DIFERENCIACION NUMERICA

El objetivo es obtener numéricamente el valor para la derivada de una función en un punto, conociendo el valor de la función en algunos puntos.
Supondremos que para calcular la derivada en un punto dado conocemos los valores de la función en cualquier punto arbitrariamente próximo a este.

Teorema

Sea la función $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}\ de\ clase\ C^{n-1}$ (o sea continua y con derivadas continuas hasta el orden n-1) en el intervalo [x-h, x+h] y cuya derivada de orden n existe en el intervalo (x-h, x+h). Entonces $\exists\,\xi\in(x-h,x+h)$ tal que:

$$f(x+h)=f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)+\cdots+\frac{h^n}{n!}f^{(n)}(\xi)$$

Propiedad de D'Arboux

Sea $f(x)$ continua en el intervalo cerrado [a, b] y supongamos que $f(a)\le f(b).Entonces\ \forall y\in\big(f(a),f(b)\big)\exists\xi\in[a,b]\quad tal\ que$
$y=f(\xi)$

Diferenciación Numérica

Métodos Directos:

Dada f de clase C-1 sobre el intervalo [x-h, x+h] queremos calcular:

$f'(x)=\lim\limits_{h\to0}\frac{f(x+h)-f(x)}{f}$ Tomamos un h suficientemente pequeño y hacemos la primera estimación de la derivada como:

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

OBSERVACION

Esta aproximación no permite acotar el error cometido.

Si ahora le pedimos a la función que sea de clase C-2 (en general le vamos a pedir que sea de clase C-n) entonces podemos desarrollar en Serie de Taylor hasta el orden 2 como sigue:

$$f\left(x+h\right)= f\left(x\right)+hf^{'}\left(x\right)+\frac{h^{2}}{2}f^{''}\left(\xi\right) \qquad \xi\in\left(x,x+h\right)$$

$$Entonces\ despejando\ obtenemos:$$

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

El termino que resta en el miembro de la derecha tiende a 0 cuando h tiende a 0.

Ejemplo

Evaluar la derivada de $f\left(x\right)=\cos\left(x\right)\ en\ x=\frac{\pi}{4} \quad tomando\ h=0.01$

Observación
El término del error es proporcional al tamaño del paso h.

Veamos si hay formulas mas precisas que hagan que el error sea proporcional a otras potencias de h.

Desarrollemos por Taylor hasta el orden 3 en un entorno de x+h y de x-h, como sigue:

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

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

Entonces si restamos miembro a miembro resulta:

$$f\left(x+h\right)-f\left(x-h\right)=2hf^{'}\left(x\right)+\frac{h^3}{3!}\left[f^{'''}\left(\xi_1\right)-f^{'''}\left(\xi_2\right)\right]$$

$$\Rightarrow\frac{f\left(x+h\right)-f\left(x-h\right)}{2h}-\frac{h^2}{2.3!}\left[f^{'''}\left(\xi_1\right)-f^{'''}\left(\xi_2\right)\right]=f^{'}\left(x\right)$$

$$\Rightarrow\frac{f\left(x+h\right)-f\left(x-h\right)}{2h}-\frac{h^2}{6}f^{'''}\left(\xi\right)=f^{'}\left(x\right)$$

Luego, si aproximamos $f^{'}\left(x\right)$ por la expresión:

$$\frac{f\left(x+h\right)-f\left(x-h\right)}{2h}$$

El error que se comete es del orden de h^2, es decir $O\left(h^2\right)$. Por lo tanto $\left|e_a\right|\leq\frac{h^2}{6}$

<u>Ejercicio</u>.

Evaluar la derivada de $f\left(x\right)=\cos\left(x\right)\ en\ x=\frac{\pi}{4}\quad tomando\ h=0.01$ con la formula descripta anteriormente y comparar el resultado con el obtenido en el ejemplo.

Vamos a calcular ahora la derivada segunda. Desarrollamos igual que antes el polinomio de Taylor hasta el orden 4:

$$f\left(x+h\right)=f\left(x\right)+hf^{'}\left(x\right)+\frac{h^2}{2}f^{''}\left(x\right)+\frac{h^3}{3!}f^{'''}\left(x\right)+\frac{h^4}{4!}f^{(IV)}\left(\xi_1\right)$$

$$f\left(x-h\right)=f\left(x\right)-hf^{'}\left(x\right)+\frac{h^2}{2}f^{''}\left(x\right)-\frac{h^3}{3!}f^{'''}\left(x\right)+\frac{h^4}{4!}f^{(IV)}\left(\xi_2\right)$$

Ahora si sumamos miembro a miembro obtenemos:

$$f(x+h)+f(x-h)=2f(x)+h^2 f''(x)+\frac{h^4}{4!}\left[f^{IV}(\xi_1)+f^{IV}(\xi_2)\right]$$

$$\Rightarrow \textit{Haciendo}\quad \textit{cuentas resulta}:$$

$$f''(x)=\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{IV}(\xi)$$

Entonces si estimamos la derivada segunda con la expresión:

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

Estamos cometiendo un error del orden de h^2 .

<u>Ejercicio</u>

Calcular la derivada tercera y estimar el error

<u>Extrapolación de Richardson</u>

Con este procedimiento trataremos de mejorar las ecuaciones obtenidas anteriormente. Supongamos que $f(x)$ es de clase C^∞ en el intervalo [x-h, x+h], escribimos las series de Taylor en un entorno de x como sigue:

$$f(x+h)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{h^k}{k!}f^{(k)}(x)$$

$$f(x-h)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k h^k}{k!}f^{(k)}(x)$$

Si restamos miembro a miembro obtenemos:

$$f(x+h)-f(x-h)=2hf'(x)+2\frac{h^3}{3!}f'''(x)+2\frac{h^5}{5!}f^{IV}(x)+\cdots$$

$$\Rightarrow f(x+h)-f(x-h)=2h\left[f'(x)+\frac{h^2}{3!}f'''(x)+\frac{h^4}{5!}f^{IV}(x)+\cdots\right]$$

$$\Rightarrow \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}-\left[\frac{h^2}{3!}f'''(x)+\frac{h^4}{5!}f^{IV}(x)+\cdots\right]=f'(x)$$

Entonces definimos:

$$L = \varphi(h) + a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \cdots$$

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

$$a_k = -\frac{f^{(k+1)}(x)}{(k+1)!}$$

$$L = f'(x)$$

La ecuación (1) $L = \varphi(h) + a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \cdots$ da la primera estimación de la derivada usando el método de Richardson

$$L = \psi(h) + b_4h^4 + b_6h^6 + \ldots$$

$$L = \psi(\frac{h}{2}) + b_4\frac{h^4}{16} + b_6\frac{h^6}{64} + \ldots$$

Si evaluamos esta expresión en h/2 obtenemos:

$$L = \varphi\left(\frac{h}{2}\right) + a_2\frac{h^2}{4} + a_4\frac{h^4}{16} + a_6\frac{h^6}{64} + \cdots (2)$$

Ahora multiplicamos la expresión (2) por 4 y le restamos la (1) obteniendo:

$$3L = 4\varphi\left(\frac{h}{2}\right) - \varphi(h) - 3a_4\frac{h^4}{4} - 15a_6\frac{h^6}{16} - \cdots$$

$$Despejando \quad L \quad obtenemos:$$

$$L = \frac{4}{3}\varphi\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3}\varphi(h) - a_4\frac{h^4}{4} - 5a_6\frac{h^6}{16} - \cdots \quad (3)$$

Esto significa que usando una simple combinación de $\varphi(h)$ y de $\varphi\left(\frac{h}{2}\right)$ hemos obtenido una precisión del orden de h^4 que habíamos obtenido usando solo $\varphi(h)$.

Análogamente se puede repetir el proceso tantas veces como se quiera; el siguiente paso definiría:

$$\psi(h) = \tfrac{4}{3}\varphi(\tfrac{h}{2}) - \tfrac{1}{3}\varphi(h)$$

Con lo que la ecuación (3) evaluada en h y en h/2 queda:

$$\begin{aligned} L &= \psi(h) + b_4 h^4 + b_6 h^6 + \ldots \\ L &= \psi(\frac{h}{2}) + b_4 \frac{h^4}{16} + b_6 \frac{h^6}{64} + \ldots \end{aligned}$$

De donde se puede despejar L, multiplicando la segunda ecuación por 16 y restándole la primera obteniendo:

$$L = \frac{16}{15}\psi(\frac{h}{2}) - \frac{1}{15}\psi(h) - b_6 \frac{h^6}{20} - \ldots$$

Que nos dará una estimación de $f'(x)$ con precisión del orden de h^6

Escogiendo un valor apropiado, digamos 1, para h, la repetición del proceso lleva a la siguiente formula general:

$$\begin{aligned} D(n,0) &= L + \mathcal{O}(h^2) \\ D(n,1) &= L + \mathcal{O}(h^4) \\ D(n,2) &= L + \mathcal{O}(h^6) \\ &\ldots \\ D(n,k-1) &= L + \mathcal{O}(h^{2k}) \end{aligned}$$

Siendo:

$$D(n,0) = \varphi(\tfrac{h}{2^n})$$

Y el resto de las cantidades D definidas recursivamente como:

$$D(n,k) = \frac{4^k}{4^k - 1} D(n,k-1) - \frac{1}{4^k - 1} D(n-1,k-1)$$

Es obvio verificar (y queda a cargo del lector) que:

$D(0,0) = \varphi(h),\ D(1,0) = \varphi(\frac{h}{2})$ y $D(1,1) = \psi(h)$.

Finalmente recalquemos que todo esto involucra el conocimiento de f en valores próximos a x, por lo que solo se puede usar este método si dichos valores están disponibles o se pueden calcular sin gran error.

Otra forma de hacer lo mismo

Las funciones pueden estar definidas por datos tabulados, en forma explicita, o mediante curvas determinadas en forma experimental. Un método consiste en aproximar la función en la vecindad del punto en que se desea la derivada, mediante un funciona cuadrática o un polinomio de grado mayor y utilizar entonces la derivada de la función aproximante como la derivada aproximada de la función. Usando como hicimos antes el desarrollo en serie de Taylor para la función y=f(x) la ecuación puede escribirse como:

$$y_i' = \frac{y(x_i + \Delta x) - y(x_i - \Delta x)}{2\Delta x}$$

Que en un grafico se vería así:

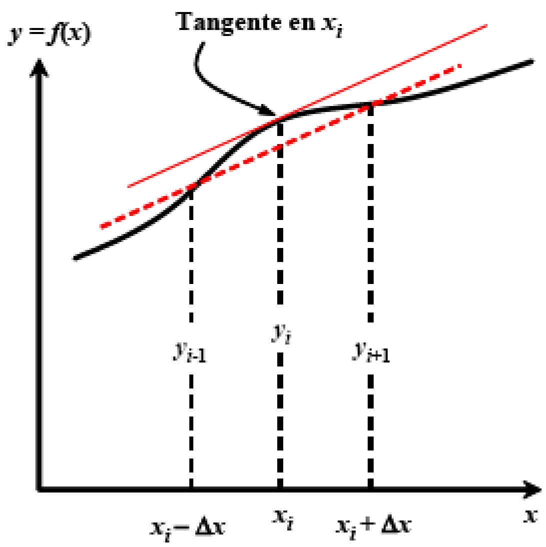

Fig. 1

Observando la figura 1 vemos que si los puntos están equi espaciados a izquierda y a derecha de x_i la ecuación anterior puede escribirse como:

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\Delta x}$$

Esta ecuación se denomina la primera aproximación por ***DIFERENCIAS CENTRALES*** de la derivada y'. La aproximación esta representada por la línea punteada mientras que la derivada real esta representada por la línea llena.

También tenemos, usando esta notación una expresión para la derivada segunda:

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{(\Delta x)^2}$$

Esta ecuación es la primera aproximación por ***DIFERENCIAS CENTRALES,*** de la segunda derivada de la función.

De la misma forma y si resolvió el primer ejercicio podrá comprobar que la derivada tercera se puede escribir como:

$$y_i''' = \frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + 2y_{i-1} - y_{i-2}}{2(\Delta x)^3}$$

Esta ecuación recibe el nombre primera aproximación por ***DIFERENCIAS CENTRALES,*** de la tercera derivada de la función.

En las Diferencias Centrales se usan valores de la función en ambos lados del valor de x en que se desea conocer la derivada en cuestión. Utilizando desarrollos convenientes en series de Taylor, se pueden obtener fácilmente expresiones para las derivadas, completamente en términos de valores de la función en x_i y en puntos a la derecha de x_i. Estas se conocen como expresiones de ***DIFERENCIAS FINITAS HACIA DELANTE.***

En forma similar, se pueden obtener expresiones para las derivadas que estén totalmente en términos de valores de la función en x_i y puntos a la izquierda de x_i. Estas se conocen como expresiones de ***DIFERENCIAS FINITAS HACIA ATRAS.***

En la diferenciación numérica, las expresiones de diferencias hacia delante se utilizan cuando no se dispone de datos a la izquierda del punto en que se desea calcular la derivada, y las expresiones de diferencias hacia atrás, se utilizan cuando no se dispone de datos a la derecha del punto deseado. *Sin embargo, las expresiones de diferencias centrales son mas precisas que cualquiera de las otras dos.*

Resumen de formulas de diferenciación
Expresiones de Primeras Diferencias Centrales

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\Delta x}$$

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{(\Delta x)^2}$$

$$y_i''' = \frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + 2y_{i-1} - y_{i-2}}{2(\Delta x)^3}$$

$$y_i^{IV} = \frac{y_{i+2} - 4y_{i+1} + 6y_i - 4y_{i-1} + y_{i-2}}{(\Delta x)^4}$$

Expresiones de Segundas Diferencias Centrales

$$y_i' = \frac{-y_{i+2} + 8y_{i+1} - 8y_{i-1} + y_{i-2}}{12\Delta x}$$

$$y_i'' = \frac{-y_{i+2} + 16y_{i+1} - 30y_i + 16y_{i-1} - y_{i-2}}{12(\Delta x)^2}$$

$$y_i''' = \frac{-y_{i+3} + 8y_{i+2} - 13y_{i+1} + 13y_{i-1} - 8y_{i-2} + y_{i-3}}{8(\Delta x)^3}$$

$$y_i^{IV} = \frac{-y_{i+3} + 12y_{i+2} - 39y_{i+1} + 56y_i - 39y_{i-1} + 12y_{i-2} - y_{i-3}}{6(\Delta x)^4}$$

Expresiones de Primeras Diferencias Hacia Adelante

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x}$$

$$y_i'' = \frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i}{(\Delta x)^2}$$

$$y_i''' = \frac{y_{i+3} - 3y_{i+2} + 3y_{i+1} - y_i}{2(\Delta x)^3}$$

$$y_i^{IV} = \frac{y_{i+4} - 4y_{i+3} + 6y_{i+2} - 4y_{i+1} + y_i}{(\Delta x)^4}$$

Expresiones de Segundas Diferencias Hacia Adelante

$$y_i' = \frac{-y_{i+2} + 4y_{i+1} - 3y_i}{2\Delta x}$$

$$y_i'' = \frac{-y_{i+3} + 4y_{i+2} - 5y_{i+1} + 2y_i}{(\Delta x)^2}$$

$$y_i''' = \frac{-3y_{i+4} + 14y_{i+3} - 24y_{i+2} + 18y_{i+1} - 5y_i}{2(\Delta x)^3}$$

$$y_i^{IV} = \frac{-2y_{i+5} + 11y_{i+4} - 24y_{i+3} + 26y_{i+2} - 14y_{i+1} + 3y_i}{(\Delta x)^4}$$

Expresiones de Primeras Diferencias Hacia Atrás

$$y_i' = \frac{y_i - y_{i-1}}{\Delta x}$$

$$y_i'' = \frac{y_i - 2y_{i-1} + y_{i-2}}{(\Delta x)^2}$$

$$y_i''' = \frac{y_i - 3y_{i-1} + 3y_{i-2} - y_{i-3}}{2(\Delta x)^3}$$

$$y_i^{IV} = \frac{y_i - 4y_{i-1} + 6y_{i-2} - 4y_{i-3} + y_{i-4}}{(\Delta x)^4}$$

Expresiones de Segundas Diferencias Hacia Atrás

$$y_i' = \frac{3y_i - 4y_{i-1} + 3y_{i-2}}{2\Delta x}$$

$$y_i'' = \frac{2y_i - 5y_{i-1} + 4y_{i-2} - 2y_{i-3}}{(\Delta x)^2}$$

$$y_i''' = \frac{5y_i - 18y_{i-1} + 24y_{i-2} - 14y_{i-3} + 3y_{i-4}}{2(\Delta x)^3}$$

$$y_i^{IV} = \frac{2y_i - 14y_{i-1} + 26y_{i-2} - 24y_{i-3} - 11y_{i-4} - 2y_{i-5}}{(\Delta x)^4}$$

Ejercicios

1-Use aproximaciones de Diferencias Finitas Hacia Adelante, Hacia Atrás y Centradas para la primera derivada de:

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

En x=0.5

a) Utilizando un tamaño de paso de $\Delta x = h = 0.5$

b) Repetir los cálculos usando $\Delta x = h = 0.25$

Note que la derivada primera puede calcularse analíticamente teniendo la expresión:

$$f'(x) = -0.4x^3 - 0.45x^2 - 1.0x - 0.25$$

Y se puede evaluar en el punto obteniendo:

$$f'(0.5) = -0.9125$$

Indique cual de los cálculos anteriores es mas preciso y justifique su respuesta.

Para $\Delta x = h = 0.5$ la tabla es como sigue:

$x_{i-1} = 0.0$	$y_{i-1} = 1.200$
$x_i = 0.5$	$y_i = 0.925$
$x_{i+1} = 1.0$	$y_{i+1} = 0.200$

2- Las siguientes tablas dan los valores de una determinada función.

x_i	$f(x_i)$
2.00	7.3891
2.05	7.7679
2.10	8.81662
2.15	8.5849
2.20	9.0250
2.25	9.4877

x_i	$f(x_i)$
2.30	9.9742
2.35	10.486
3.40	11.023
2.45	11.588
2.50	12.182

Calcular $f'(2.20)$ y $f''(2.20)$ usando diferencias finitas, usando el método de Extrapolación de Richardson.

Compare los resultados sabiendo que los datos tabulados provienen de la función $f(x) = e^x$