensen.

Derivación

Definición

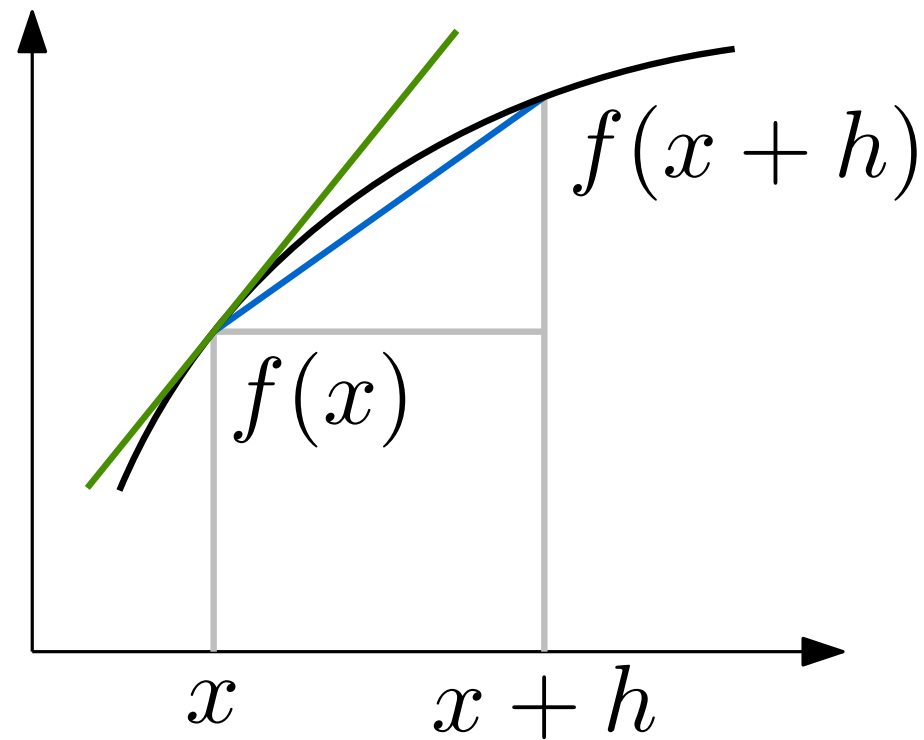
La **derivada** de la función f en el punto x se define como:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Definición

La **derivada** de la función f en el punto x se define como:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

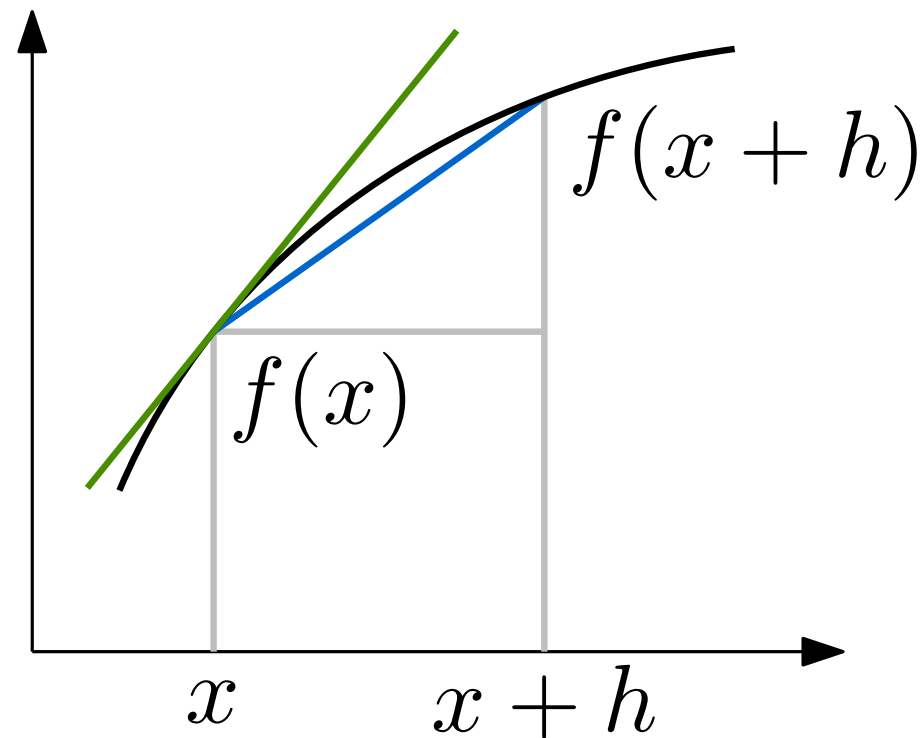


$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Definición

La **derivada** de la función f en el punto x se define como:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$



$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Fórmula forward
o progresiva
o hacia delante.

Fórmula forward: ejemplo

Ejemplo. Supongamos que queremos aproximar la derivada de $\sin(x)$ en $x = 1$.

Fórmula forward: ejemplo

Ejemplo. Supongamos que queremos aproximar la derivada de $\sin(x)$ en $x = 1$.
En este caso sabemos qué debería dar: $\cos(1) = 0.540302305868140$.

Fórmula forward: ejemplo

Ejemplo. Supongamos que queremos aproximar la derivada de $\sin(x)$ en $x = 1$.
En este caso sabemos qué debería dar: $\cos(1) = 0.540302305868140$.

n	$h = 1/2^n$	$f'(1)$ Aprox.	Error abs.
1	0.5	0.312048003592316	0.2283
2	0.25	0.430054538190759	0.1102
3	0.125	0.486372874329589	0.05393
4	0.0625	0.513663205746793	0.02664
5	0.03125	0.527067456146781	0.01323
6	0.015625	0.533706462857715	0.006596
7	0.0078125	0.537009830329723	0.003292
8	0.00390625	0.538657435881987	0.001645
9	0.001953125	0.539480213605884	0.0008221
10	0.0009765625	0.539891345517731	0.0004110

Fórmula forward: ejemplo

Ejemplo. Supongamos que queremos aproximar la derivada de $\sin(x)$ en $x = 1$.
En este caso sabemos qué debería dar: $\cos(1) = 0.540302305868140$.

n	$h = 1/2^n$	$f'(1)$ Aprox.	Error abs.
1	0.5	0.312048003592316	0.2283
2	0.25	0.430054538190759	0.1102
3	0.125	0.486372874329589	0.05393
4	0.0625	0.513663205746793	0.02664
5	0.03125	0.527067456146781	0.01323
6	0.015625	0.533706462857715	0.006596
7	0.0078125	0.537009830329723	0.003292
8	0.00390625	0.538657435881987	0.001645
9	0.001953125	0.539480213605884	0.0008221
10	0.0009765625	0.539891345517731	0.0004110

El error se va reduciendo a \approx la mitad en cada paso, no pinta del todo mal... pero necesitamos más decimales correctos.

i	$h = \frac{1}{2^i}$	$f'(1)$ Aprox.	Error abs.
1	0.5	0.312048003592316	0.228254302275824
2	0.25	0.430054538190759	0.110247767677381
3	0.125	0.486372874329589	0.0539294315385503
4	0.0625	0.513663205746795	0.0266391001213448
5	0.03125	0.527067456146781	0.0132348497213584
...			
10	0.0009765625	0.539891345517731	0.000410960350408995
...			
20	9.5367431640625e-07	0.540301904664375	4.01203764877067e-07
...			
25	2.98023223876953e-08	0.540302291512489	1.43556504461628e-08
26	1.49011611938477e-08	0.54030229896307	6.905069849239e-09
27	7.45058059692383e-09	0.540302306413651	5.4551074768483e-10
28	3.72529029846191e-09	0.540302306413651	5.4551074768483e-10
29	1.86264514923096e-09	0.540302276611328	2.92568116400105e-08
30	9.31322574615479e-10	0.540302276611328	2.92568116400105e-08
...			
40	9.09494701772928e-13	0.540283203125	1.9102743139765e-05
...			
50	8.88178419700125e-16	0.5	0.0403023058681398
51	4.44089209850063e-16	0.5	0.0403023058681398
52	2.22044604925031e-16	0.5	0.0403023058681398
53	1.11022302462516e-16	0	0.54030230586814

cos(1) =
0.540302305868140.

i	$h = \frac{1}{2^i}$	$f'(1)$ Aprox.	Error abs.
1	0.5	0.312048003592316	0.228254302275824
2	0.25	0.430054538190759	0.110247767677381
3	0.125	0.486372874329589	0.0539294315385503
4	0.0625	0.513663205746795	0.0266391001213448
5	0.03125	0.527067456146781	0.0132348497213584
...			
10	0.0009765625	0.539891345517731	0.000410960350408995
...			
20	9.5367431640625e-07	0.540301904664375	4.01203764877067e-07
...			
25	2.98023223876953e-08	0.540302291512489	1.43556504461628e-08
26	1.49011611938477e-08	0.54030229896307	6.905069849239e-09
27	7.45058059692383e-09	0.540302306413651	5.4551074768483e-10
28	3.72529029846191e-09	0.540302306413651	5.4551074768483e-10
29	1.86264514923096e-09	0.540302276611328	2.92568116400105e-08
30	9.31322574615479e-10	0.540302276611328	2.92568116400105e-08
...			
40	9.09494701772928e-13	0.540283203125	1.9102743139765e-05
...			
50	8.88178419700125e-16	0.5	0.0403023058681398
51	4.44089209850063e-16	0.5	0.0403023058681398
52	2.22044604925031e-16	0.5	0.0403023058681398
53	1.11022302462516e-16	0	0.54030230586814

cos(1) =
0.540302305868140.

i	$h = \frac{1}{2^i}$	$f'(1)$ Aprox.	Error abs.
1	0.5	0.312048003592316	0.228254302275824
2	0.25	0.430054538190759	0.110247767677381
3	0.125	0.486372874329589	0.0539294315385503
4	0.0625	0.513663205746795	0.0266391001213448
5	0.03125	0.527067456146781	0.0132348497213584

10	0.0009765625	0.539891345517731	0.000410960350408995

20	9.5367431640625e-07	0.540301904664375	4.01203764877067e-07

25	2.98023223876953e-08	0.540302291512489	1.43556504461628e-08
26	1.49011611938477e-08	0.54030229896307	6.905069849239e-09
27	7.45058059692383e-09	0.540302306413651	5.4551074768483e-10
28	3.72529029846191e-09	0.540302306413651	5.4551074768483e-10
29	1.86264514923096e-09	0.540302276611328	2.92568116400105e-08
30	9.31322574615479e-10	0.540302276611328	2.92568116400105e-08

40	9.09494701772928e-13	0.540283203125	1.9102743139765e-05

50	8.88178419700125e-16	0.5	0.0403023058681398
51	4.44089209850063e-16	0.5	0.0403023058681398
52	2.22044604925031e-16	0.5	0.0403023058681398
53	1.11022302462516e-16	0	0.54030230586814

$\cos(1) =$
0.540302305868140.

i	$h = \frac{1}{2^i}$	$f'(1)$ Aprox.	Error abs.
1	0.5	0.312048003592316	0.228254302275824
2	0.25	0.430054538190759	0.110247767677381
3	0.125	0.486372874329589	0.0539294315385503
4	0.0625	0.513663205746795	0.0266391001213448
5	0.03125	0.527067456146781	0.0132348497213584
...			
10	0.0009765625	0.539891345517731	0.000410960350408995
...			
20	9.5367431640625e-07	0.540301904664375	4.01203764877067e-07
...			
25	2.98023223876953e-08	0.540302291512489	1.43556504461628e-08
26	1.49011611938477e-08	0.54030229896307	6.905069849239e-09
27	7.45058059692383e-09	0.540302306413651	5.4551074768483e-10
28	3.72529029846191e-09	0.540302306413651	5.4551074768483e-10
29	1.86264514923096e-09	0.540302276611328	2.92568116400105e-08
30	9.31322574615479e-10	0.540302276611328	2.92568116400105e-08
...			
40	9.09494701772928e-13	0.540283203125	1.9102743139765e-05
...			
50	8.88178419700125e-16	0.5	0.0403023058681398
51	4.44089209850063e-16	0.5	0.0403023058681398
52	2.22044604925031e-16	0.5	0.0403023058681398
53	1.11022302462516e-16	0	0.54030230586814

cos(1) =
0.540302305868140.



i	$h = \frac{1}{2^i}$	$f'(1)$ Aprox.	Error abs.
1	0.5	0.312048003592316	0.228254302275824
2	0.25	0.430054538190759	0.110247767677381
3	0.125	0.486372874329589	0.0539294315385503
4	0.0625	0.513663205746795	0.0266391001213448
5	0.03125	0.527067456146781	0.0132348497213584

10	0.0009765625	0.539891345517731	0.000410960350408995

20	9.5367431640625e-07	0.540301904664375	4.01203764877067e-07

25	2.98023223876953e-08	0.540302291512489	1.43556504461628e-08
26	1.49011611938477e-08	0.54030229896307	6.905069849239e-09
27	7.45058059692383e-09	0.540302306413651	5.4551074768483e-10
28	3.72529029846191e-09	0.540302306413651	5.4551074768483e-10
29	1.86264514923096e-09	0.540302276611328	2.92568116400105e-08
30	9.31322574615479e-10	0.540302276611328	2.92568116400105e-08

40	9.09494701772928e-13	0.540283203125	1.9102743139765e-05

50	8.88178419700125e-16	0.5	0.0403023058681398
51	4.44089209850063e-16	0.5	0.0403023058681398
52	2.22044604925031e-16	0.5	0.0403023058681398
53	1.11022302462516e-16	0	0.54030230586814

$\cos(1) =$
0.540302305868140.



¿Qué está
pasando?

Error en la fórmula forward

La herramienta que tenemos para estimar errores de truncamiento es el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x + h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(\xi)h^2$$

con $x \leq \xi \leq x + h$.

Error en la fórmula forward

La herramienta que tenemos para estimar errores de truncamiento es el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x + h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(\xi)h^2$$

con $x \leq \xi \leq x + h$.

Obtenemos:

$$f'(x) = \frac{f(x + h) - f(x)}{h} - \frac{1}{2}f''(\xi)h$$

Error en la fórmula forward

La herramienta que tenemos para estimar errores de truncamiento es el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x + h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(\xi)h^2$$

con $x \leq \xi \leq x + h$.

Obtenemos:

$$f'(x) = \frac{f(x + h) - f(x)}{h} - \frac{1}{2}f''(\xi)h$$

Fórmula forward

Error

Error en la fórmula forward

La herramienta que tenemos para estimar errores de truncamiento es el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(\xi)h^2$$

con $x \leq \xi \leq x+h$.

Obtenemos:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{1}{2}f''(\xi)h$$

↑
Fórmula forward

↑
Error

► h pequeño: f'' casi constante.


Error en la fórmula forward

La herramienta que tenemos para estimar errores de truncamiento es el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x + h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(\xi)h^2$$

con $x \leq \xi \leq x + h$.

Obtenemos:

$$f'(x) = \frac{f(x + h) - f(x)}{h} - \frac{1}{2}f''(\xi)h$$


Fórmula forward

Error

- ▶ h pequeño: f'' casi constante.
- ▶ Menos error: h pequeño.

Fórmula forward: ejemplo

Ejemplo. Supongamos que queremos aproximar la derivada de $\sin(x)$ en $x = 1$.
En este caso sabemos qué debería dar: $\cos(1) = 0.540302305868140$.

n	$h = 1/2^n$	$f'(1)$ Aprox.	Error abs.	$1/2 \sin(1) \cdot h$
1	0.5	0.312048003592316	0.2283	0.2104
2	0.25	0.430054538190759	0.1102	0.1052
3	0.125	0.486372874329589	0.05393	0.05259
4	0.0625	0.513663205746793	0.02664	0.02630
5	0.03125	0.527067456146781	0.01323	0.01315
6	0.015625	0.533706462857715	0.006596	0.006574
7	0.0078125	0.537009830329723	0.003292	0.003287
8	0.00390625	0.538657435881987	0.001645	0.001643
9	0.001953125	0.539480213605884	0.0008221	0.0008217
10	0.0009765625	0.539891345517731	0.0004110	0.0004109

Fórmula forward: ejemplo

Ejemplo. Supongamos que queremos aproximar la derivada de $\sin(x)$ en $x = 1$.
En este caso sabemos qué debería dar: $\cos(1) = 0.540302305868140$.

n	$h = 1/2^n$	$f'(1)$ Aprox.	Error abs.	$1/2 \sin(1) \cdot h$
1	0.5	0.312048003592316	0.2283	0.2104
2	0.25	0.430054538190759	0.1102	0.1052
3	0.125	0.486372874329589	0.05393	0.05259
4	0.0625	0.513663205746793	0.02664	0.02630
5	0.03125	0.527067456146781	0.01323	0.01315
6	0.015625	0.533706462857715	0.006596	0.006574
7	0.0078125	0.537009830329723	0.003292	0.003287
8	0.00390625	0.538657435881987	0.001645	0.001643
9	0.001953125	0.539480213605884	0.0008221	0.0008217
10	0.0009765625	0.539891345517731	0.0004110	0.0004109

$\frac{1}{2} f''(\xi)h \approx \frac{1}{2} f''(1)h = \frac{1}{2} \sin(1)h$ parece encajar con el error... por ahora

Fórmula forward: ejemplo

i	$h = \frac{1}{2^i}$	$f'(1)$ Aprox.	Error abs.	$1/2 \sin(1) \cdot h$
1	0.5	0.312048003592316	0.228254302275824	0.210367746201974
2	0.25	0.430054538190759	0.110247767677381	0.105183873100987
3	0.125	0.486372874329589	0.0539294315385503	0.052591936550494
4	0.0625	0.513663205746795	0.0266391001213448	0.026295968275247
5	0.03125	0.527067456146781	0.0132348497213584	0.013147984137623

10	0.0009765625	0.539891345517731	0.000410960350408995	4.108745043007307e-04

20	9.5367431640625e-07	0.540301904664375	4.01203764877067e-07	4.012446331061823e-07

25	2.98023223876953e-08	0.540302291512489	1.43556504461628e-08	1.253889478456820e-08
26	1.49011611938477e-08	0.54030229896307	6.905069849239e-09	6.269447392284099e-09
27	7.45058059692383e-09	0.540302306413651	5.4551074768483e-10	3.134723696142050e-09
28	3.72529029846191e-09	0.540302306413651	5.4551074768483e-10	1.567361848071025e-09
29	1.86264514923096e-09	0.540302276611328	2.92568116400105e-08	7.836809240355124e-10
30	9.31322574615479e-10	0.540302276611328	2.92568116400105e-08	3.918404620177562e-10

40	9.09494701772928e-13	0.540283203125	1.9102743139765e-05	3.826567011892150e-13

50	8.88178419700125e-16	0.5	0.0403023058681398	3.736881847550928e-16
51	4.44089209850063e-16	0.5	0.0403023058681398	1.868440923775464e-16
52	2.22044604925031e-16	0.5	0.0403023058681398	9.342204618877320e-17
53	1.11022302462516e-16	0	0.54030230586814	4.671102309438660e-17

¿Qué está pasando?

Mirando otra vez a la fórmula vemos que **si h es pequeño** los dos términos que se restan en el numerador son muy parecidos.

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

¿Qué está pasando?

Mirando otra vez a la fórmula vemos que **si h es pequeño** los dos términos que se restan en el numerador son muy parecidos.

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

¡Cancelación catastrófica!

¿Qué está pasando?

Mirando otra vez a la fórmula vemos que **si h es pequeño** los dos términos que se restan en el numerador son muy parecidos.

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

¡Cancelación catastrófica!

Supongamos que queremos 10 cifras significativas:

¿Qué está pasando?

Mirando otra vez a la fórmula vemos que **si h es pequeño** los dos términos que se restan en el numerador son muy parecidos.

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

¡Cancelación catastrófica!

Supongamos que queremos 10 cifras significativas:

► Si $h = 0.01$ necesitamos 12 cifras significativas en $\sin(1.01)$ y $\sin(1)$:

$$\frac{\sin(1.01) - \sin(1)}{0.01}$$

$$\begin{array}{r} 0.846831844618 \\ -0.841470984808 \\ \hline 0.005360859810 \end{array}$$

¿Qué está pasando?

Mirando otra vez a la fórmula vemos que **si h es pequeño** los dos términos que se restan en el numerador son muy parecidos.

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

¡Cancelación catastrófica!

Supongamos que queremos 10 cifras significativas:

► Si $h = 0.01$ necesitamos 12 cifras significativas en $\sin(1.01)$ y $\sin(1)$:

$$\frac{\sin(1.01) - \sin(1)}{0.01}$$

$$\begin{array}{r} 0.846831844618 \\ -0.841470984808 \\ \hline 0.005360859810 \end{array}$$

► Si $h = 10^{-12}$ necesitamos 22 cifras significativas en $\sin(1.01)$ y $\sin(1)$.

¿Qué está pasando?

Mirando otra vez a la fórmula vemos que **si h es pequeño** los dos términos que se restan en el numerador son muy parecidos.

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

¡Cancelación catastrófica!

Supongamos que queremos 10 cifras significativas:

► Si $h = 0.01$ necesitamos 12 cifras significativas en $\sin(1.01)$ y $\sin(1)$:

$$\frac{\sin(1.01) - \sin(1)}{0.01}$$

$$\begin{array}{r} 0.846831844618 \\ -0.841470984808 \\ \hline 0.005360859810 \end{array}$$

► Si $h = 10^{-12}$ necesitamos 22 cifras significativas en $\sin(1.01)$ y $\sin(1)$.



¿Qué está pasando?

Error de redondeo al trabajar con números en coma flotante en doble precisión IEEE 754.

¿Qué está pasando?

Error de redondeo al trabajar con números en coma flotante en doble precisión IEEE 754.

- ▶ El número entero más pequeño que **no** se puede representar exactamente es $2^{\text{bits mantissa}+1} + 1 = 2^{53} + 1 \approx 9.007199254740992 \cdot 10^{15}$.

¿Qué está pasando?

Error de redondeo al trabajar con números en coma flotante en doble precisión IEEE 754.

- ▶ El número entero más pequeño que **no** se puede representar exactamente es $2^{\text{bits mantissa}+1} + 1 = 2^{53} + 1 \approx 9.007199254740992 \cdot 10^{15}$.
- ▶ No podemos esperar más de 16 cifras decimales significativas.

¿Qué está pasando?

Error de redondeo al trabajar con números en coma flotante en doble precisión IEEE 754.

- ▶ El número entero más pequeño que **no** se puede representar exactamente es $2^{\text{bits mantissa}+1} + 1 = 2^{53} + 1 \approx 9.007199254740992 \cdot 10^{15}$.
- ▶ **No podemos esperar más de 16 cifras decimales significativas.**
- ▶ No podemos evitar la cancelación catastrófica por este método, necesitamos métodos mejores.

Derivación numérica

La **derivación numérica** evalúa la derivada de una función en un punto a partir de valores numéricos de esta función, sin necesidad por tanto de conocer la expresión analítica de esta derivada.

Derivación numérica

La **derivación numérica** evalúa la derivada de una función en un punto a partir de valores numéricos de esta función, sin necesidad por tanto de conocer la expresión analítica de esta derivada.

Es muy sensible a pequeñas perturbaciones en los datos o la precisión de estos.

Derivación numérica

La **derivación numérica** evalúa la derivada de una función en un punto a partir de valores numéricos de esta función, sin necesidad por tanto de conocer la expresión analítica de esta derivada.

Es muy sensible a pequeñas perturbaciones en los datos o la precisión de estos.

Las dos estrategias más usuales son:

Derivación numérica

La **derivación numérica** evalúa la derivada de una función en un punto a partir de valores numéricos de esta función, sin necesidad por tanto de conocer la expresión analítica de esta derivada.

Es muy sensible a pequeñas perturbaciones en los datos o la precisión de estos.

Las dos estrategias más usuales son:

- ▶ **Fórmulas de derivación interpolatoria**: Derivar el polinomio de interpolación construido mediante alguno de los métodos estudiados.

Derivación numérica

La **derivación numérica** evalúa la derivada de una función en un punto a partir de valores numéricos de esta función, sin necesidad por tanto de conocer la expresión analítica de esta derivada.

Es muy sensible a pequeñas perturbaciones en los datos o la precisión de estos.

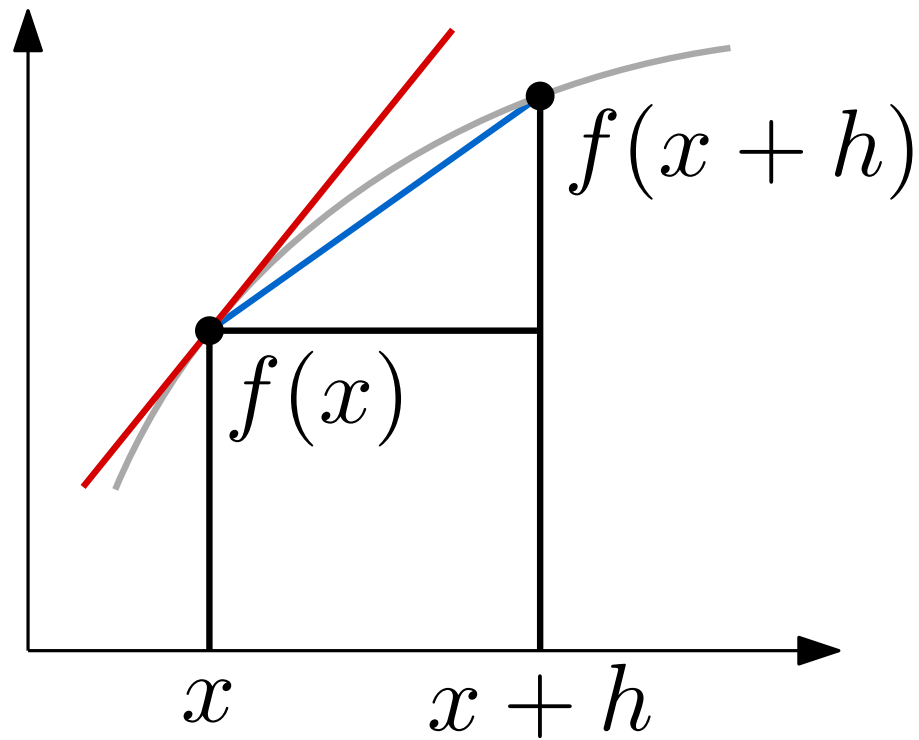
Las dos estrategias más usuales son:

- ▶ **Fórmulas de derivación interpolatoria**: Derivar el polinomio de interpolación construido mediante alguno de los métodos estudiados.
- ▶ **Fórmulas de diferencias finitas**: calcular la derivada utilizando aproximaciones de la función mediante los polinomios de Taylor.

Primeras fórmulas

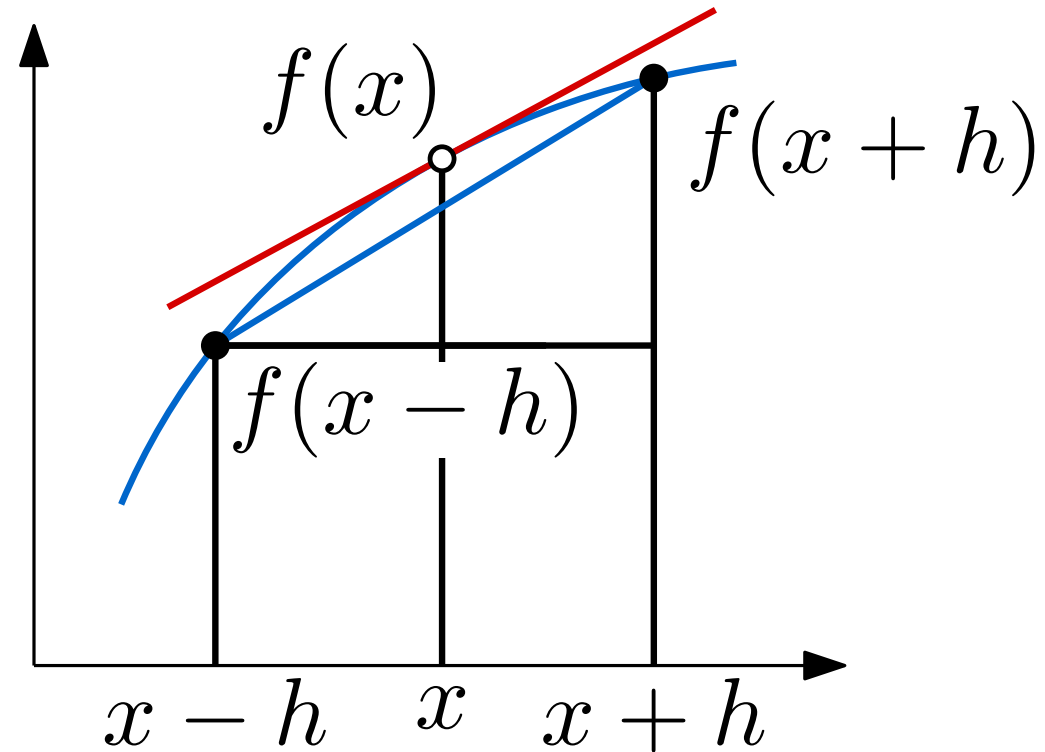
Aproximación geométrica

Idea: Obtenemos el polinomio interpolador P y lo derivamos en x , $P'(x)$.



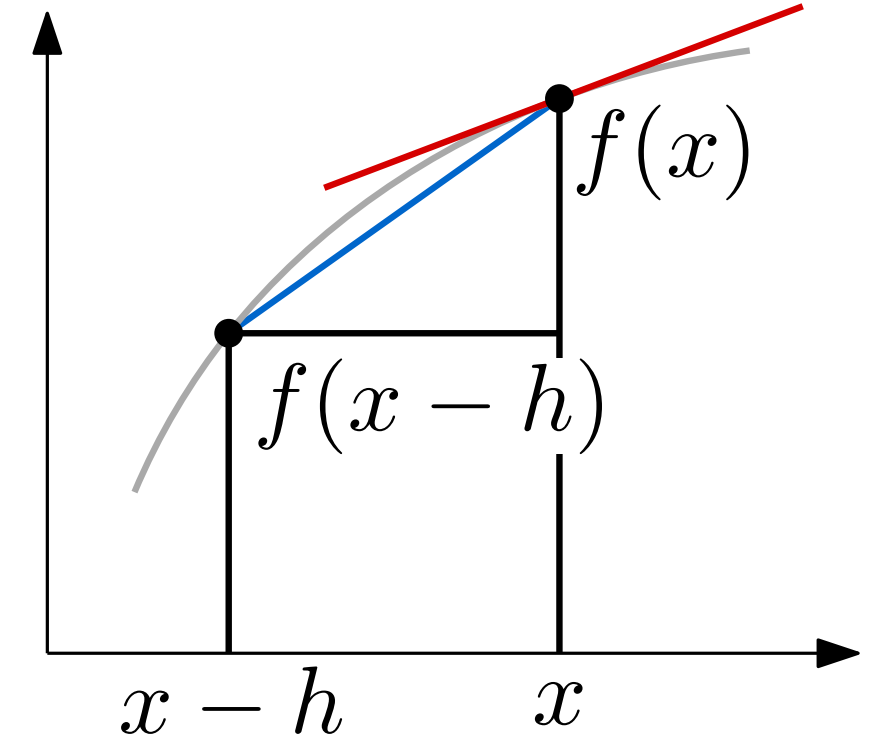
$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

forward



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

centrada

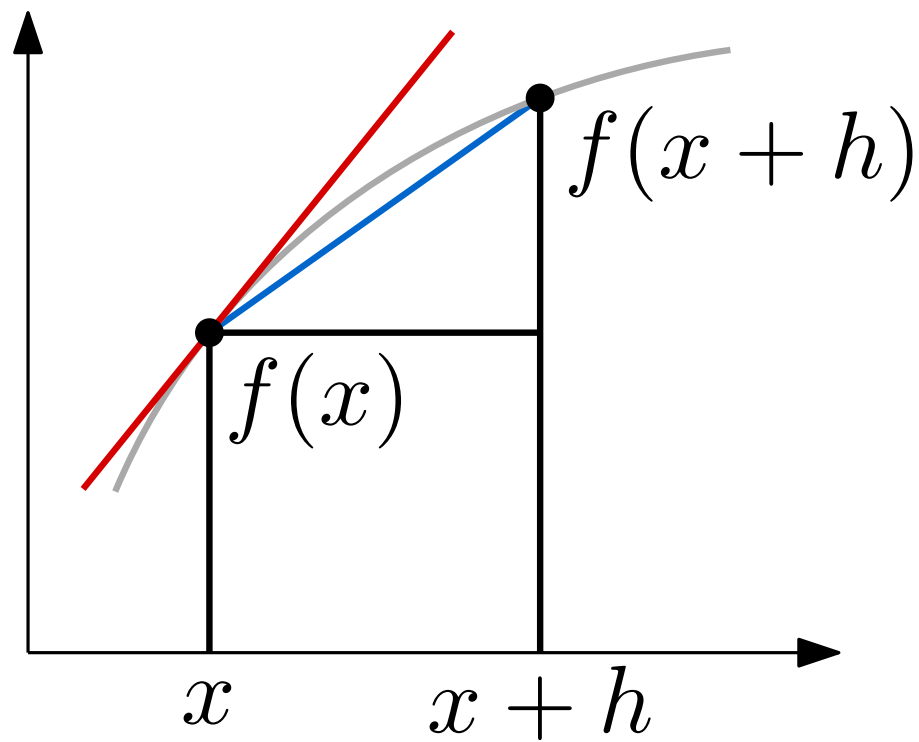


$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}$$

backward

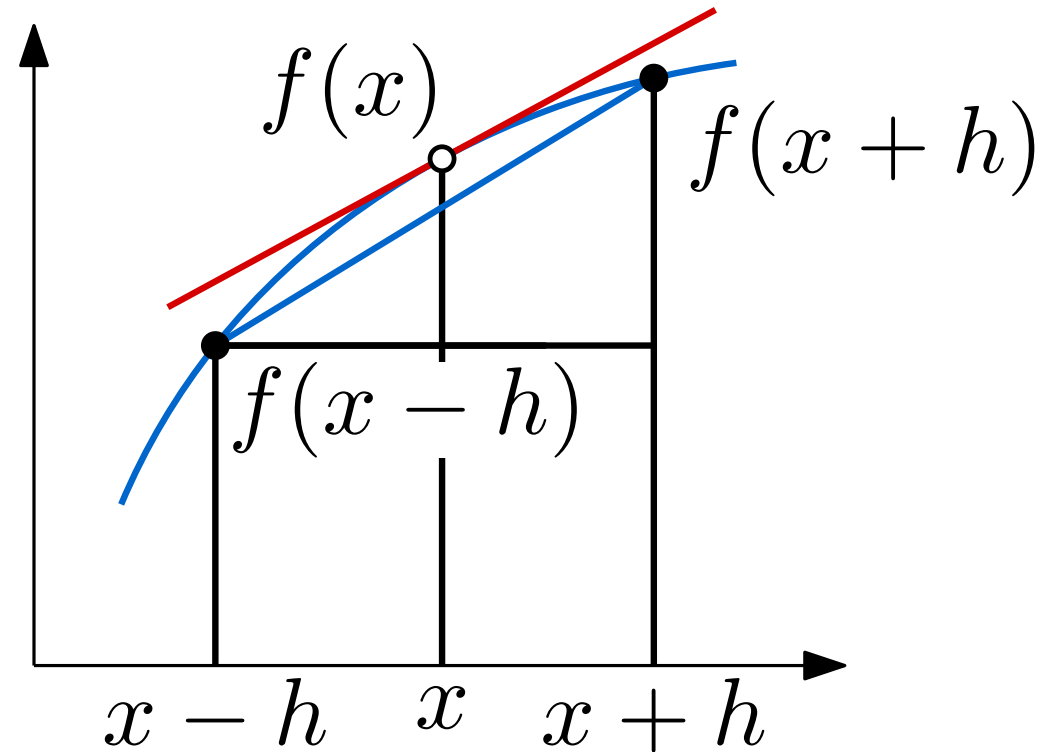
Aproximación geométrica

Idea: Obtenemos el polinomio interpolador P y lo derivamos en x , $P'(x)$.



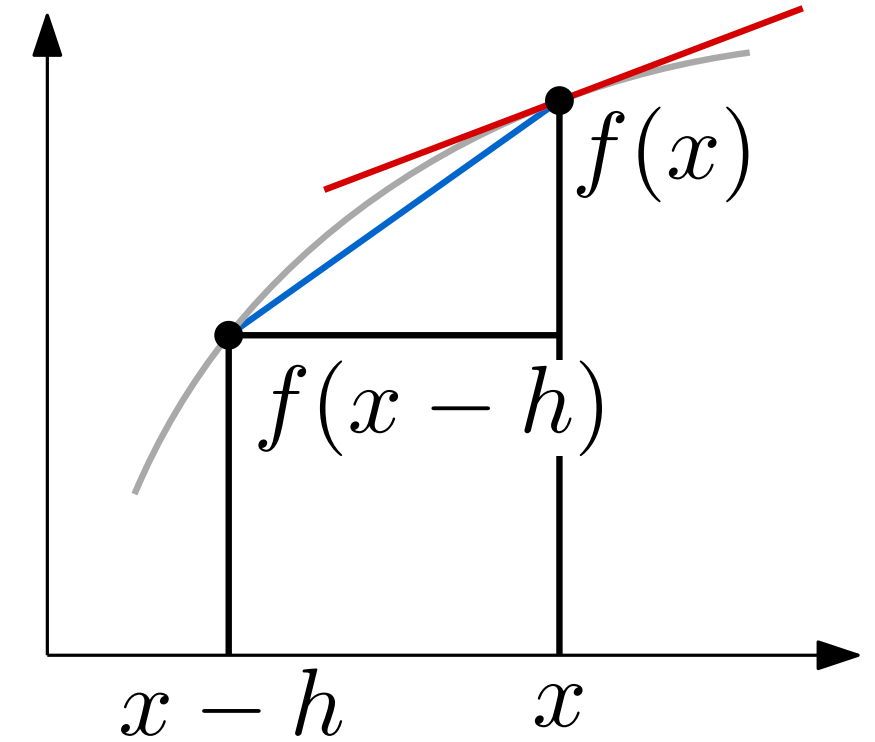
$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

forward



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

centrada

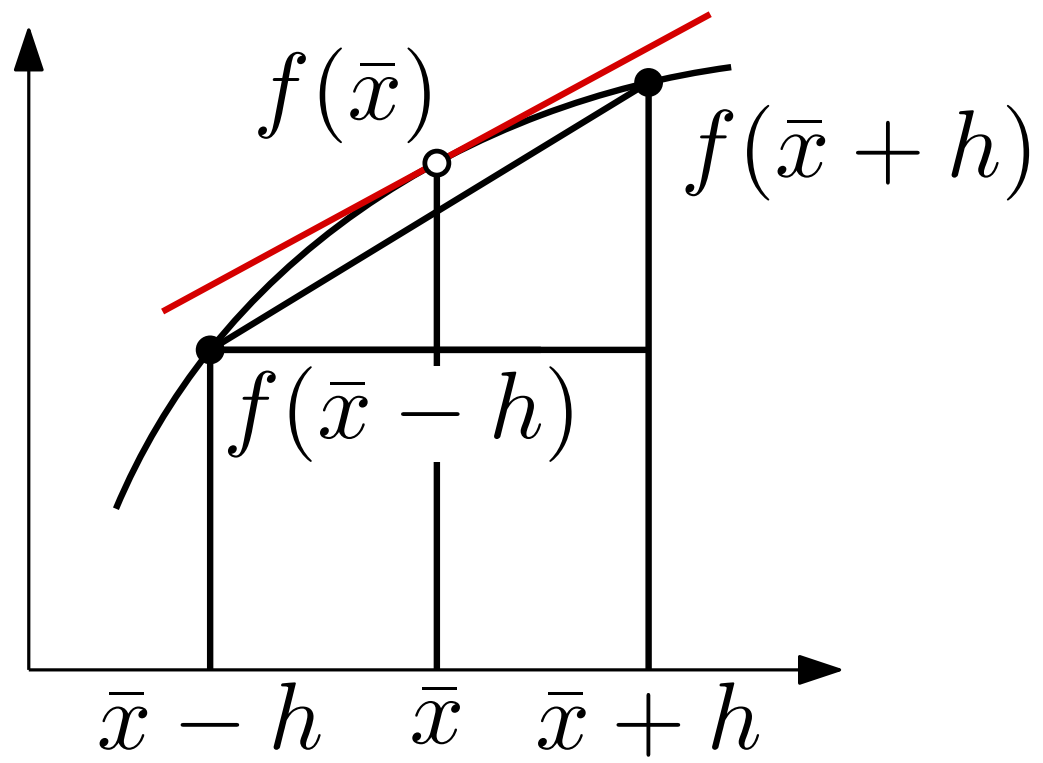


$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}$$

backward

Por ejemplo lecturas de un sensor en el tiempo.

Fórmula centrada



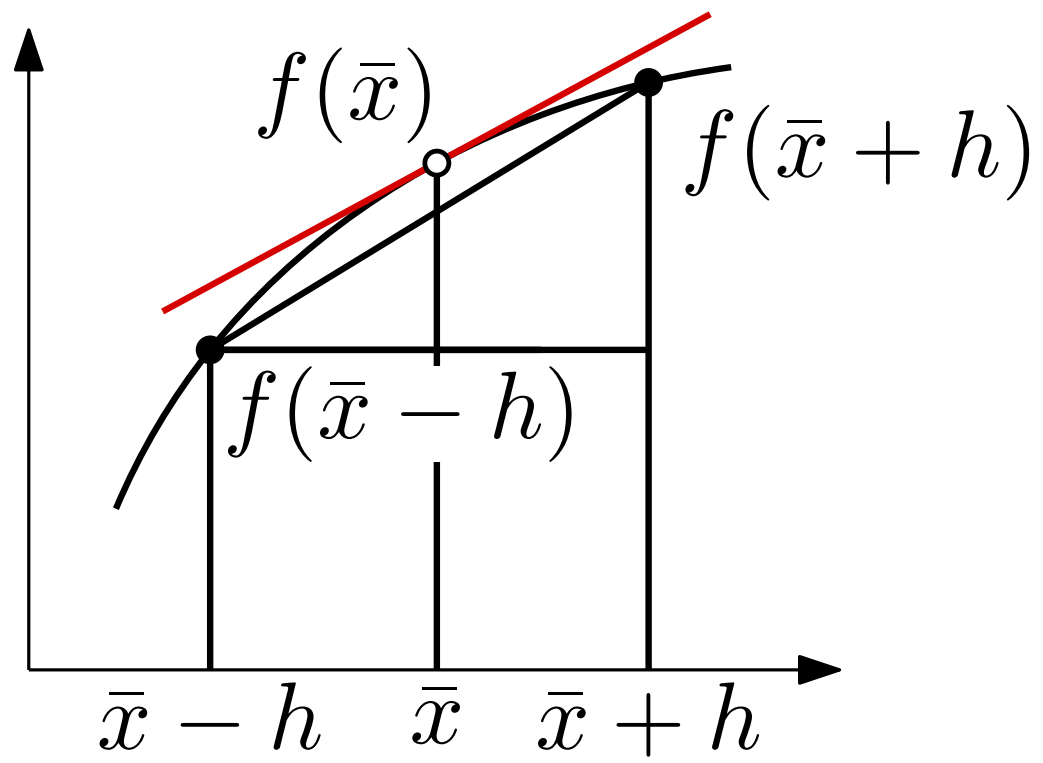
$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

centrada

Demostración:

- Encontrar el polinomio interpolador que pasa por los tres puntos: $y = ax^2 + bx + c$.

Fórmula centrada



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

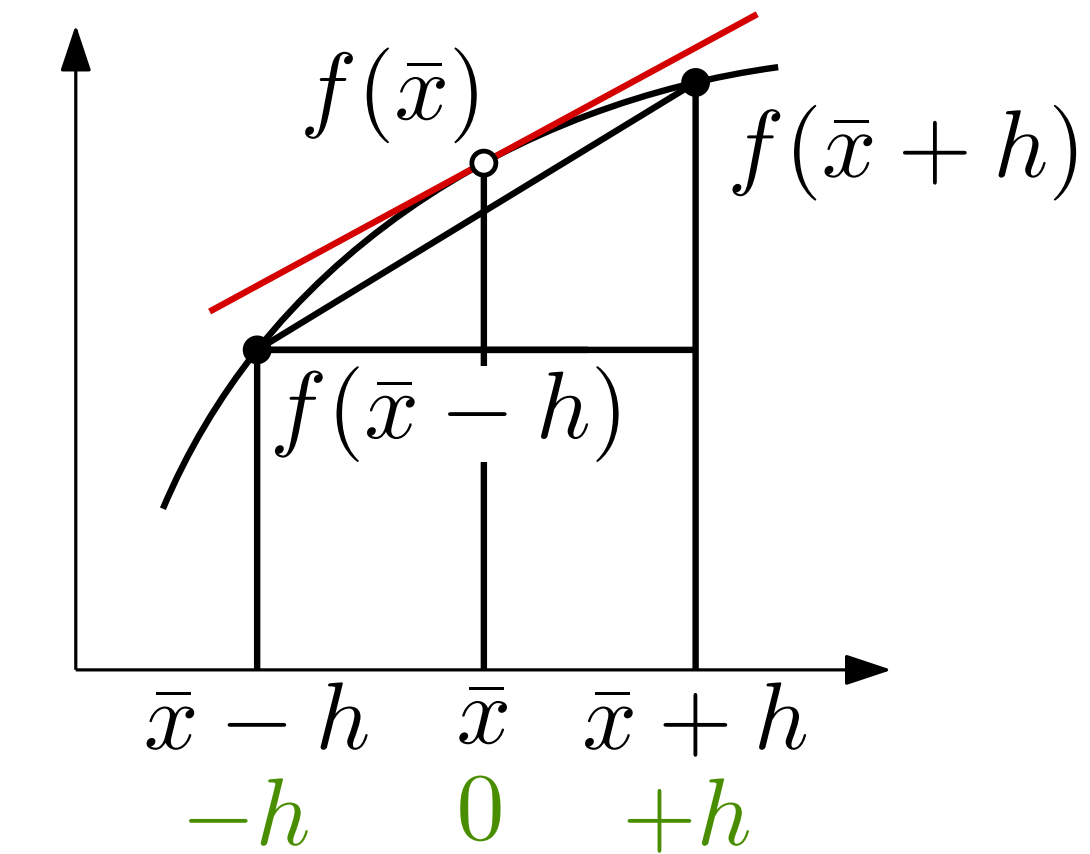
centrada

Demostración:

- Encontrar el polinomio interpolador que pasa por los tres puntos: $y = ax^2 + bx + c$.

Es más fácil si centramos en 0 (restando \bar{x} a todas las abscisas).

Fórmula centrada



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

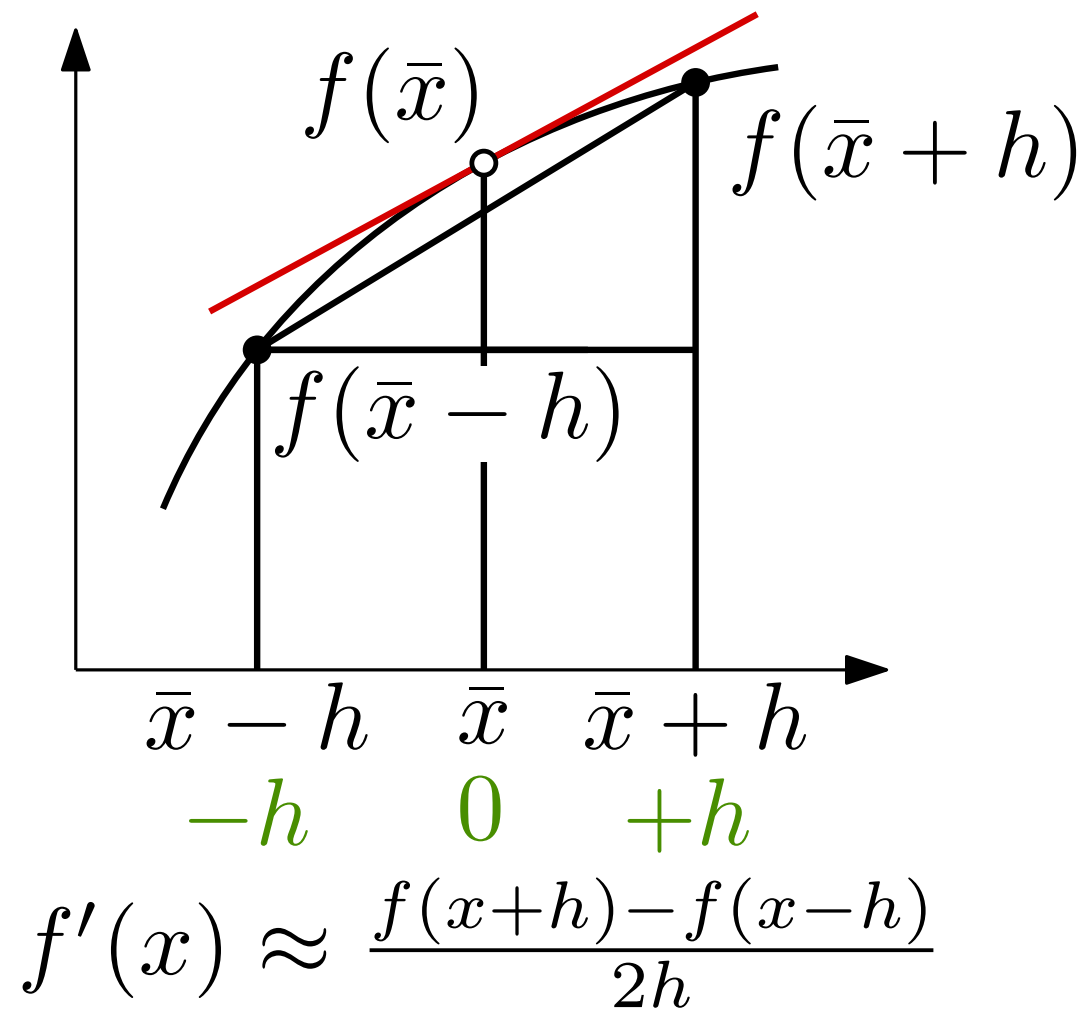
centrada

Demostración:

- Encontrar el polinomio interpolador que pasa por los tres puntos: $y = ax^2 + bx + c$.

Es más fácil si centramos en 0 (restando \bar{x} a todas las abscisas).

Fórmula centrada



centrada

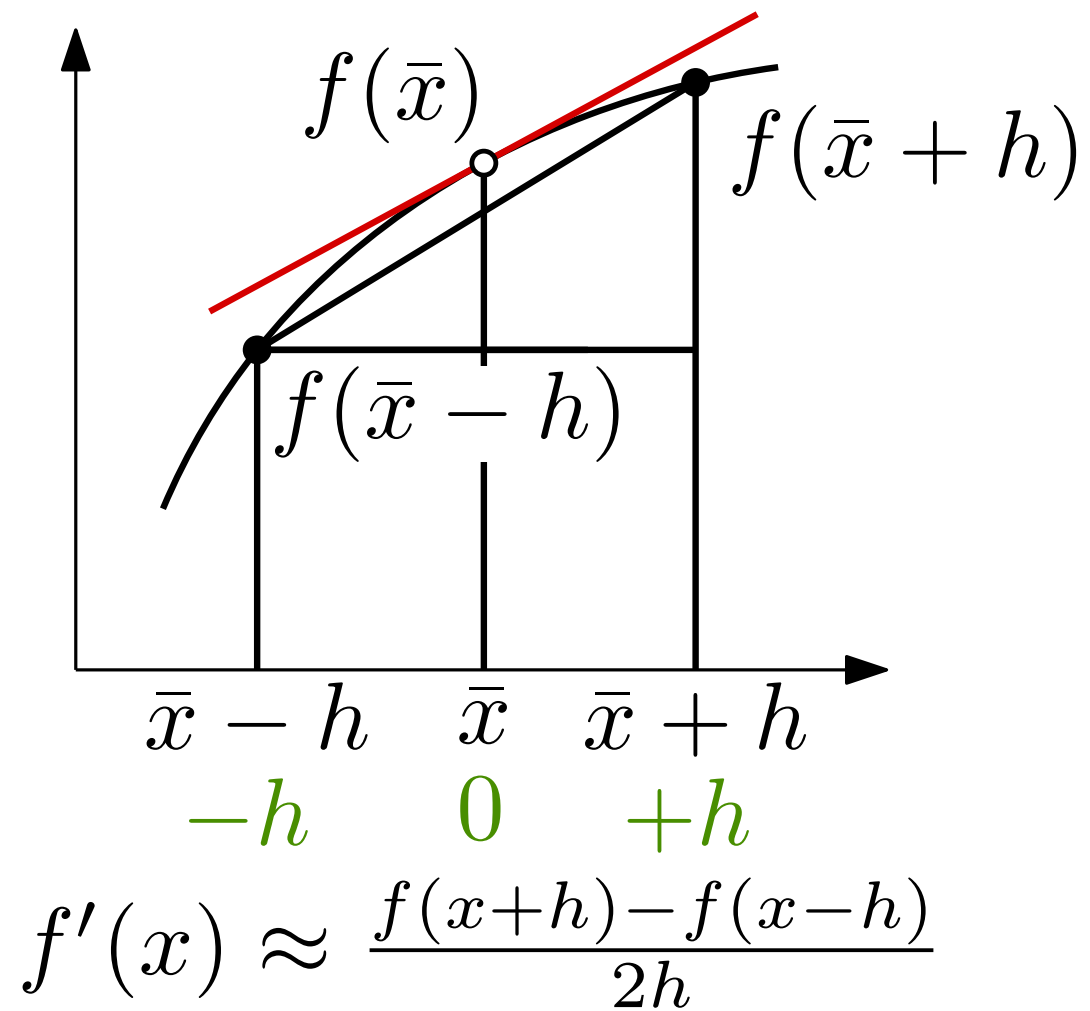
Demostración:

- Encontrar el polinomio interpolador que pasa por los tres puntos: $y = ax^2 + bx + c$.

Es más fácil si centramos en 0 (restando \bar{x} a todas las abscisas).

$$\begin{pmatrix} h^2 & -h & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ h^2 & h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(\bar{x} - h) \\ f(\bar{x}) \\ f(\bar{x} + h) \end{pmatrix}$$

Fórmula centrada



centrada

Demostración:

- Encontrar el polinomio interpolador que pasa por los tres puntos: $y = ax^2 + bx + c$.

Es más fácil si centramos en 0 (restando \bar{x} a todas las abscisas).

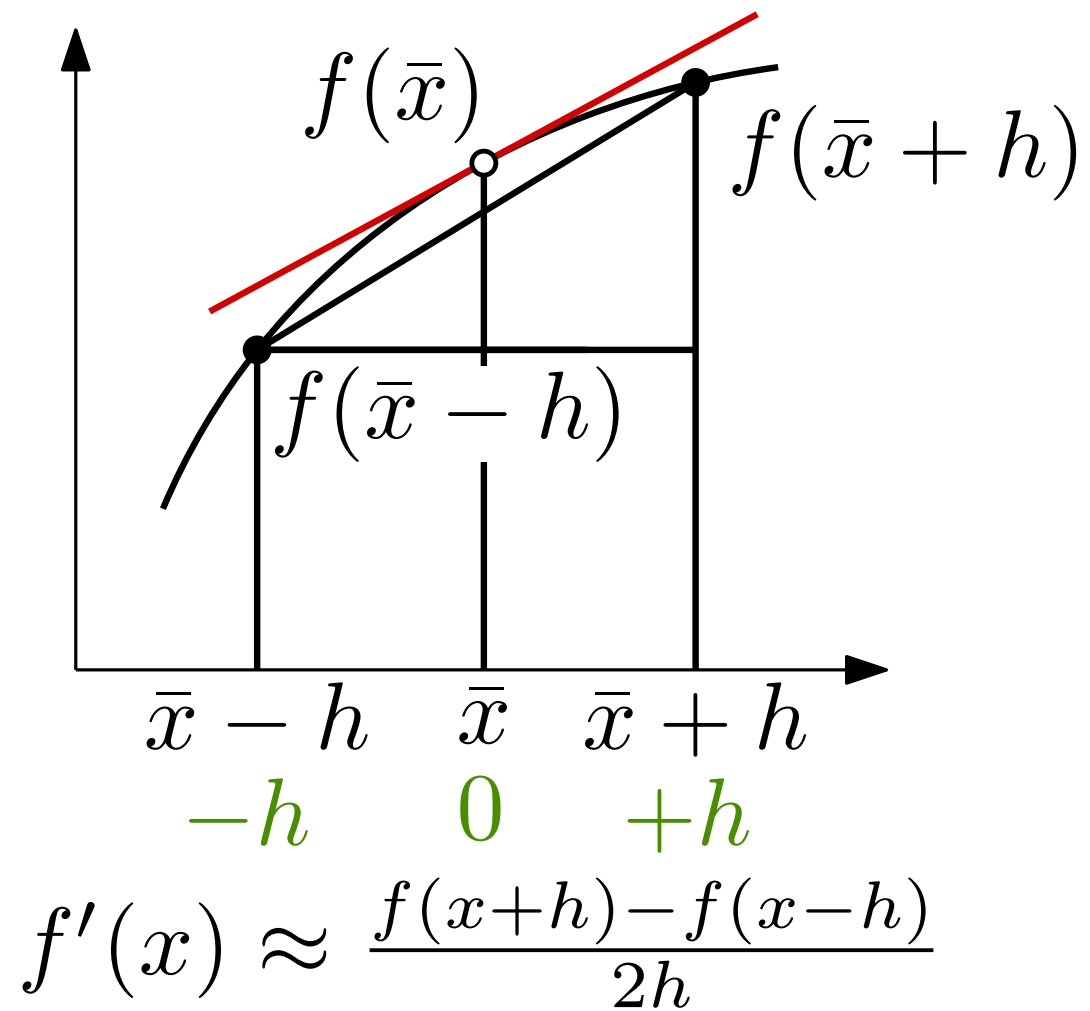
$$\begin{pmatrix} h^2 & -h & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ h^2 & h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(\bar{x}-h) \\ f(\bar{x}) \\ f(\bar{x}+h) \end{pmatrix}$$

$$c = f(\bar{x})$$

$$b = \frac{f(\bar{x}+h) - f(\bar{x}-h)}{2h}$$

$$a = \frac{f(\bar{x}+h) - 2f(\bar{x}) + f(\bar{x}-h)}{2h^2}$$

Fórmula centrada



centrada

Demostración:

Derivar y evaluar en 0:

$$2a \cdot 0 + b = b \quad \square$$

- Encontrar el polinomio interpolador que pasa por los tres puntos: $y = ax^2 + bx + c$.

Es más fácil si centramos en 0 (restando \bar{x} a todas las abscisas).

$$\begin{pmatrix} h^2 & -h & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ h^2 & h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(\bar{x}-h) \\ f(\bar{x}) \\ f(\bar{x}+h) \end{pmatrix}$$

$$c = f(\bar{x})$$

$$b = \frac{f(\bar{x}+h) - f(\bar{x}-h)}{2h}$$

$$a = \frac{f(\bar{x}+h) - 2f(\bar{x}) + f(\bar{x}-h)}{2h^2}$$

- Derivar el polinomio interpolador y evaluarlo en el punto central.

Orden de las aproximaciones

Fórmula forward $f'(x)$ (recordatorio) y backward $f'(x)$

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(\xi)h^2$$

con $x \leq \xi \leq x+h$. Obtenemos:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{1}{2}f''(\xi)h$$

Fórmula forward 

 Resto de primer orden $O(h)$

Fórmula forward $f'(x)$ (recordatorio) y backward $f'(x)$

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(\xi)h^2$$

con $x \leq \xi \leq x+h$. Obtenemos:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{1}{2}f''(\xi)h$$

Fórmula forward ↑

↑ Resto de primer orden $O(h)$

Análogamente:

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

con $x-h \leq \xi \leq x$. Obtenemos:

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{1}{2}f''(\xi)h$$

Fórmula backward ↑

↑ Resto de primer orden $O(h)$

Fórmula centrada $f'(x)$

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + \frac{1}{6}f'''(\xi_+)h^3 \quad \text{con } x \leq \xi_+ \leq x+h.$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_-)h^3 \quad \text{con } x-h \leq \xi_- \leq x.$$

Fórmula centrada $f'(x)$

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)} h^2 + \frac{1}{6} f'''(\xi_+) h^3 \quad \text{con } x \leq \xi_+ \leq x+h.$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)} h^2 - \frac{1}{6} f'''(\xi_-) h^3 \quad \text{con } x-h \leq \xi_- \leq x.$$

Si restamos las dos igualdades y aislamos $f'(x)$, se obtiene la fórmula centrada más un resto de segundo orden $O(h^2)$:

Fórmula centrada $f'(x)$

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)} h^2 + \frac{1}{6} f'''(\xi_+) h^3 \quad \text{con } x \leq \xi_+ \leq x+h.$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)} h^2 - \frac{1}{6} f'''(\xi_-) h^3 \quad \text{con } x-h \leq \xi_- \leq x.$$

Si restamos las dos igualdades y aislamos $f'(x)$, se obtiene la fórmula centrada más un resto de segundo orden $O(h^2)$:

$$f(x+h) - f(x-h) = 2f'(x)h + \frac{1}{3} \left(\frac{f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)}{2} \right) h^3$$

Fórmula centrada $f'(x)$

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)} h^2 + \frac{1}{6} f'''(\xi_+) h^3 \quad \text{con } x \leq \xi_+ \leq x+h.$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)} h^2 - \frac{1}{6} f'''(\xi_-) h^3 \quad \text{con } x-h \leq \xi_- \leq x.$$

Si restamos las dos igualdades y aislamos $f'(x)$, se obtiene la fórmula centrada más un resto de segundo orden $O(h^2)$: $= f'''(\xi)$ por el T. valor intermedio.

$$f(x+h) - f(x-h) = 2f'(x)h + \frac{1}{3} \left(\frac{f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)}{2} \right) h^3$$

con $x-h \leq \xi \leq x+h$.

Fórmula centrada $f'(x)$

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)} h^2 + \frac{1}{6} f'''(\xi_+) h^3 \quad \text{con } x \leq \xi_+ \leq x+h.$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)} h^2 - \frac{1}{6} f'''(\xi_-) h^3 \quad \text{con } x-h \leq \xi_- \leq x.$$

Si restamos las dos igualdades y aislamos $f'(x)$, se obtiene la fórmula centrada más un resto de segundo orden $O(h^2)$: $= f'''(\xi)$ por el T. valor intermedio.

$$f(x+h) - f(x-h) = 2f'(x)h + \frac{1}{3} \left(\frac{f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)}{2} \right) h^3$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(\xi)}{6} h^2 \quad \text{con } x-h \leq \xi \leq x+h.$$

Fórmula centrada $f'(x)$

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + \frac{1}{6}f'''(\xi_+)h^3 \quad \text{con } x \leq \xi_+ \leq x+h.$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_-)h^3 \quad \text{con } x-h \leq \xi_- \leq x.$$

Si restamos las dos igualdades y aislamos $f'(x)$, se obtiene la **fórmula centrada** más un resto de **segundo orden $O(h^2)$** :

$= f'''(\xi)$ por el T. valor intermedio.

$$f(x+h) - f(x-h) = 2f'(x)h + \frac{1}{3} \left(\frac{f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)}{2} \right) h^3$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(\xi)}{6} h^2 \quad \text{con } x-h \leq \xi \leq x+h.$$

Si duplicamos la tasa de muestreo, el error se divide por 4 \Rightarrow Mejor aproximación con h mayor

Fórmula centrada $f'(x)$ Menos impacto de la cancelación catastrófica

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)} h^2 + \frac{1}{6} f'''(\xi_+) h^3 \quad \text{con } x \leq \xi_+ \leq x+h.$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)} h^2 - \frac{1}{6} f'''(\xi_-) h^3 \quad \text{con } x-h \leq \xi_- \leq x.$$

Si restamos las dos igualdades y aislamos $f'(x)$, se obtiene la **fórmula centrada** más un resto de segundo orden $O(h^2)$: $= f'''(\xi)$ por el T. valor intermedio.

$$f(x+h) - f(x-h) = 2f'(x)h + \frac{1}{3} \left(\frac{f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)}{2} \right) h^3$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(\xi)}{6} \boxed{h^2} \quad \text{con } x-h \leq \xi \leq x+h.$$

Si duplicamos la tasa de muestreo, el error se divide por 4 \Rightarrow Mejor aproximación con h mayor

Resumen: fórmulas y orden de la aproximación

Sea $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ una función real de variable real derivable dos/tres veces con continuidad en un entorno de x , de la fórmula de Taylor se obtiene:

$$\text{▶ } \frac{f(x) - f(x-h)}{h} - f'(x) = \frac{h}{2} f''(\xi) \rightarrow 0 \quad \text{si } (h \rightarrow 0),$$

$$\text{▶ } \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) = \frac{h}{2} f''(\xi) \rightarrow 0 \quad \text{si } (h \rightarrow 0),$$

$$\text{▶ } \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - f'(x) = \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi) \rightarrow 0 \quad \text{si } (h \rightarrow 0).$$

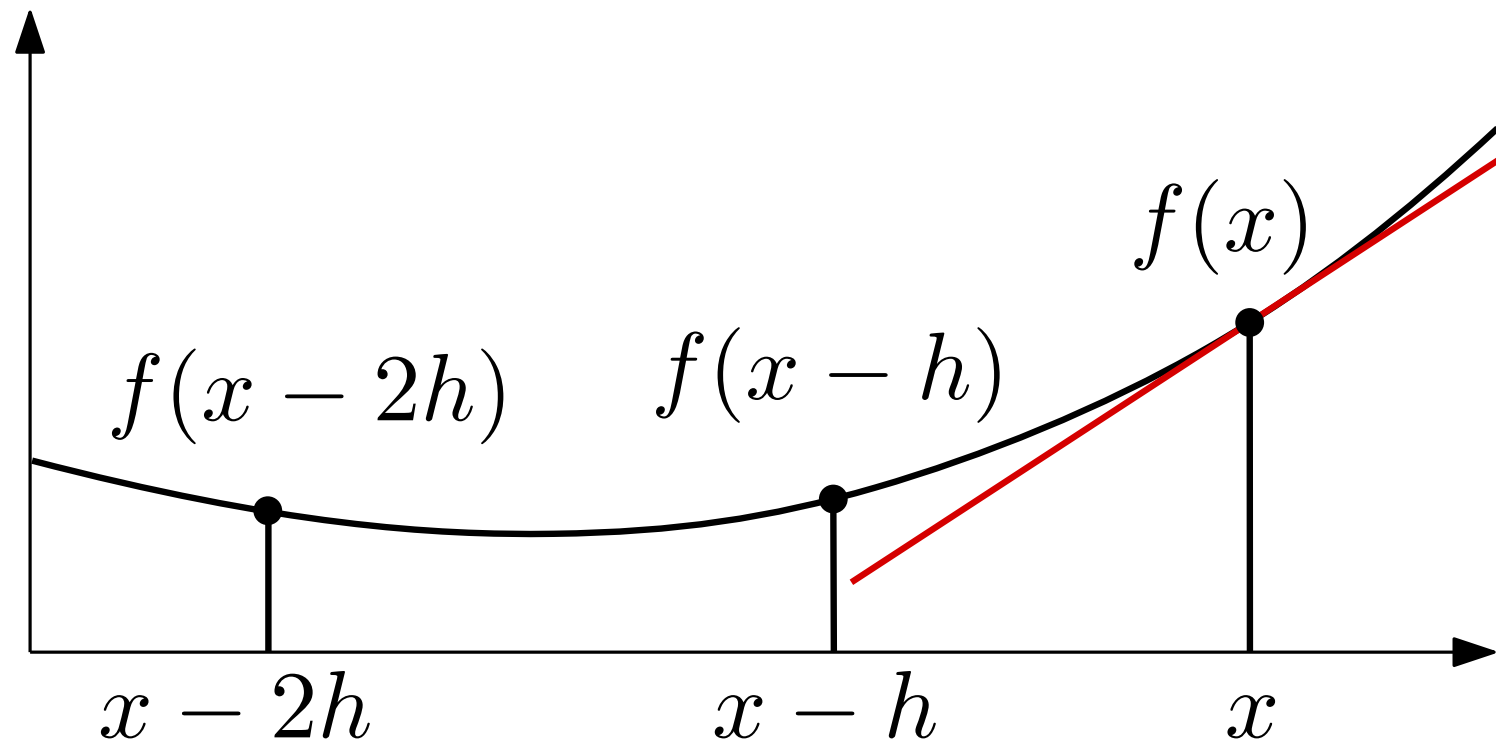
Donde ξ se encuentra en el intervalo de los dos puntos correspondientes.

Una mejor fórmula backward para $f'(x)$

- ¿Y si tenemos que usar una **fórmula backward** (por ejemplo, función de t , por lo que no sabemos el futuro) pero **queremos una mejor aproximación** (orden $O(h^2)$ en vez de $O(h)$)?

Una mejor fórmula backward para $f'(x)$

- ¿Y si tenemos que usar una **fórmula backward** (por ejemplo, función de t , por lo que no sabemos el futuro) pero **queremos una mejor aproximación** (orden $O(h^2)$ en vez de $O(h)$)?

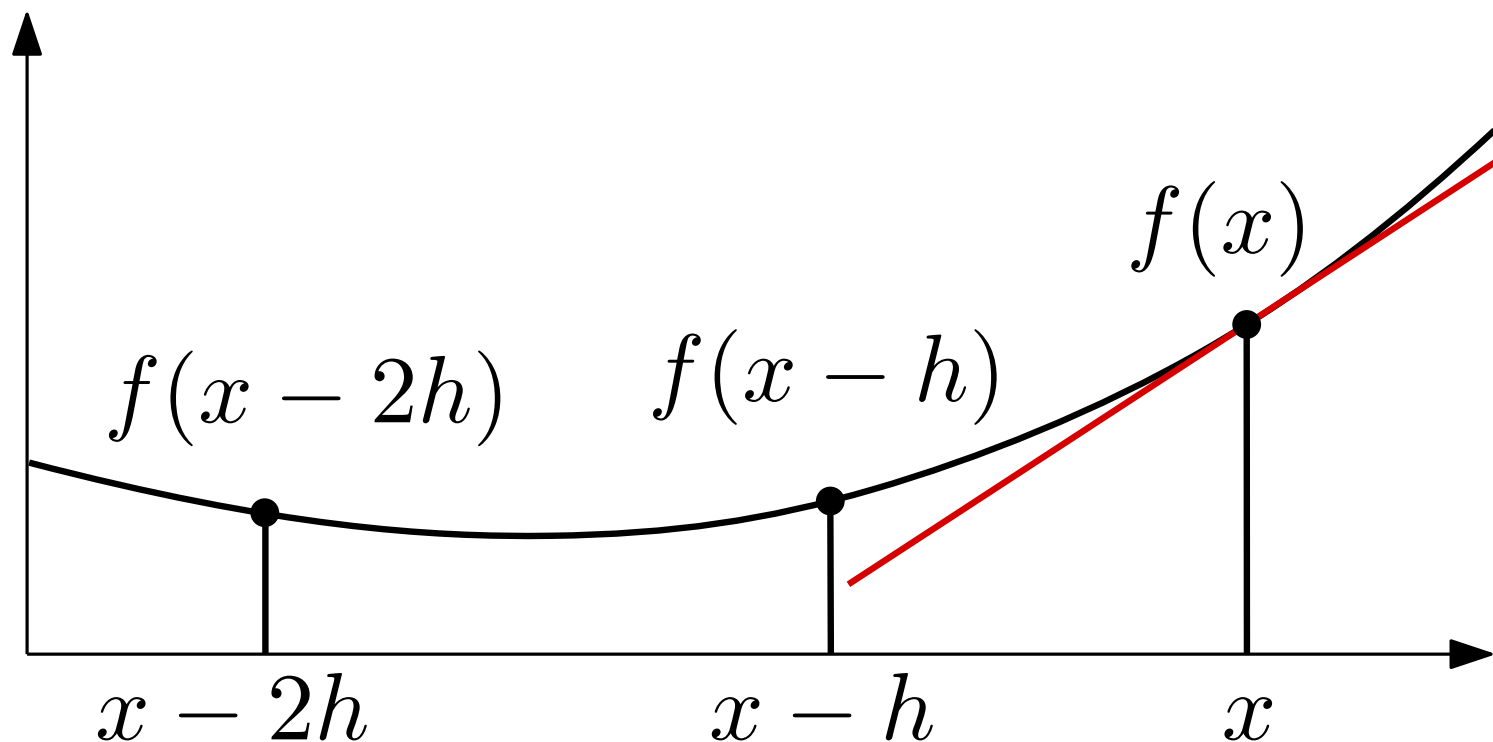


Una mejor fórmula backward para $f'(x)$

- ¿Y si tenemos que usar una **fórmula backward** (por ejemplo, función de t , por lo que no sabemos el futuro) pero **queremos una mejor aproximación** (orden $O(h^2)$ en vez de $O(h)$)?

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_1)h^3 \quad \text{con } x-h \leq \xi_- \leq x.$$

$$f(x-2h) = f(x) - f'(x)2h + \frac{1}{2}f''(x)(2h)^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_2)(2h)^3 \quad \text{con } x-2h \leq \xi_- \leq x.$$



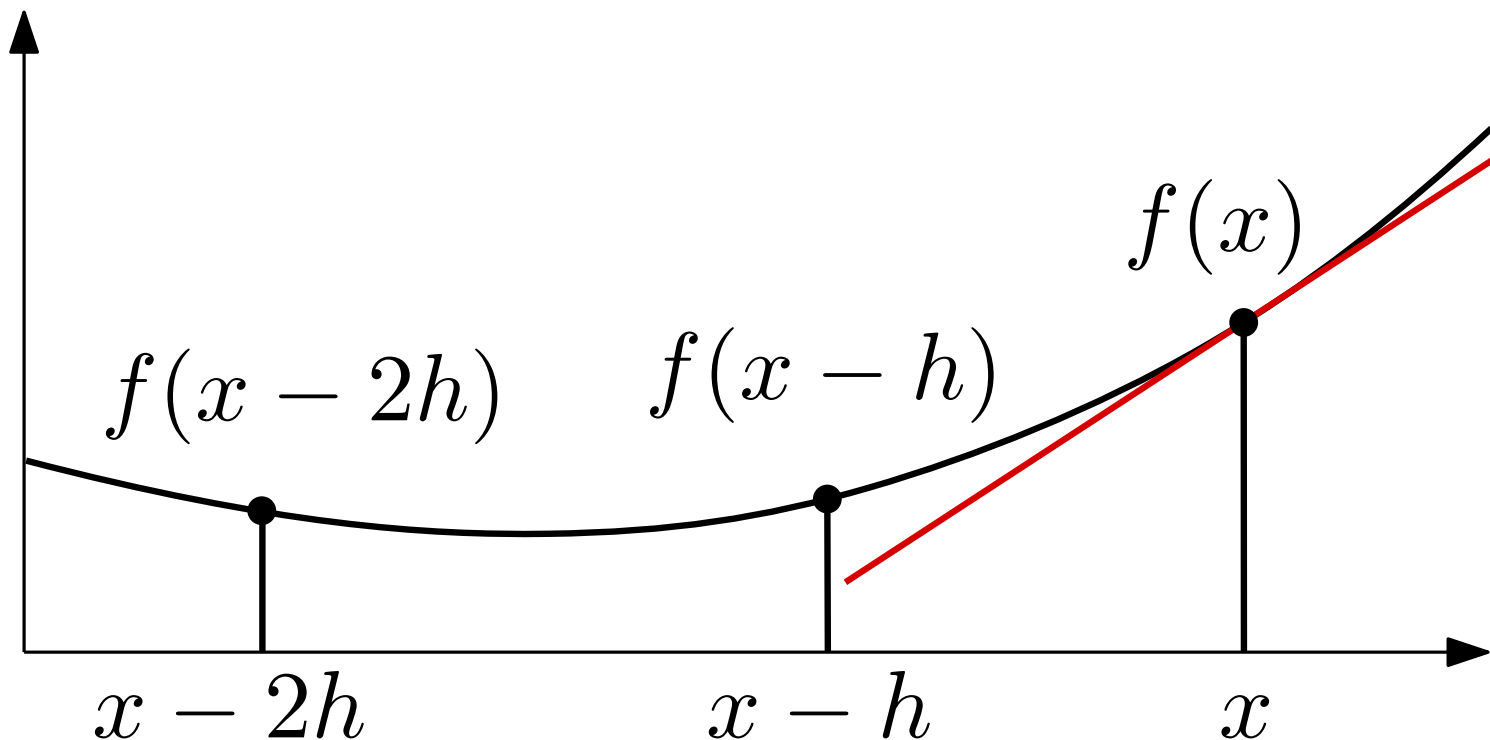
Una mejor fórmula backward para $f'(x)$

- ¿Y si tenemos que usar una **fórmula backward** (por ejemplo, función de t , por lo que no sabemos el futuro) pero **queremos una mejor aproximación** (orden $O(h^2)$ en vez de $O(h)$)?

4. $f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_1)h^3$ con $x-h \leq \xi_1 \leq x$.

—

$f(x-2h) = f(x) - f'(x)2h + \frac{1}{2}f''(x)(2h)^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_2)(2h)^3$ con $x-2h \leq \xi_2 \leq x$.



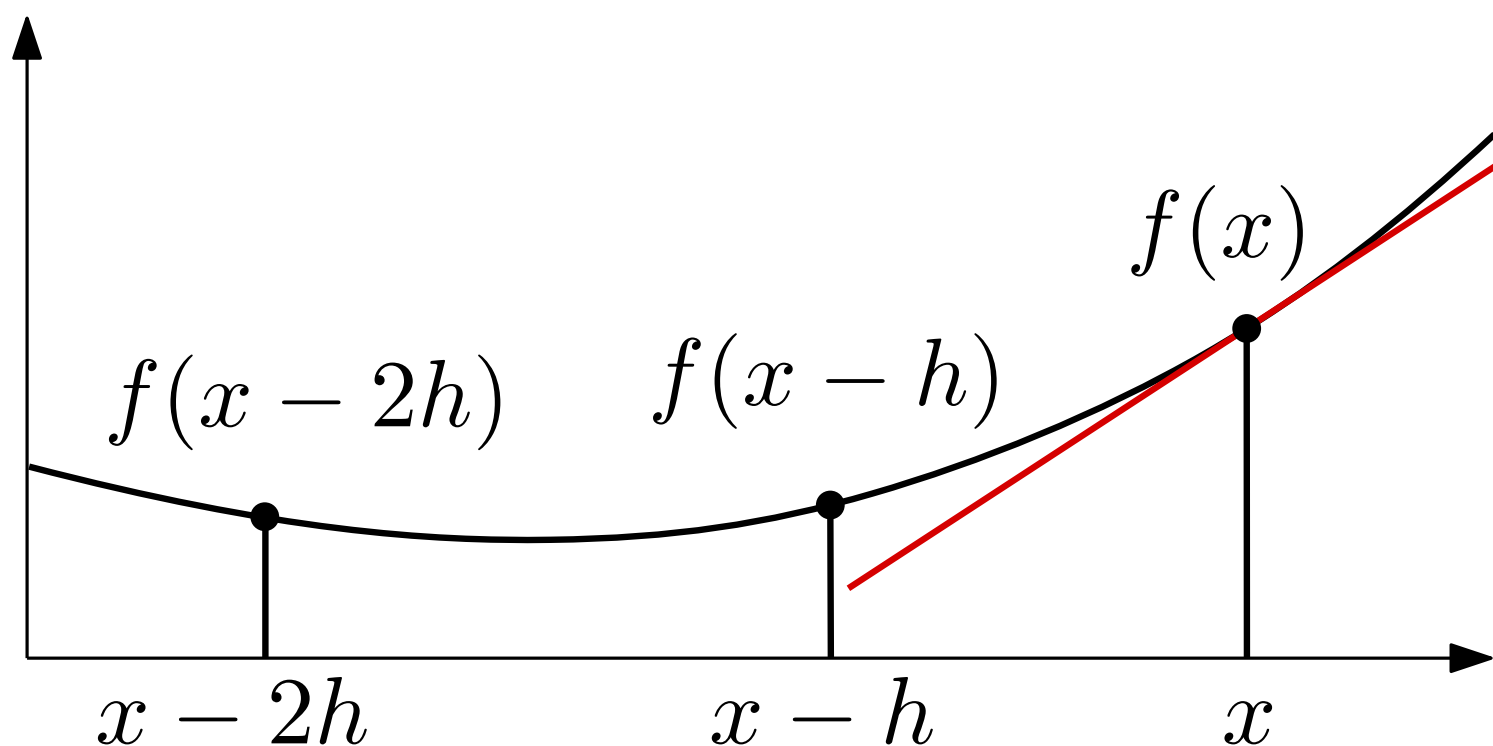
Una mejor fórmula backward para $f'(x)$

- ¿Y si tenemos que usar una **fórmula backward** (por ejemplo, función de t , por lo que no sabemos el futuro) pero **queremos una mejor aproximación** (orden $O(h^2)$ en vez de $O(h)$)?

4. $f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_1)h^3$ con $x-h \leq \xi_- \leq x$.

—

$f(x-2h) = f(x) - f'(x)2h + \frac{1}{2}f''(x)(2h)^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_2)(2h)^3$ con $x-2h \leq \xi_- \leq x$.



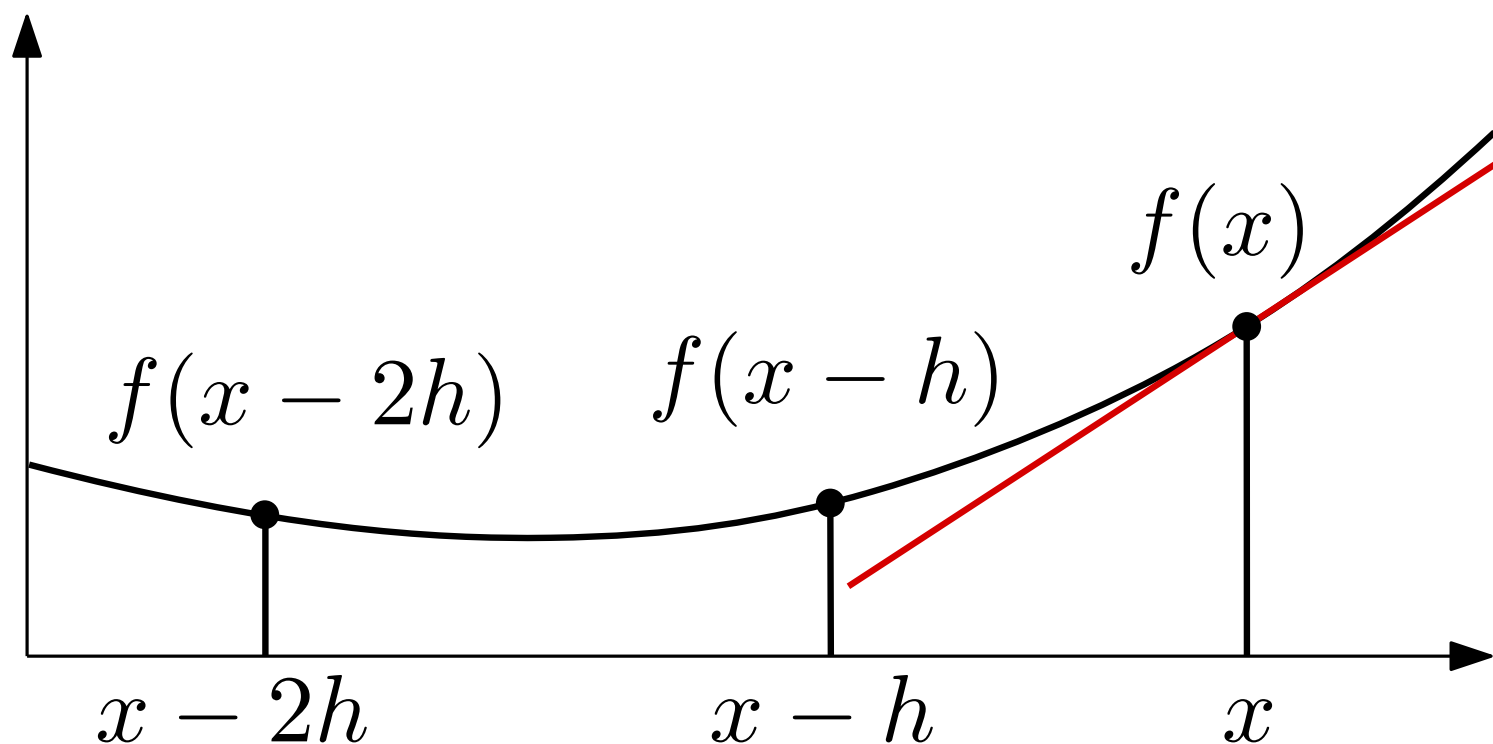
$$f'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h} + \text{error}$$

Una mejor fórmula backward para $f'(x)$

- ¿Y si tenemos que usar una **fórmula backward** (por ejemplo, función de t , por lo que no sabemos el futuro) pero **queremos una mejor aproximación** (orden $O(h^2)$ en vez de $O(h)$)?

4. $f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_1)h^3$ con $x-h \leq \xi_- \leq x$.

$f(x-2h) = f(x) - f'(x)2h + \frac{1}{2}f''(x)(2h)^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_2)(2h)^3$ con $x-2h \leq \xi_- \leq x$.



$$f'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h} + \text{error}$$

↓

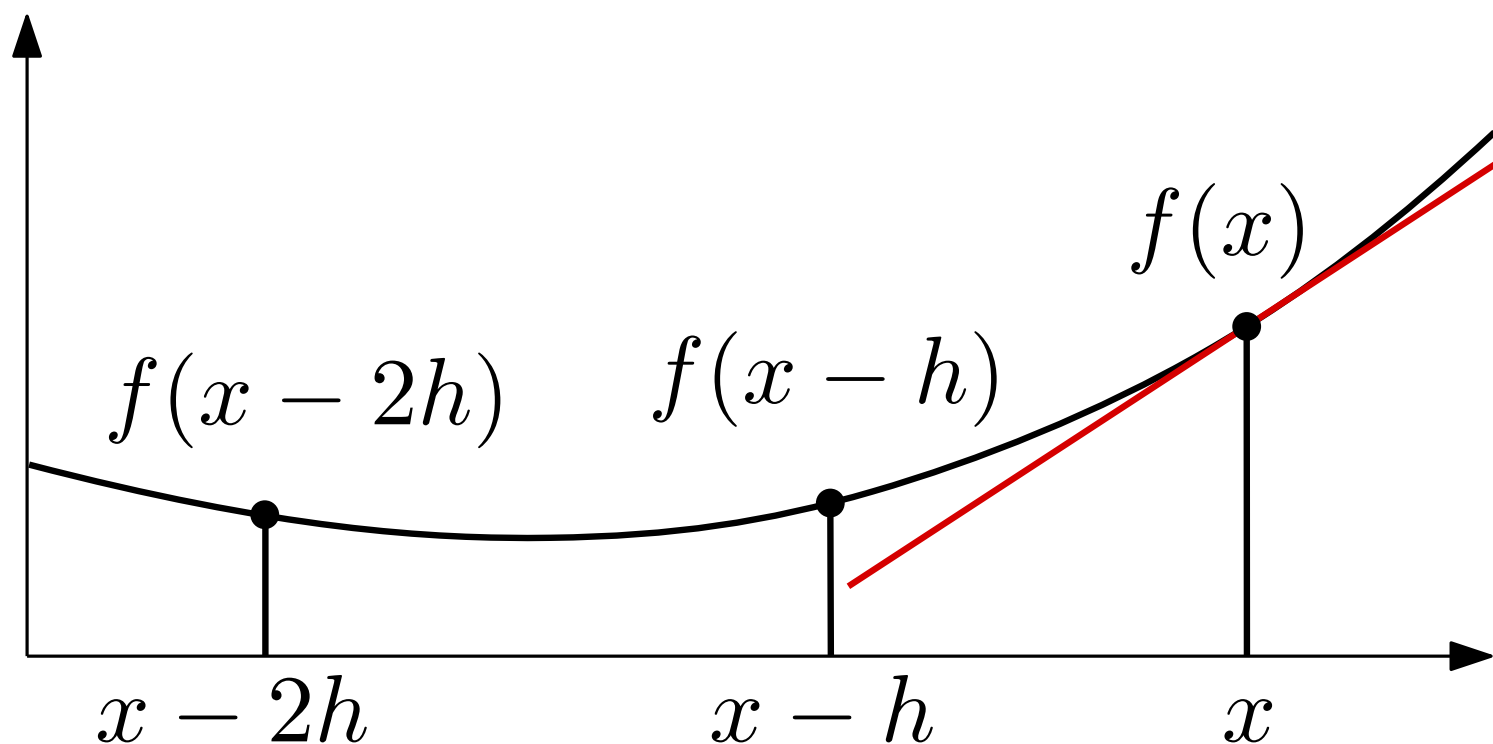
$$\frac{1}{3}(2f'''(\xi_2) - f'''(\xi_1))h^2$$

Una mejor fórmula backward para $f'(x)$

- ¿Y si tenemos que usar una **fórmula backward** (por ejemplo, función de t , por lo que no sabemos el futuro) pero **queremos una mejor aproximación** (orden $O(h^2)$ en vez de $O(h)$)?

4. $f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_1)h^3$ con $x-h \leq \xi_- \leq x$.

$f(x-2h) = f(x) - f'(x)2h + \frac{1}{2}f''(x)(2h)^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_2)(2h)^3$ con $x-2h \leq \xi_- \leq x$.



$$f'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h} + \text{error}$$

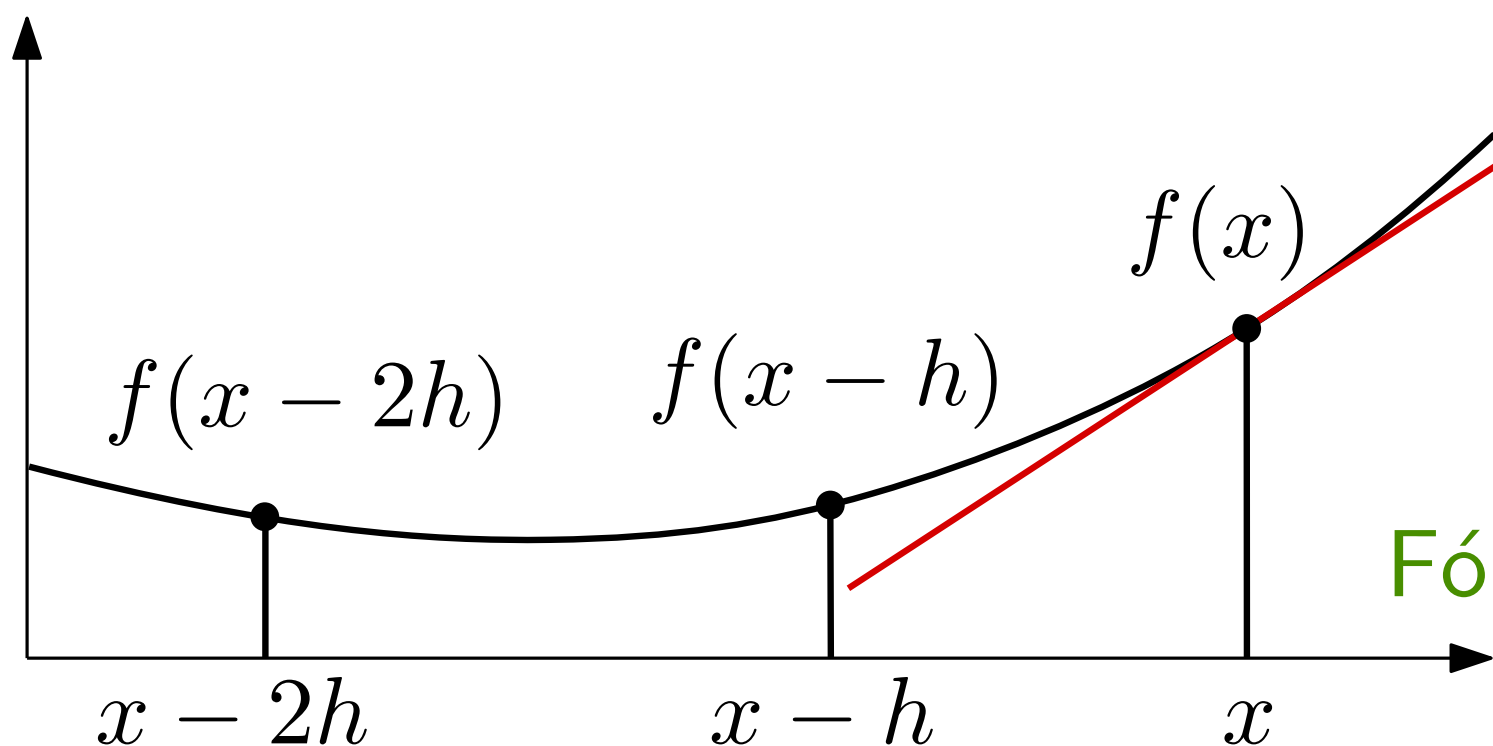
$$\begin{aligned} & \frac{1}{3}(2f'''(\xi_2) - f'''(\xi_1))h^2 \\ &= \frac{1}{3}f'''(x)h^2 + \mathcal{O}(h^3). \end{aligned}$$

Una mejor fórmula backward para $f'(x)$

- ¿Y si tenemos que usar una **fórmula backward** (por ejemplo, función de t , por lo que no sabemos el futuro) pero **queremos una mejor aproximación** (orden $O(h^2)$ en vez de $O(h)$)?

4. $f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_1)h^3$ con $x-h \leq \xi_- \leq x$.

$f(x-2h) = f(x) - f'(x)2h + \frac{1}{2}f''(x)(2h)^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_2)(2h)^3$ con $x-2h \leq \xi_- \leq x$.



$$f'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h} + \text{error}$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{3}(2f'''(\xi_2) - f'''(\xi_1))h^2 \\ &= \frac{1}{3}f'''(x)h^2 + \mathcal{O}(h^3). \end{aligned}$$

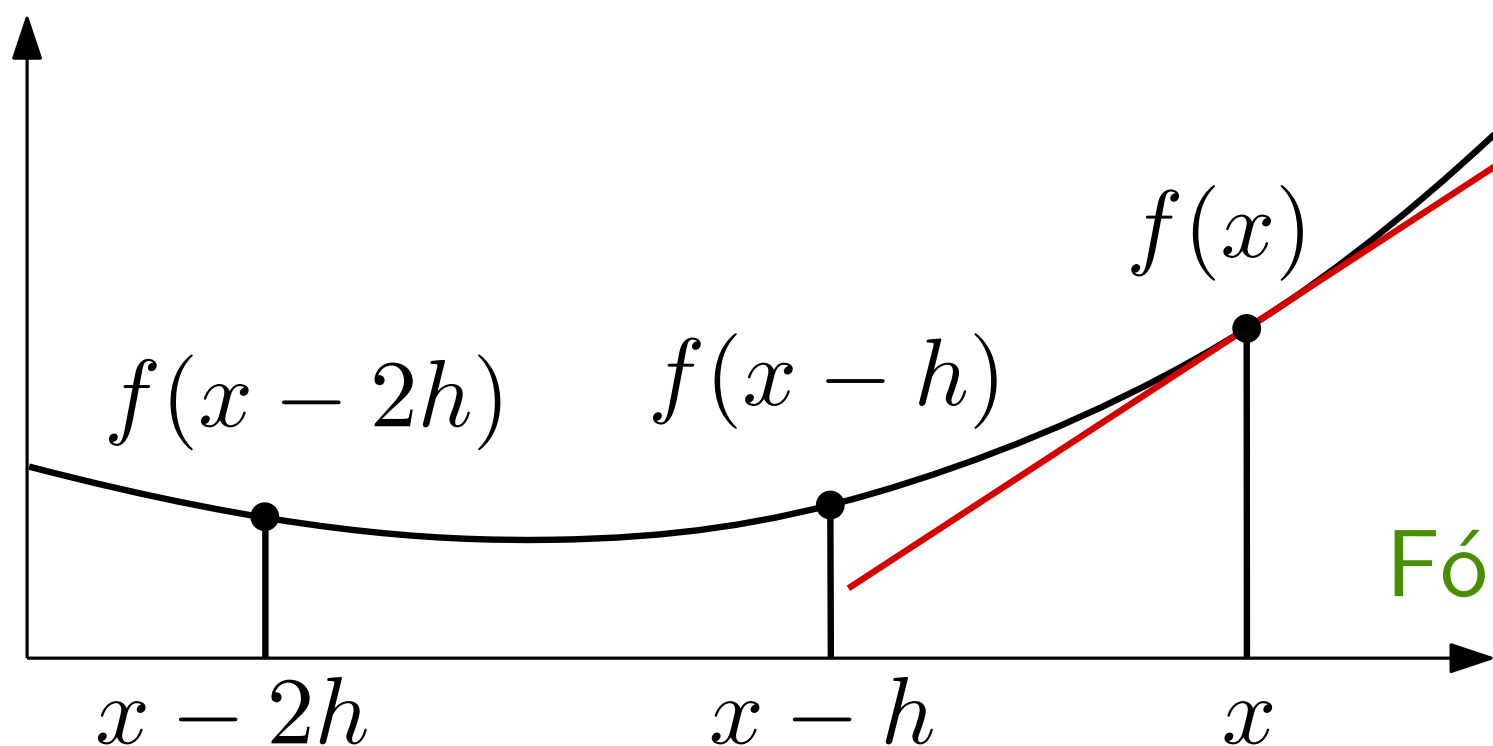
Fórmula backward $\mathcal{O}(h^2)$.

Una mejor fórmula backward para $f'(x)$

- ¿Y si tenemos que usar una **fórmula backward** (por ejemplo, función de t , por lo que no sabemos el futuro) pero **queremos una mejor aproximación** (orden $O(h^2)$ en vez de $O(h)$)?

4. $f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_1)h^3$ con $x-h \leq \xi_- \leq x$.

$f(x-2h) = f(x) - f'(x)2h + \frac{1}{2}f''(x)(2h)^2 - \frac{1}{6}f'''(\xi_2)(2h)^3$ con $x-2h \leq \xi_- \leq x$.



$$f'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h} + \text{error}$$

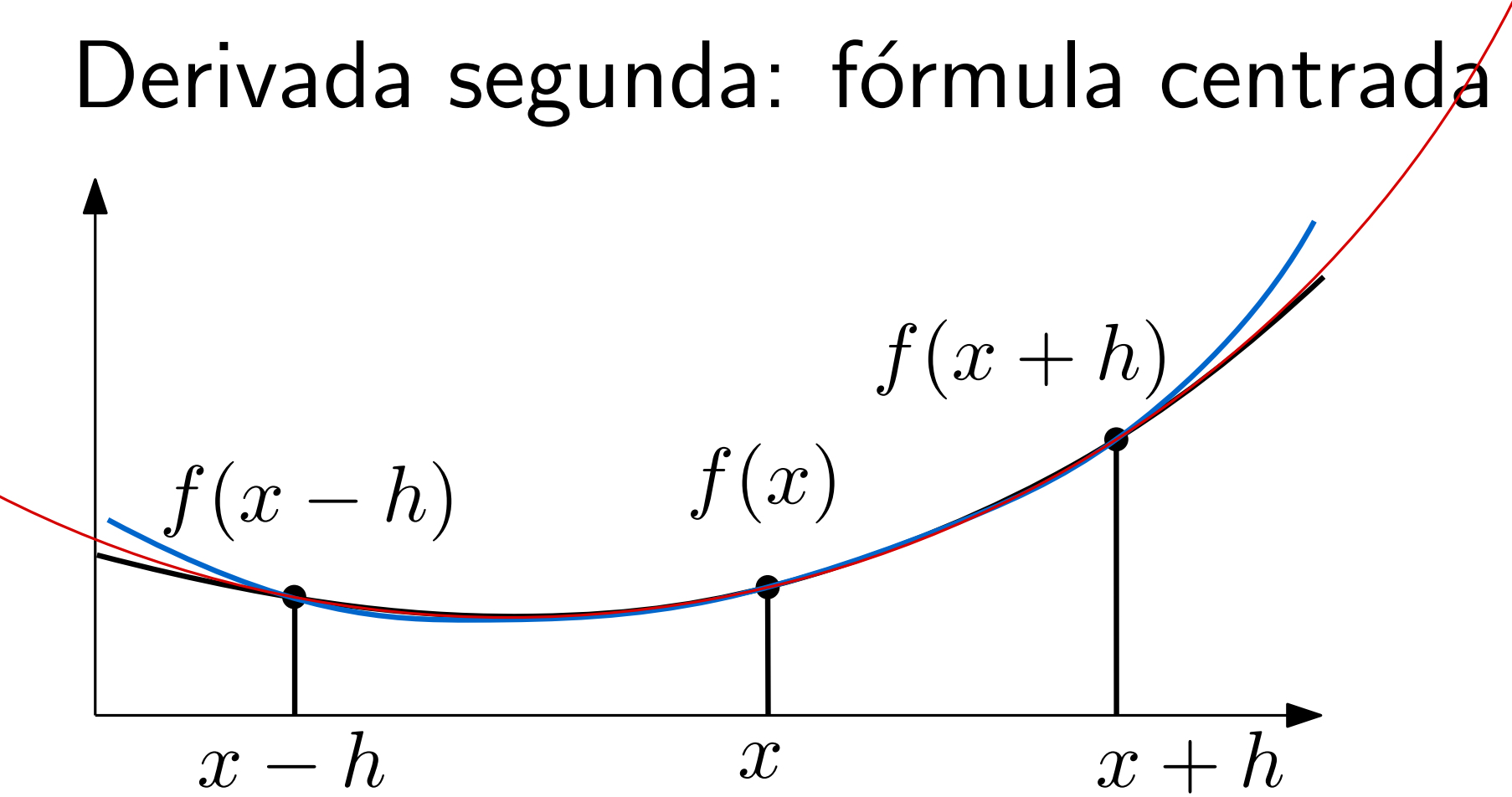
$$\frac{1}{3}(2f'''(\xi_2) - f'''(\xi_1))h^2$$

$$= \frac{1}{3}f'''(x)h^2 + \mathcal{O}(h^3).$$

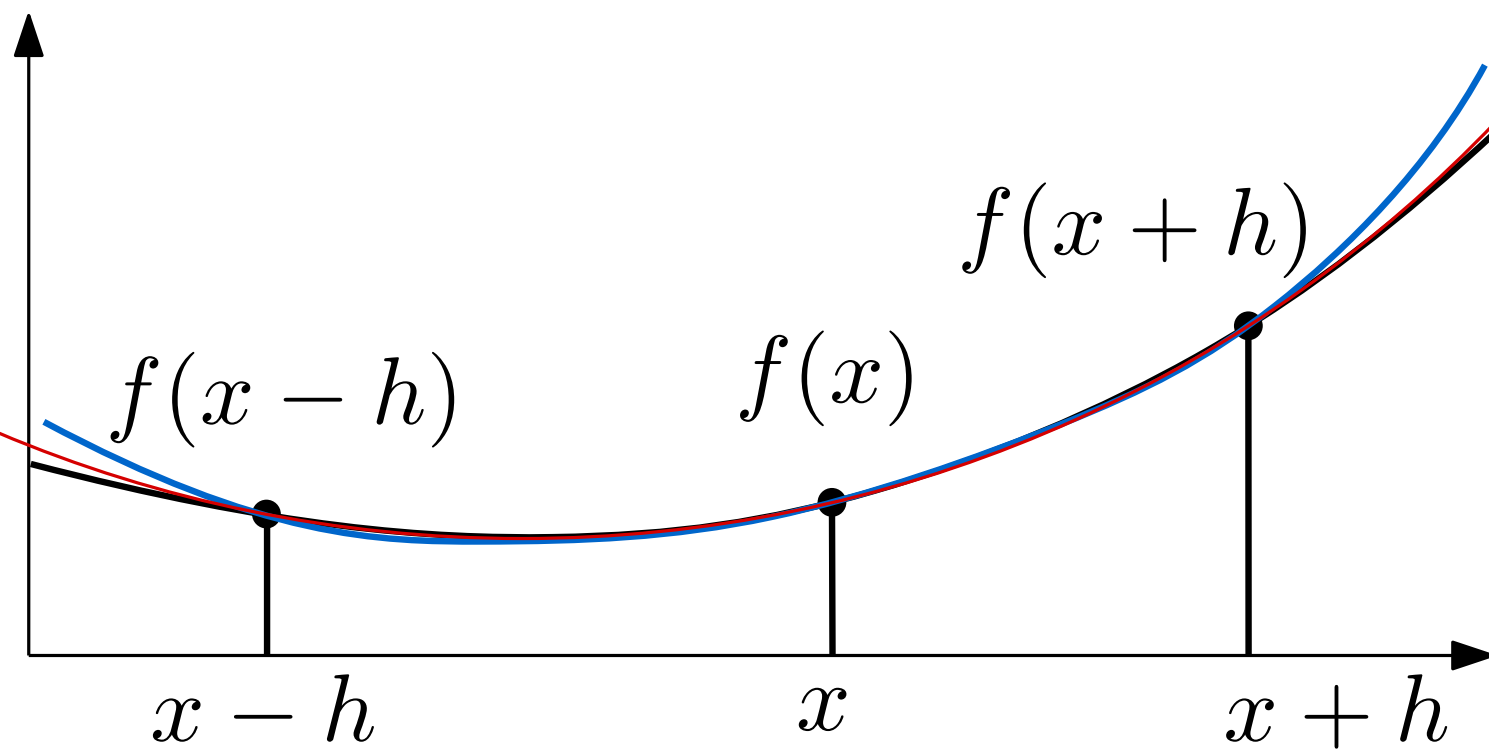
Fórmula backward $\mathcal{O}(h^2)$.

(Aprox. doble de error que la centrada.)

Derivada segunda: fórmula centrada para $f''(x)$

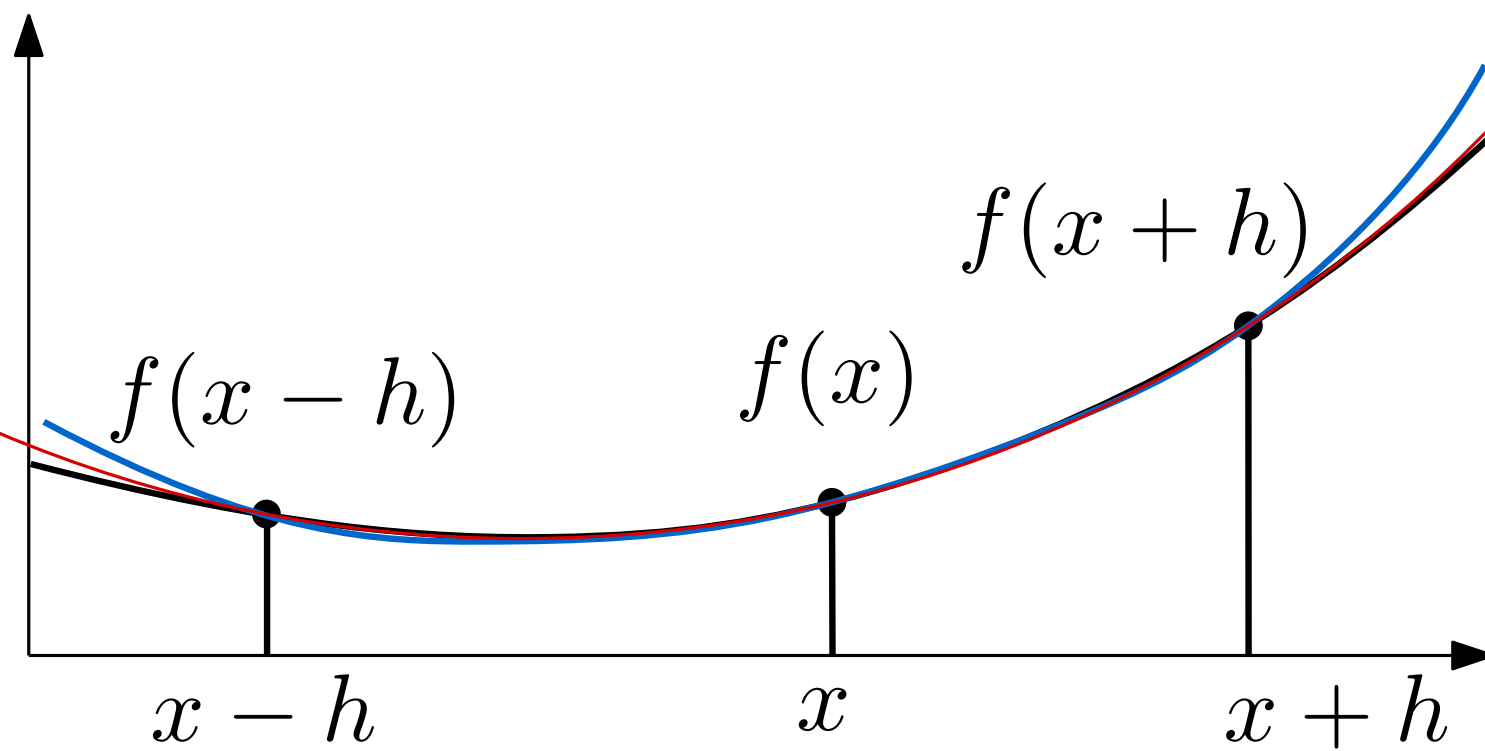


Derivada segunda: fórmula centrada para $f''(x)$



► Calculamos el polinomio cúbico interpolador y lo derivamos dos veces.

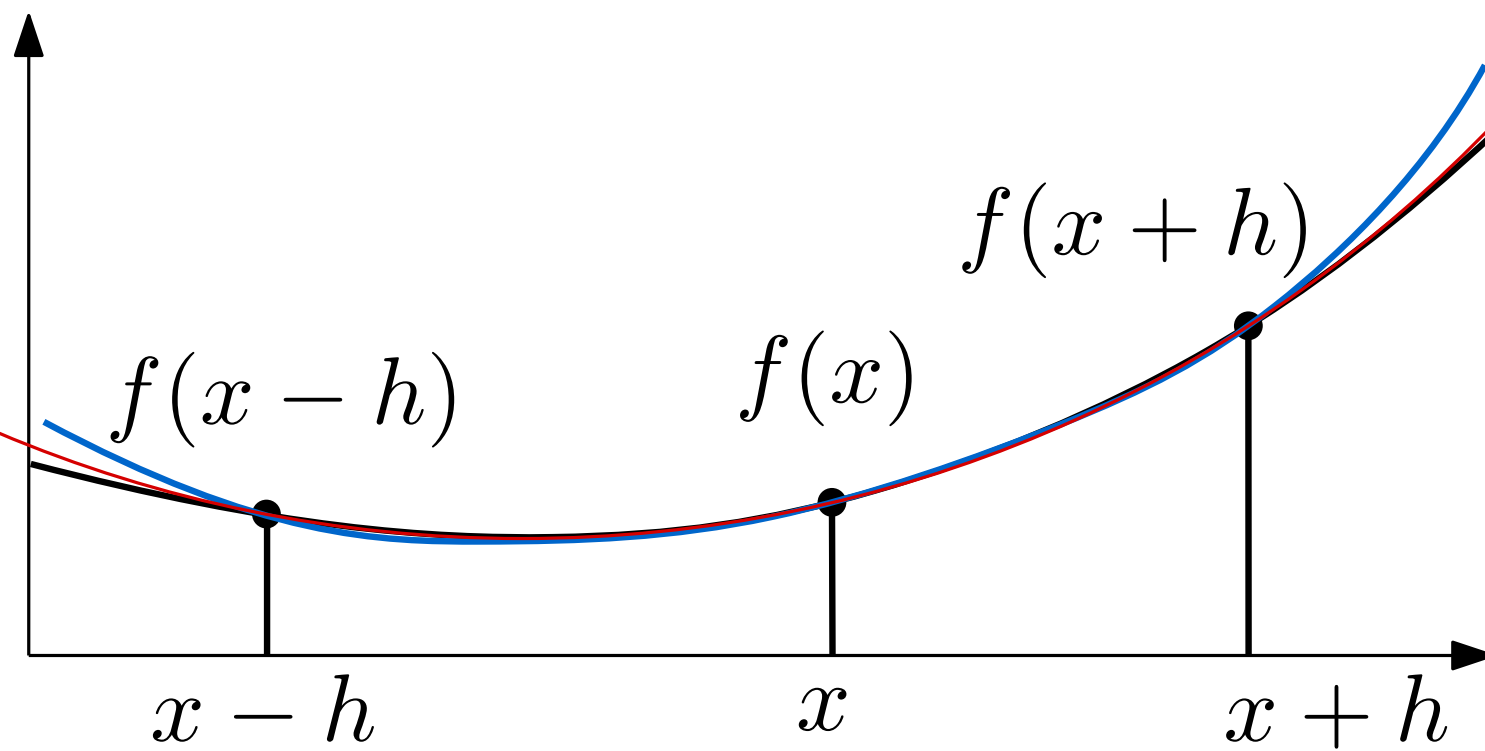
Derivada segunda: fórmula centrada para $f''(x)$



► Calculamos el polinomio cúbico interpolador y lo derivamos dos veces.

Es más fácil si centramos en 0
(la segunda derivada es constante).

Derivada segunda: fórmula centrada para $f''(x)$

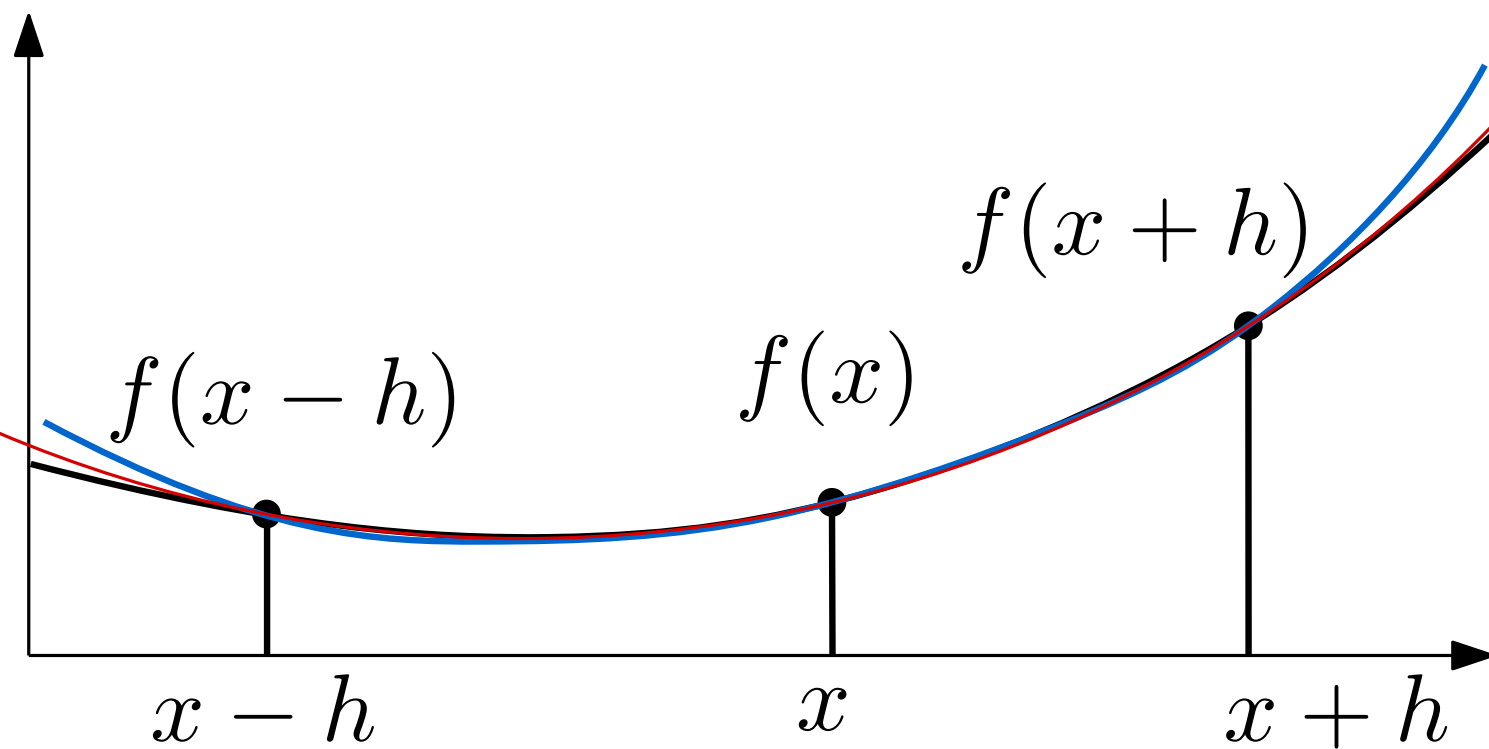


► Calculamos el polinomio cúbico interpolador y lo derivamos dos veces.

Es más fácil si centramos en 0 (la segunda derivada es constante).

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

Derivada segunda: fórmula centrada para $f''(x)$



► Calculamos el polinomio cúbico interpolador y lo derivamos dos veces.

Es más fácil si centramos en 0 (la segunda derivada es constante).

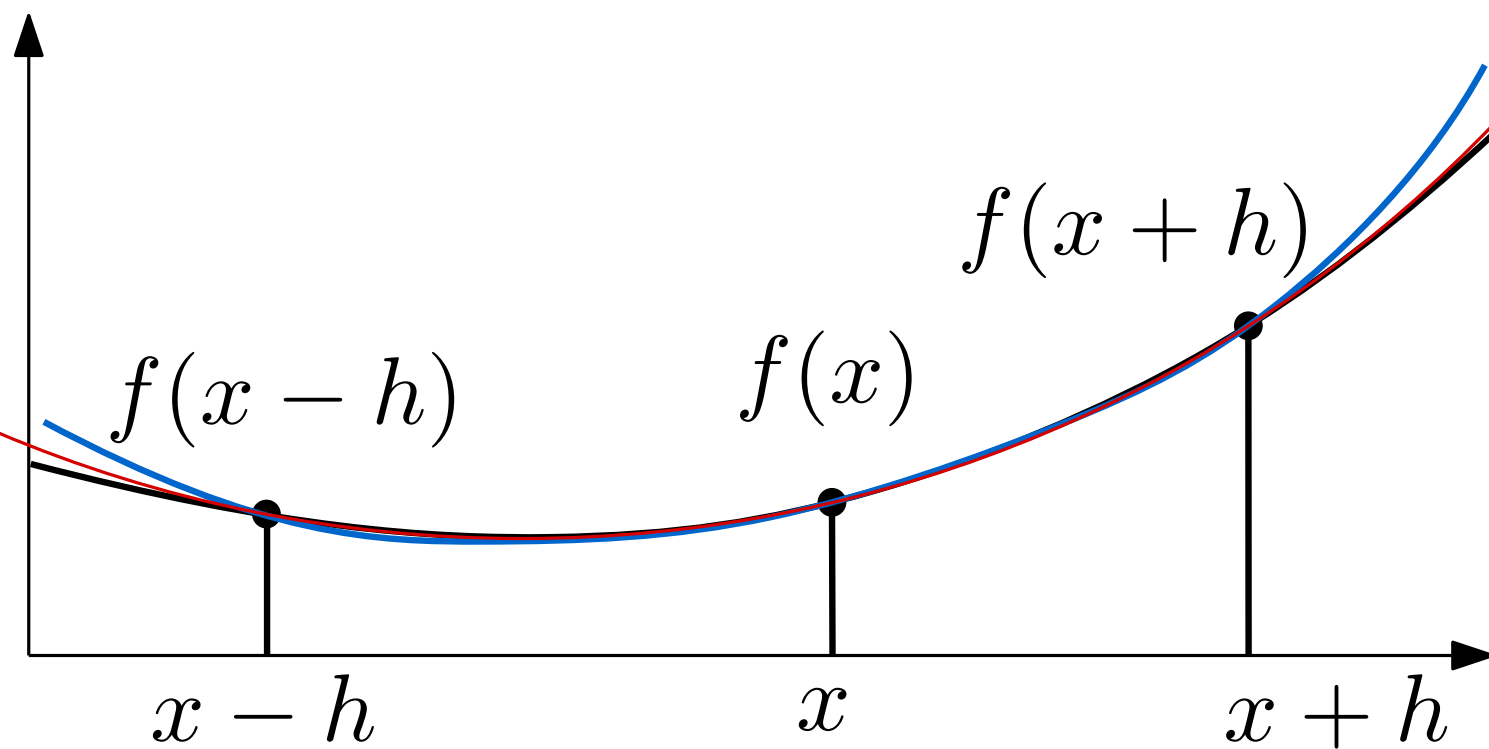
$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

► Error:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(\xi_+)h^4 \quad \text{con } x \leq \xi_+ \leq x+h.$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(\xi_-)h^4 \quad \text{con } x-h \leq \xi_- \leq x.$$

Derivada segunda: fórmula centrada para $f''(x)$



► Calculamos el polinomio cúbico interpolador y lo derivamos dos veces.

Es más fácil si centramos en 0 (la segunda derivada es constante).

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

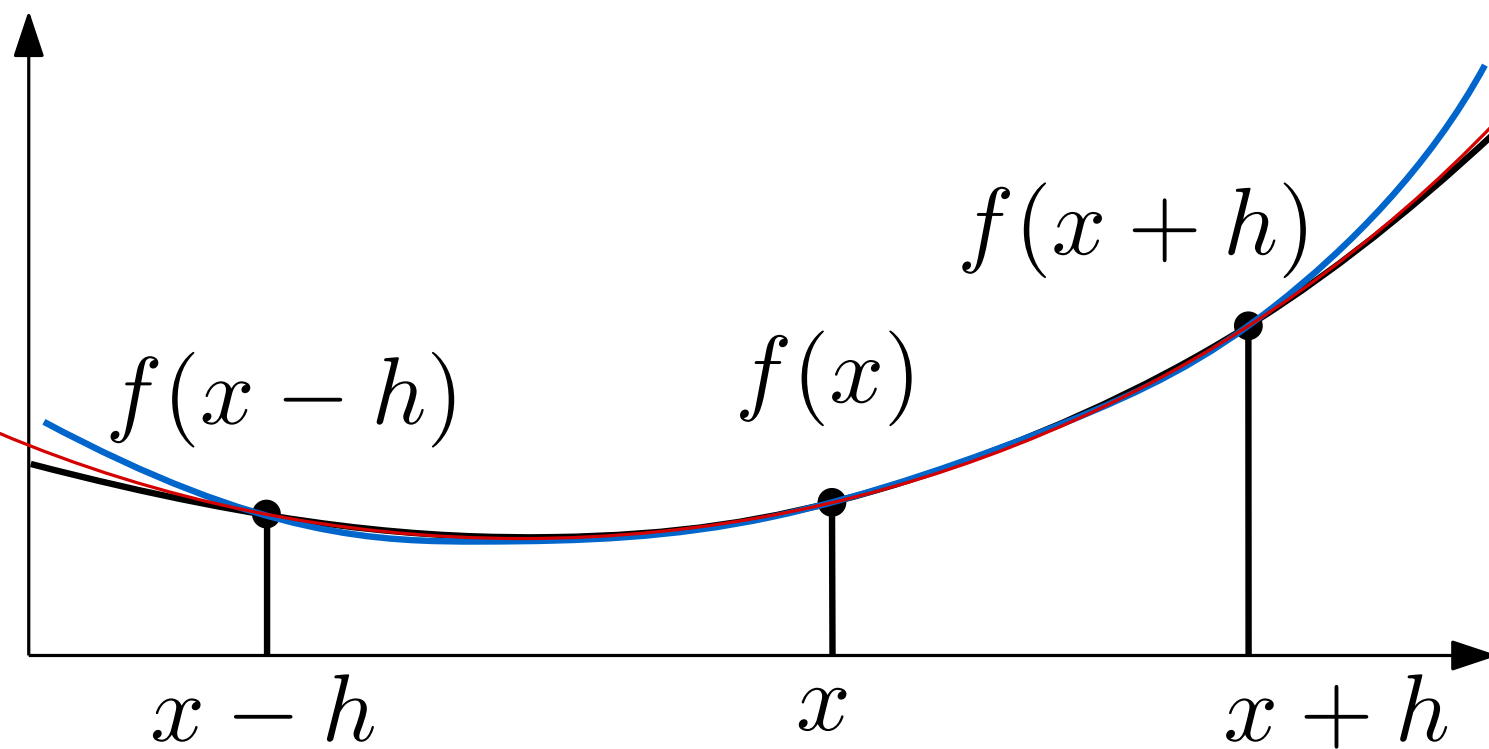
► Error:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(\xi_+)h^4 \quad \text{con } x \leq \xi_+ \leq x+h.$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(\xi_-)h^4 \quad \text{con } x-h \leq \xi_- \leq x.$$

$$\text{Sumando y aplicando el TVI: } f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{1}{12}f^{(iv)}(\xi)h^2. \\ \text{con } x-h \leq \xi \leq x+h.$$

Derivada segunda: fórmula centrada para $f''(x)$



► Calculamos el polinomio cúbico interpolador y lo derivamos dos veces.

Es más fácil si centramos en 0 (la segunda derivada es constante).

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

► Error:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(\xi_+)h^4 \quad \text{con } x \leq \xi_+ \leq x+h.$$

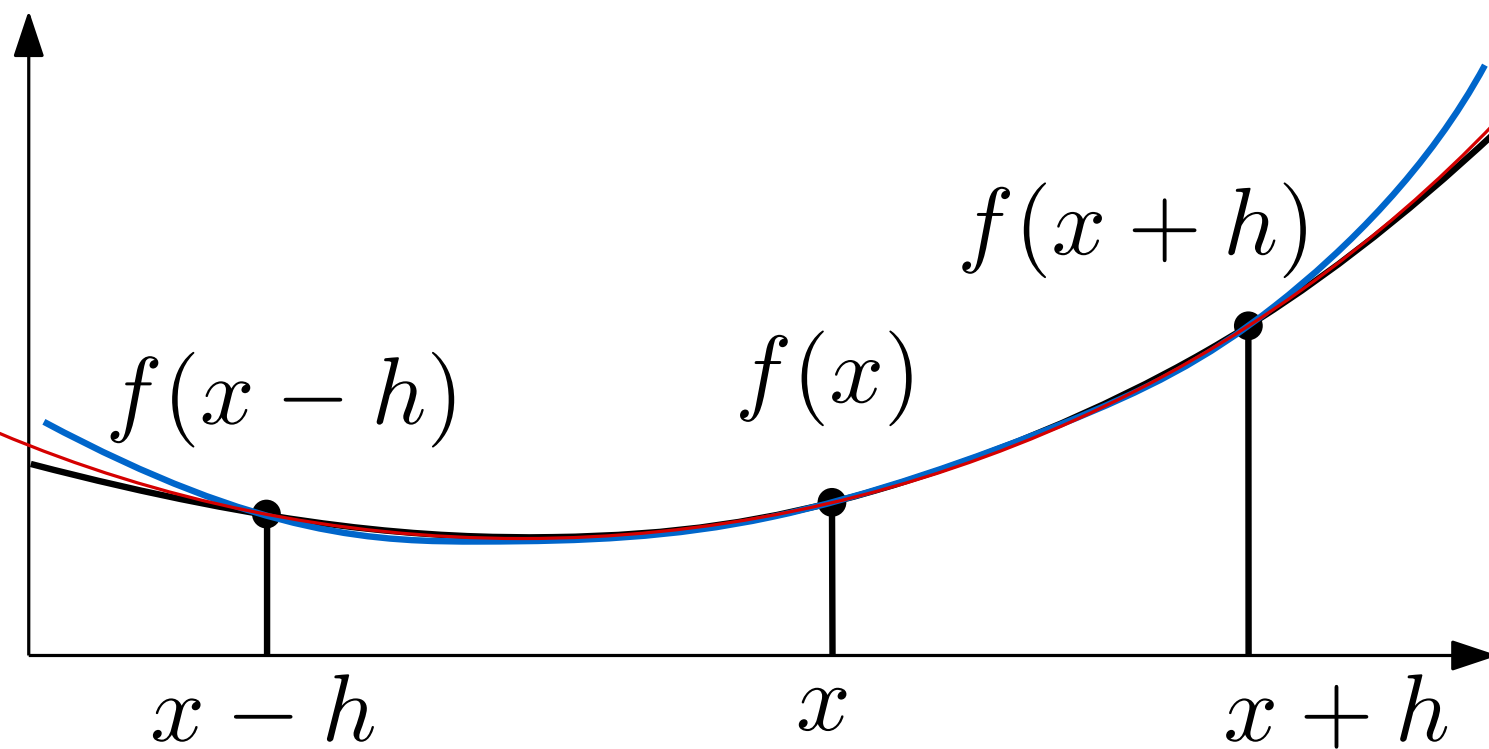
$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(\xi_-)h^4 \quad \text{con } x-h \leq \xi_- \leq x.$$

$$\text{Sumando y aplicando el TVI: } f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{1}{12}f^{(iv)}(\xi)h^2.$$

Es de orden $\mathcal{O}(h^2)$.

con $x-h \leq \xi \leq x+h$.

Derivada segunda: fórmula centrada para $f''(x)$



► Calculamos el polinomio cúbico interpolador y lo derivamos dos veces.

Es más fácil si centramos en 0 (la segunda derivada es constante).

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

► Error:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(\xi_+)h^4 \quad \text{con } x \leq \xi_+ \leq x+h.$$

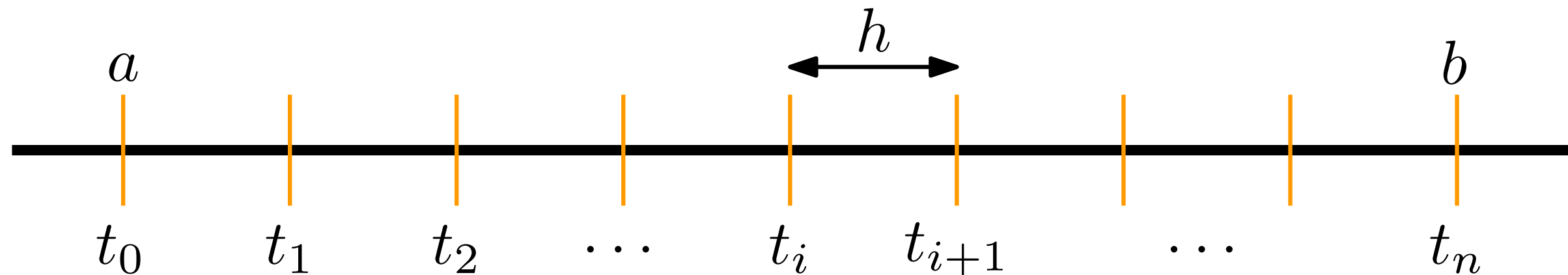
$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(\xi_-)h^4 \quad \text{con } x-h \leq \xi_- \leq x.$$

Fórmulas y derivadas de orden superior

Discretización

Generalmente se divide el intervalo donde se calcula en puntos equiespaciados: dado n tomamos

$$t_i = a + ih, \text{ para } i = 0, 1, 2, \dots, n, \text{ con } h = t_i - t_{i-1} = \frac{b-a}{n}.$$



Los métodos nos permitirán encontrar la derivada aproximada en $f'_i \simeq f'(t_i)$ en los puntos del dominio.

Fórmulas derivada primera

Dado h , sean $x_k = x_0 + kh$, y $f_k = f(x_k)$, para $k \in \mathbb{Z}$.

$$\text{► } f'(x_0) = \frac{f_1 - f_0}{h} + O(h) \quad f'(x_0) = \frac{f_0 - f_{-1}}{h} + O(h)$$

$$\text{► } f'(x_0) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + O(h^2)$$

$$\text{► } f'(x_0) = \frac{-3f_0 + 4f_1 - f_2}{2h} + O(h^2)$$

$$f'(x_0) = \frac{3f_0 - 4f_{-1} + f_{-2}}{2h} + O(h^2)$$

$$\text{► } f'(x_0) = \frac{-f_2 + 8f_1 - 8f_{-1} + f_{-2}}{12h} + O(h^4)$$

Fórmulas derivada segunda

$$\blacktriangleright f''(x_0) = \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{h^2} + O(h)$$

$$\blacktriangleright f''(x_0) = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} + O(h^2)$$

$$\blacktriangleright f''(x_0) = \frac{-f_3 + 4f_2 - 5f_1 + 2f_0}{h^2} + O(h^2)$$

$$\blacktriangleright f''(x_0) = \frac{-f_2 + 16f_1 - 30f_0 + 16f_{-1} - f_{-2}}{12h^2} + O(h^4)$$

Fórmulas derivadas orden superior

$$\blacktriangleright f'''(x_0) = \frac{f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0}{h^3} + O(h)$$

$$\blacktriangleright f'''(x_0) = \frac{f_2 - 2f_1 + 2f_{-1} - f_{-2}}{8h^3} + O(h^2)$$

$$\blacktriangleright f^{(4)}(x_0) = \frac{f_2 - 4f_1 + 6f_0 - 4f_{-1} + f_{-2}}{h^4} + O(h^2)$$

Derivadas parciales

Derivadas parciales primeras $u(x, y)$

Para una función de dos variables de la que solo se conocen los valores en la malla equiespaciada:

$$u_{ij} = u(x_i, y_j), \quad 1 \leq i \leq n, \quad 1 \leq j \leq m,$$

con $h = x_{i+1} - x_i$ y $k = y_{i+1} - y_i$, las fórmulas centradas para las derivadas primeras son:

$$u_x(x_i, y_j) = \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i+1j} - u_{i-1j}}{2h}$$

$$u_y(x_i, y_j) = \frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{ij+1} - u_{ij-1}}{2k}$$

Derivadas parciales segundas $u(x, y)$

Las fórmulas centradas para las derivadas segundas son:

$$u_{xx}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i+1j} - 2u_{ij} + u_{i-1j}}{h^2}$$

$$u_{yy}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{ij+1} - 2u_{ij} + u_{ij-1}}{k^2}$$

$$u_{xy}(x_{ij}, y_{ij}) \approx \frac{u_{i+1j+1} - u_{i+1j-1} - u_{i-1j+1} + u_{i-1j-1}}{4hk}$$

donde $h = x_{i+1} - x_i$ para $1 \leq i \leq n$, y $k = y_{j+1} - y_j$ para $1 \leq j \leq m$.

Comportamiento del error

Comportamiento del error

La aparición en muchas fórmulas de diferencias de cantidades muy cercanas, con la correspondiente cancelación de términos, sugiere que tomar pasos de derivación h muy pequeños no mejorará las aproximaciones numéricas.

Es necesario prestar atención a los **errores de redondeo** que aparecen.

Observación para la fórmula forward

$$\left| f'(x_0) - \frac{\tilde{f}(x_0 + h) - \tilde{f}(x_0)}{h} \right| \leq \frac{2\varepsilon}{h} + \frac{1}{2}Kh, \quad |f''| < K,$$

donde ε es el épsilon de la máquina. Una estimación del paso óptimo es el que minimiza el error total se obtiene **minimizando** esta cota de error:

$$\Rightarrow h_{opt} \approx \left(\frac{4\varepsilon}{K} \right)^{1/2}.$$

Extrapolación de Richardson

Extrapolación de Richardson: intuición

- ▶ Al calcular los términos del error de la fórmula centrada solo obteníamos términos de orden par, el resto se cancelaban.

Extrapolación de Richardson: intuición

- ▶ Al calcular los términos del error de la fórmula centrada solo obteníamos términos de orden par, el resto se cancelaban.

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)}h^2 + \frac{1}{6} f'''(x)h^3 + \frac{1}{24} \cancel{f^{(iv)}(x)}h^4 + \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^5 + \dots$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)}h^2 - \frac{1}{6} f'''(x)h^3 + \frac{1}{24} \cancel{f^{(iv)}(x)}h^4 - \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^5 + \dots$$

Si restamos las dos igualdades, se obtiene la **fórmula centrada** más el error.

Extrapolación de Richardson: intuición

- ▶ Al calcular los términos del error de la fórmula centrada solo obteníamos términos de orden par, el resto se cancelaban.

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)}h^2 + \frac{1}{6} f'''(x)h^3 + \frac{1}{24} \cancel{f^{(iv)}(x)}h^4 + \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^5 + \dots$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)}h^2 - \frac{1}{6} f'''(x)h^3 + \frac{1}{24} \cancel{f^{(iv)}(x)}h^4 - \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^5 + \dots$$

Si restamos las dos igualdades, se obtiene la **fórmula centrada** más el error.

- ▶ Vamos a usarlo. Definimos $D_2(f, x, h) = D_2(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$.

Extrapolación de Richardson: intuición

- ▶ Al calcular los términos del error de la fórmula centrada solo obteníamos términos de orden par, el resto se cancelaban.

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)}h^2 + \frac{1}{6} f'''(x)h^3 + \frac{1}{24} \cancel{f^{(iv)}(x)}h^4 + \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^5 + \dots$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)}h^2 - \frac{1}{6} f'''(x)h^3 + \frac{1}{24} \cancel{f^{(iv)}(x)}h^4 - \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^5 + \dots$$

Si restamos las dos igualdades, se obtiene la **fórmula centrada** más el error.

- ▶ Vamos a usarlo. Definimos $D_2(f, x, h) = D_2(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$.

$$f'(x) = D_2(h) - \frac{1}{6} f'''(x)h^2 - \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

Extrapolación de Richardson: intuición

- ▶ Al calcular los términos del error de la fórmula centrada solo obteníamos términos de orden par, el resto se cancelaban.

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)}h^2 + \frac{1}{6} f'''(x)h^3 + \frac{1}{24} \cancel{f^{(iv)}(x)}h^4 + \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^5 + \dots$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2} \cancel{f''(x)}h^2 - \frac{1}{6} f'''(x)h^3 + \frac{1}{24} \cancel{f^{(iv)}(x)}h^4 - \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^5 + \dots$$

Si restamos las dos igualdades, se obtiene la **fórmula centrada** más el error.

- ▶ Vamos a usarlo. Definimos $D_2(f, x, h) = D_2(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$.

$$f'(x) = D_2(h) - \frac{1}{6} f'''(x)h^2 - \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

$$f'(x) = D_2\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{6} f'''(x)\frac{h^2}{4} - \frac{1}{120} f^{(v)}(x)\frac{h^4}{16} + \mathcal{O}(h^6).$$

Extrapolación de Richardson: intuición

- ▶ Al calcular los términos del error de la fórmula centrada solo obteníamos términos de orden par, el resto se cancelaban.

Con el teorema de Taylor (con resto de Lagrange):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2} f''(x)h^2 + \frac{1}{6} f'''(x)h^3 + \frac{1}{24} f^{(iv)}(x)h^4 + \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^5 + \dots$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2} f''(x)h^2 - \frac{1}{6} f'''(x)h^3 + \frac{1}{24} f^{(iv)}(x)h^4 - \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^5 + \dots$$

Si restamos las dos igualdades, se obtiene la **fórmula centrada** más el error.

- ▶ Vamos a usarlo. Definimos $D_2(f, x, h) = D_2(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$.

$$f'(x) = D_2(h) - \frac{1}{6} f'''(x)h^2 - \frac{1}{120} f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

$$f'(x) = D_2\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{6} f'''(x) \frac{h^2}{4} - \frac{1}{120} f^{(v)}(x) \frac{h^4}{16} + \mathcal{O}(h^6). \quad \frac{1}{4} \text{ del error}$$

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^2)$ a orden $O(h^4)$

• ~~1~~ $f'(x) = D_2(h) - \frac{1}{6}f'''(x)h^2 - \frac{1}{120}f^{(5)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$

• 4 $f'(x) = D_2(\frac{h}{2}) - \frac{1}{6}f'''(x)\frac{h^2}{4} - \frac{1}{120}f^{(5)}(x)\frac{h^4}{16} + \mathcal{O}(h^6).$

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^2)$ a orden $O(h^4)$

$$\cdot - 1 \quad f'(x) = D_2(h) - \cancel{\frac{1}{6}f'''(x)h^2} - \frac{1}{120}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

$$\cdot 4 \quad f'(x) = D_2\left(\frac{h}{2}\right) - \cancel{\frac{1}{6}f'''(x)\frac{h^2}{4}} - \frac{1}{120}f^{(v)}(x)\frac{h^4}{16} + \mathcal{O}(h^6).$$

$$4f'(x) - f'(x) = 4D_2\left(\frac{h}{2}\right) - D_2(h) + \frac{1}{160}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^2)$ a orden $O(h^4)$

$$\cdot - 1 \quad f'(x) = D_2(h) - \cancel{\frac{1}{6}f'''(x)h^2} - \frac{1}{120}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

$$\cdot 4 \quad f'(x) = D_2\left(\frac{h}{2}\right) - \cancel{\frac{1}{6}f'''(x)\frac{h^2}{4}} - \frac{1}{120}f^{(v)}(x)\frac{h^4}{16} + \mathcal{O}(h^6).$$

$$4f'(x) - f'(x) = 4D_2\left(\frac{h}{2}\right) - D_2(h) + \frac{1}{160}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

$$f'(x) = \frac{4D_2\left(\frac{h}{2}\right) - D_2(h)}{3} + \frac{1}{480}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^2)$ a orden $O(h^4)$

$$\cdot - 1 \quad f'(x) = D_2(h) - \cancel{\frac{1}{6}f'''(x)h^2} - \frac{1}{120}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

$$\cdot 4 \quad f'(x) = D_2\left(\frac{h}{2}\right) - \cancel{\frac{1}{6}f'''(x)\frac{h^2}{4}} - \frac{1}{120}f^{(v)}(x)\frac{h^4}{16} + \mathcal{O}(h^6).$$

$$4f'(x) - f'(x) = 4D_2\left(\frac{h}{2}\right) - D_2(h) + \frac{1}{160}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

$$f'(x) = \frac{4D_2\left(\frac{h}{2}\right) - D_2(h)}{3} + \frac{1}{480}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

A partir de la combinación lineal de dos aproximaciones de orden $\mathcal{O}(h^2)$,
¡tenemos una aproximación de orden $\mathcal{O}(h^4)$!

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^2)$ a orden $O(h^4)$

$$\cdot - 1 \quad f'(x) = D_2(h) - \cancel{\frac{1}{6}f'''(x)h^2} - \frac{1}{120}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

$$\cdot 4 \quad f'(x) = D_2\left(\frac{h}{2}\right) - \cancel{\frac{1}{6}f'''(x)\frac{h^2}{4}} - \frac{1}{120}f^{(v)}(x)\frac{h^4}{16} + \mathcal{O}(h^6).$$

$$4f'(x) - f'(x) = 4D_2\left(\frac{h}{2}\right) - D_2(h) + \frac{1}{160}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

$$f'(x) = \frac{4D_2\left(\frac{h}{2}\right) - D_2(h)}{3} + \frac{1}{480}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

A partir de la combinación lineal de dos aproximaciones de orden $\mathcal{O}(h^2)$,
¡tenemos una aproximación de orden $\mathcal{O}(h^4)$!

► El resultado es una fórmula de orden $O(h^4)$:

$$f'(x) \approx \frac{-f(x+2h) + 8f(x+h) - 8f(x-h) + f(x-2h)}{12h}$$

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^2)$ a orden $O(h^4)$

$$\cdot - 1 \quad f'(x) = D_2(h) - \cancel{\frac{1}{6}f'''(x)h^2} - \frac{1}{120}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

$$\cdot 4 \quad f'(x) = D_2\left(\frac{h}{2}\right) - \cancel{\frac{1}{6}f'''(x)\frac{h^2}{4}} - \frac{1}{120}f^{(v)}(x)\frac{h^4}{16} + \mathcal{O}(h^6).$$

$$4f'(x) - f'(x) = 4D_2\left(\frac{h}{2}\right) - D_2(h) + \frac{1}{160}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

$$f'(x) = \frac{4D_2\left(\frac{h}{2}\right) - D_2(h)}{3} + \frac{1}{480}f^{(v)}(x)h^4 + \mathcal{O}(h^6).$$

A partir de la combinación lineal de dos aproximaciones de orden $\mathcal{O}(h^2)$,
¡tenemos una aproximación de orden $\mathcal{O}(h^4)$!

► El resultado es una fórmula de orden $O(h^4)$:

$$f'(x) \approx \frac{-f(x+2h) + 8f(x+h) - 8f(x-h) + f(x-2h)}{12h}$$

¿Podemos repetir esto?

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^n)$ a orden $O(h^{n+2})$

- Supongamos que estamos aproximando una función g con una fórmula F .

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^n)$ a orden $O(h^{n+2})$

- ▶ Supongamos que estamos aproximando una función g con una fórmula F .
- ▶ Supongamos que el error de F es $Kh^n + \mathcal{O}(h^{n+2})$:

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^n)$ a orden $O(h^{n+2})$

- ▶ Supongamos que estamos aproximando una función g con una fórmula F .
- ▶ Supongamos que el error de F es $Kh^n + \mathcal{O}(h^{n+2})$:

$$g = F(h) + Kh^n + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

$$g = F\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2^n}Kh^n + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^n)$ a orden $O(h^{n+2})$

- ▶ Supongamos que estamos aproximando una función g con una fórmula F .
- ▶ Supongamos que el error de F es $Kh^n + \mathcal{O}(h^{n+2})$:

$$g = F(h) + \cancel{Kh^n} + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

$$g = F\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2^n} \cancel{Kh^n} + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

- ▶ Restamos la primera ecuación a 2^n veces la segunda:

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^n)$ a orden $O(h^{n+2})$

- ▶ Supongamos que estamos aproximando una función g con una fórmula F .
- ▶ Supongamos que el error de F es $Kh^n + \mathcal{O}(h^{n+2})$:

$$g = F(h) + \cancel{Kh^n} + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

$$g = F\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2^n} \cancel{Kh^n} + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

- ▶ Restamos la primera ecuación a 2^n veces la segunda:

$$2^n g - g = 2^n F\left(\frac{h}{2}\right) - F(h) + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^n)$ a orden $O(h^{n+2})$

- ▶ Supongamos que estamos aproximando una función g con una fórmula F .
- ▶ Supongamos que el error de F es $Kh^n + \mathcal{O}(h^{n+2})$:

$$g = F(h) + \cancel{Kh^n} + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

$$g = F\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2^n} \cancel{Kh^n} + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

- ▶ Restamos la primera ecuación a 2^n veces la segunda:

$$2^n g - g = 2^n F\left(\frac{h}{2}\right) - F(h) + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

$$g = \frac{2^n F\left(\frac{h}{2}\right) - F(h)}{2^n - 1} + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

Extrapolación de Richardson: de orden $O(h^n)$ a orden $O(h^{n+2})$

- ▶ Supongamos que estamos aproximando una función g con una fórmula F .
- ▶ Supongamos que el error de F es $Kh^n + \mathcal{O}(h^{n+2})$:

$$g = F(h) + \cancel{Kh^n} + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

$$g = F\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2^n} \cancel{Kh^n} + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

- ▶ Restamos la primera ecuación a 2^n veces la segunda:

$$2^n g - g = 2^n F\left(\frac{h}{2}\right) - F(h) + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

$$g = \frac{2^n F\left(\frac{h}{2}\right) - F(h)}{2^n - 1} + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

¡Podemos evitar la cancelación catastrófica! (¿Por qué?)

Tabla de extrapolación derivada primera

$$R_1(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}, \quad R_{j+1}(h) = \frac{4^j R_j\left(\frac{h}{2}\right) - R_j(h)}{4^j - 1}, \quad j \geq 1$$

Tabla de extrapolación derivada primera

$$R_1(h) = \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h}, \quad R_{j+1}(h) = \frac{4^j R_j \left(\frac{h}{2}\right) - R_j(h)}{4^j - 1}, \quad j \geq 1$$

$O(h^2)$	$O(h^4)$	$O(h^6)$	$O(h^8)$
1: $R_{1,1} = R_1(h)$			
2: $R_{2,1} = R_1(h/2)$	3: $R_{2,2} = R_2(h)$		
4: $R_{3,1} = R_1(h/4)$	5: $R_{3,2} = R_2(h/2)$	6: $R_{3,3} = R_3(h)$	
7: $R_{4,1} = R_1(h/8)$	8: $R_{4,2} = R_2(h/4)$	9: $R_{4,3} = R_3(h/2)$	10: $R_{4,4} = R_4(h)$

Tabla de extrapolación derivada primera

$$R_1(h) = \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h}, \quad R_{j+1}(h) = \frac{4^j R_j \left(\frac{h}{2}\right) - R_j(h)}{4^j - 1}, \quad j \geq 1$$

$O(h^2)$	$O(h^4)$	$O(h^6)$	$O(h^8)$
1: $R_{1,1} = R_1(h)$			
2: $R_{2,1} = R_1(h/2)$	3: $R_{2,2} = R_2(h)$		
4: $R_{3,1} = R_1(h/4)$	5: $R_{3,2} = R_2(h/2)$	6: $R_{3,3} = R_3(h)$	
7: $R_{4,1} = R_1(h/8)$	8: $R_{4,2} = R_2(h/4)$	9: $R_{4,3} = R_3(h/2)$	10: $R_{4,4} = R_4(h)$

Ej: $R_{2,2} = \frac{4R_{2,1} - R_{1,1}}{3}; \quad R_{4,3} = \frac{16R_{4,2} - R_{3,2}}{15}.$

Tabla de extrapolación derivada primera

$$R_1(h) = \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h}, \quad R_{j+1}(h) = \frac{4^j R_j \left(\frac{h}{2}\right) - R_j(h)}{4^j - 1}, \quad j \geq 1$$

$O(h^2)$	$O(h^4)$	$O(h^6)$	$O(h^8)$
1: $R_{1,1} = R_1(h)$			
2: $R_{2,1} = R_1(h/2)$	3: $R_{2,2} = R_2(h)$		
4: $R_{3,1} = R_1(h/4)$	5: $R_{3,2} = R_2(h/2)$	6: $R_{3,3} = R_3(h)$	
7: $R_{4,1} = R_1(h/8)$	8: $R_{4,2} = R_2(h/4)$	9: $R_{4,3} = R_3(h/2)$	10: $R_{4,4} = R_4(h)$

Ej: $R_{2,2} = \frac{4R_{2,1} - R_{1,1}}{3}; \quad R_{4,3} = \frac{16R_{4,2} - R_{3,2}}{15}.$

$$R_{i,j} = \frac{4^{j-1} R_{i,j-1} - R_{i-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}$$

Tabla de extrapolación derivada primera

$$R_1(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}, \quad R_{j+1}(h) = \frac{4^j R_j\left(\frac{h}{2}\right) - R_j(h)}{4^j - 1}, \quad j \geq 1$$

$O(h^2)$	$O(h^4)$	$O(h^6)$	$O(h^8)$
1: $R_{1,1} = R_1(h)$			
2: $R_{2,1} = R_1(h/2)$	3: $R_{2,2} = R_2(h)$		
4: $R_{3,1} = R_1(h/4)$	5: $R_{3,2} = R_2(h/2)$	6: $R_{3,3} = R_3(h)$	
7: $R_{4,1} = R_1(h/8)$	8: $R_{4,2} = R_2(h/4)$	9: $R_{4,3} = R_3(h/2)$	10: $R_{4,4} = R_4(h)$

Ej: $R_{2,2} = \frac{4R_{2,1} - R_{1,1}}{3}; \quad R_{4,3} = \frac{16R_{4,2} - R_{3,2}}{15}.$

$R_{i,j} = \frac{4^{j-1} R_{i,j-1} - R_{i-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}$

Mejor aproximación

Tabla de extrapolación derivada primera

$$R_1(h) = \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h}, \quad R_{j+1}(h) = \frac{4^j R_j \left(\frac{h}{2}\right) - R_j(h)}{4^j - 1}, \quad j \geq 1$$

$O(h^2)$	$O(h^4)$	$O(h^6)$	$O(h^8)$
1: $R_{1,1} = R_1(h)$			
2: $R_{2,1} = R_1(h/2)$	3: $R_{2,2} = R_2(h)$		
4: $R_{3,1} = R_1(h/4)$	5: $R_{3,2} = R_2(h/2)$	6: $R_{3,3} = R_3(h)$	
7: $R_{4,1} = R_1(h/8)$	8: $R_{4,2} = R_2(h/4)$	9: $R_{4,3} = R_3(h/2)$	10: $R_{4,4} = R_4(h)$

Ej: $R_{2,2} = \frac{4R_{2,1} - R_{1,1}}{3}; \quad R_{4,3} = \frac{16R_{4,2} - R_{3,2}}{15}.$

$$R_{i,j} = \frac{4^{j-1} R_{i,j-1} - R_{i-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}$$

En general: muy buenos resultados.

Mejor aproximación

Tabla de extrapolación derivada primera

$$R_1(h) = \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h}, \quad R_{j+1}(h) = \frac{4^j R_j \left(\frac{h}{2}\right) - R_j(h)}{4^j - 1}, \quad j \geq 1$$

$O(h^2)$	$O(h^4)$	$O(h^6)$	$O(h^8)$
1: $R_{1,1} = R_1(h)$			
2: $R_{2,1} = R_1(h/2)$	3: $R_{2,2} = R_2(h)$		
4: $R_{3,1} = R_1(h/4)$	5: $R_{3,2} = R_2(h/2)$	6: $R_{3,3} = R_3(h)$	
7: $R_{4,1} = R_1(h/8)$	8: $R_{4,2} = R_2(h/4)$	9: $R_{4,3} = R_3(h/2)$	10: $R_{4,4} = R_4(h)$

Ej: $R_{2,2} = \frac{4R_{2,1} - R_{1,1}}{3}; \quad R_{4,3} = \frac{16R_{4,2} - R_{3,2}}{15}.$

$$R_{i,j} = \frac{4^{j-1} R_{i,j-1} - R_{i-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}$$

En general: muy buenos resultados. Mejor aproximación

- Se puede usar la extrapolación de Richardson para otras fórmulas y para derivadas de orden superior.

Derivación espectral con la FFT

Derivar usando la FFT

- ▶ Es un método eficiente y preciso.

Derivar usando la FFT

- ▶ Es un método **eficiente y preciso**.
- ▶ La transformada de Fourier de la derivada $f'(t)$ es fácil de calcular a partir de la transformada de Fourier de $f(t)$.

Derivar usando la FFT

- ▶ Es un método **eficiente y preciso**.
- ▶ La transformada de Fourier de la derivada $f'(t)$ es fácil de calcular a partir de la transformada de Fourier de $f(t)$.

$$\mathcal{F}\left(\frac{df}{dt}\right) = i2\pi \omega \cdot \hat{\mathbf{f}}$$

Vector con las frecuencias de los armónicos
(asumimos en Hz, multiplicamos fuera por 2π).

Transformada de Fourier de f .

$$\hat{f}_k = \int_{t_0}^{t_0+T} f(t) e^{-2\pi i \omega_k t} dt$$

Derivar usando la FFT

- ▶ Es un método **eficiente y preciso**.
- ▶ La transformada de Fourier de la derivada $f'(t)$ es fácil de calcular a partir de la transformada de Fourier de $f(t)$.

$$\mathcal{F}\left(\frac{df}{dt}\right) = i2\pi \omega \cdot \hat{\mathbf{f}}$$

Vector con las frecuencias de los armónicos
(asumimos en Hz, multiplicamos fuera por 2π).

Transformada de Fourier de f .

$$\hat{f}_k = \int_{t_0}^{t_0+T} f(t) e^{-2\pi i \omega_k t} dt$$
$$\mathcal{F}\left(\frac{df}{dx}\right) = \widehat{\mathbf{d}\mathbf{f}} \quad \widehat{df}_k = \int_{t_0}^{t_0+T} \underbrace{\frac{df(t)}{dt}}_{dv} \underbrace{e^{-2\pi i \omega_k t}}_u dt$$

Derivar usando la FFT

- ▶ Es un método **eficiente y preciso**.
- ▶ La transformada de Fourier de la derivada $f'(t)$ es fácil de calcular a partir de la transformada de Fourier de $f(t)$.

$$\mathcal{F}\left(\frac{df}{dt}\right) = i2\pi \omega \cdot \hat{\mathbf{f}}$$

Vector con las frecuencias de los armónicos (asumimos en Hz, multiplicamos fuera por 2π).

Transformada de Fourier de f .

$$\hat{f}_k = \int_{t_0}^{t_0+T} f(t) e^{-2\pi i \omega_k t} dt$$

$$\mathcal{F}\left(\frac{df}{dx}\right) = \widehat{\mathbf{d}f}$$

$$\widehat{df}_k = \int_{t_0}^{t_0+T} \underbrace{\frac{df(t)}{dt}}_{dv} \underbrace{e^{-2\pi i \omega_k t}}_u dt$$

$$= \underbrace{f(t)}_v \underbrace{e^{-2\pi i \omega_k t}}_u \Big|_{t_0}^{t_0+T} - \int_{t_0}^{t_0+T} \underbrace{f(t)}_v \underbrace{(-i2\pi \omega_k) e^{-2\pi i \omega_k t}}_{du} dt$$

Derivar usando la FFT

- ▶ Es un método **eficiente y preciso**.
- ▶ La transformada de Fourier de la derivada $f'(t)$ es fácil de calcular a partir de la transformada de Fourier de $f(t)$.

$$\mathcal{F}\left(\frac{df}{dt}\right) = i2\pi \omega \cdot \hat{\mathbf{f}}$$

Vector con las frecuencias de los armónicos (asumimos en Hz, multiplicamos fuera por 2π).

Transformada de Fourier de f .

$$\hat{f}_k = \int_{t_0}^{t_0+T} f(t) e^{-2\pi i \omega_k t} dt$$

$$\mathcal{F}\left(\frac{df}{dx}\right) = \widehat{\mathbf{df}}$$

$$\widehat{df}_k = \int_{t_0}^{t_0+T} \underbrace{\frac{df(t)}{dt}}_{dv} \underbrace{e^{-2\pi i \omega_k t}}_u dt$$

$$= \underbrace{f(t)}_v \underbrace{e^{-2\pi i \omega_k t}}_u \Big|_{t_0}^{t_0+T} - \int_{t_0}^{t_0+T} \underbrace{f(t)}_v \underbrace{(-i2\pi \omega_k) e^{-2\pi i \omega_k t}}_{du} dt$$

$i2\pi \omega_k \hat{f}_k$

Derivar usando la FFT

- ▶ Es un método **eficiente y preciso**.
- ▶ La transformada de Fourier de la derivada $f'(t)$ es fácil de calcular a partir de la transformada de Fourier de $f(t)$.

$$\mathcal{F}\left(\frac{df}{dt}\right) = i2\pi \omega \cdot \hat{f}$$

Vector con las frecuencias de los armónicos
(asumimos en Hz, multiplicamos fuera por 2π).

Transformada de Fourier de f .

Estrategia:

- ▶ Calcular la FFT de f .
- ▶ Calcular ω .
- ▶ Fórmula:
transformada de
Fourier de f' .
- ▶ Invertirla con iFFT.

Derivar usando la FFT

- ▶ Es un método **eficiente y preciso**.
- ▶ La transformada de Fourier de la derivada $f'(t)$ es fácil de calcular a partir de la transformada de Fourier de $f(t)$.

$$\mathcal{F}\left(\frac{df}{dt}\right) = i2\pi \omega \cdot \hat{f}$$

Vector con las frecuencias de los armónicos (asumimos en Hz, multiplicamos fuera por 2π).

Transformada de Fourier de f .

Estrategia:

- ▶ Calcular la FFT de f .
- ▶ Calcular ω .
- ▶ Fórmula:
transformada de Fourier de f' .
- ▶ Invertirla con iFFT.

Derivamos la función $\cos^5(t) = \frac{10 \cos(t) + 5 \cos(3t) + \cos(5t)}{16}$ usando FFT.

```
L = 4*pi;
n = 1000; %Alternativa: dar dt en vez de n
dt = L/n;
t = 0:dt:L; %En la alternativa, calcular n = length(t);
f = cos(t).^5;
fder = -5.*sin(t).*cos(t).^4;
fhat = fft(f); %Usamos FFT
ffun = 1/(dt*n); %frecuencia fundamental en Hz
freqs = ffun*(0:n); %frecuencias en Hz
freqs = fftshift(freqs); %reordena las frecuencias para que coincidan con el orden que usa MATLAB para fft
dfhat = 1i*2*pi*freqs.*fhat; %derivamos
dfFFT = real(ifft(dfhat)); %iFFT y nos quedamos con la parte real, porque sabemos que nuestra derivada es real
plot(t,f,"r")
hold on
plot(t, fder, "b")
plot(t, dfFFT, "cyan--")
hold off
```

Guia de estudio

Libro *Càlcul numèric: teoria i pràctica* de M. Grau Sánchez y M. Noguera Batlle.

- ▶ Conceptos asociados: Capítulo 5, páginas 160–164.

Libro *Cálculo numérico* de M. Grau Sánchez y M. Noguera Batlle.

- ▶ Conceptos asociados: Capítulo 5, páginas 141–145.

Libro *Cálculo científico con MATLAB y Octave* de A. Quarteroni y F. Saleri.

- ▶ Conceptos y ejercicios resueltos: Capítulo 4, páginas 107–109.
- ▶ Problemas y prácticas propuestas: del 4.1 al 4.4.