PROGRAMACIÓN Y MÉTODOS NUMÉRICOS
2503506

DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA

Andrés Agudelo
Departamento de Ingeniería Mecánica
andres.agudelos@udea.edu.co

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA
Facultad de Ingeniería

Contenido

Introducción

Derivadas ordinarias

En matemáticas, la diferenciación se realiza mediante la derivada, la cual representa la tasa de cambio de una variable dependiente con respecto a una independiente.

Aproximación en diferencias: $$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x}$$

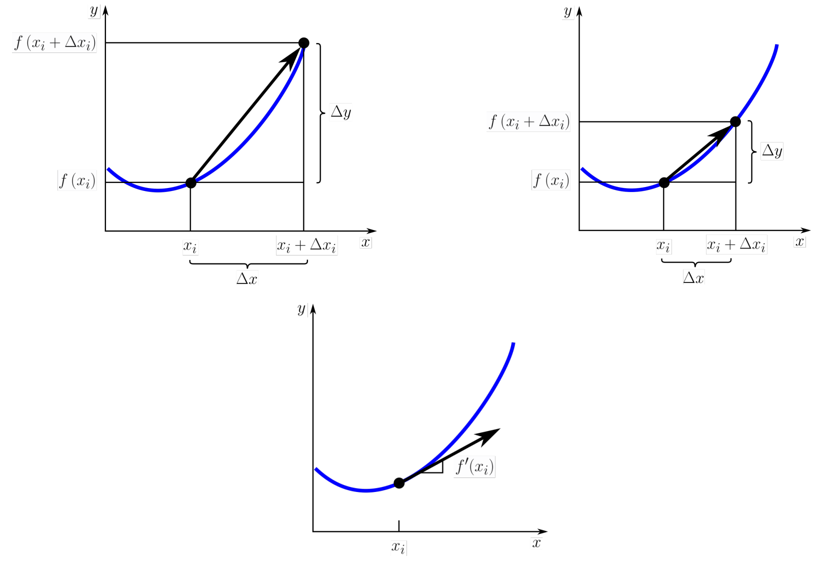
Si se hace que Δx se aproxime a cero, la diferencia se convierte en una derivada:

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x_i} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} = y' = f'(x_i)$$

→ Primera derivada de y respecto a x, evaluada en x_i.

→ Es la pendiente de la línea tangente a la curva $f(x)$ en x_i.

Introducción



Introducción

Derivadas ordinarias

Segunda derivada:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(\frac{dy}{dx}\right)$$

Se escribe también como y'' o $f''(x)$, y expresa la tasa de cambio de la pendiente $\rightarrow$ Curvatura.

Derivadas de orden superior:

$$\frac{d^ny}{dx^n} = \frac{d}{dx}\left(\frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}}\right) = \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}\left(\cdots\left(\frac{d}{dx}\left(\frac{dy}{dx}\right)\right)\right)\right)$$

Se escriben como $y^{(n)}$ ó $f^{(n)}(x)$.

Introducción

Derivadas parciales

Aparecen cuando una función depende de más de una variable. Se pueden considerar como la derivada de una función en un punto en el cual todas las variables se mantienen constantes, excepto una.

Por ejemplo, para una función $f(x,\, y)$, en un punto arbitrario $(x,\, y)$, se tiene que:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x,\, y) - f(x,\, y)}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \lim_{\Delta y \to 0} \frac{f(x,\, y+\Delta y) - f(x,\, y)}{\Delta y}$$

Introducción

Diferenciación numérica

En algunas ocasiones se tienen funciones continuas y sencillas, que se pueden derivar de forma analítica usando las técnicas convencionales del cálculo. Sin embargo, en muchas otras ocasiones esto no es posible:

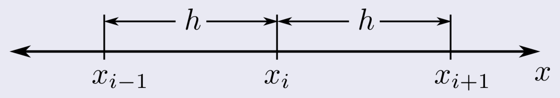
1. Cuando las funciones son complicadas y es difícil o imposible derivarlas de forma analítica.
2. Cuando las variables dependientes y la función están disponibles como datos tabulados (un número de puntos discretos) $\rightarrow$ Común en la práctica de ingeniería.

En estos casos se debe recurrir a métodos aproximados para la solución del problema $\rightarrow$ **Diferenciación numérica**.

Diferencias finitas divididas

Diferencias finitas divididas

La expansión en serie de Taylor de una función $f(x)$ alrededor de un valor x_i depende de la ubicación relativa de x con respecto a x_i:



$$\left\{ \begin{array}{lcl} x > x_i : & x \rightarrow & x_{i+1} \\ x < x_i : & x \rightarrow & x_{i-1} \end{array} \right\} \quad (x_{i-1} < x_i < x_{i+1})$$

Diferencias finitas divididas

Diferencias finitas divididas

Expansión de $f(x)$ en serie de Taylor para x_{i+1}: Hacia adelante

$$\boxed{f(x_{i+1}) = f(x_i) + \frac{f'(x_i)}{1!}h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}h^3 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}h^n + \cdots} \quad (1)$$

Despreciando los términos de orden superior, se tiene:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + O(h)$$

Por lo tanto, despejando la primera derivada, se llega a:

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

$$\Downarrow$$

Diferencia finita dividida hacia adelante

Diferencias finitas divididas

Diferencias finitas divididas

Expansión de $f(x)$ en serie de Taylor para x_{i-1}: Hacia atrás

$$\begin{aligned} f(x_{i-1}) &= f(x_i) + \frac{f'(x_i)}{1!}(x_{i-1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}(x_{i-1} - x_i)^2 + \\ &\quad + \frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}(x_{i-1} - x_i)^3 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(x_{i-1} - x_i)^n + \cdots \end{aligned}$$

Este caso: $x_{i-1} - x_i = -h$:

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

(3)

Diferencias finitas divididas

Diferencias finitas divididas

Si en la ecuación (3) se toma únicamente hasta el término de primer orden, despreciando los términos de orden superior, se tiene:

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

Por lo tanto, despejando la primera derivada, se llega a:

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

$$\Downarrow$$

Diferencia finita dividida hacia atrás

Diferencias finitas divididas

Diferencias finitas divididas

Se puede obtener una aproximación adicional a la primera derivada, que combina las dos aproximaciones anteriores.

$$\boxed{f(x_{i+1}) = f(x_i) + \frac{f'(x_i)}{1!}h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}h^3 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}h^n + \cdots} \quad (1)$$

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

Se toma la ecuación (1) y de ésta se resta la ecuación (3).

Diferencias finitas divididas

Diferencias finitas divididas

Al realizar la resta y organizar términos, se obtiene:

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

De esta expresión se despeja la primera derivada:

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

Por lo tanto, se tiene que:

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

$$\Downarrow$$

Diferencia finita dividida centrada

Diferencias finitas divididas

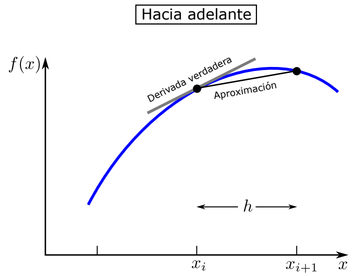
$$\boxed{f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + O(h)} \qquad \boxed{f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + O(h)}$$

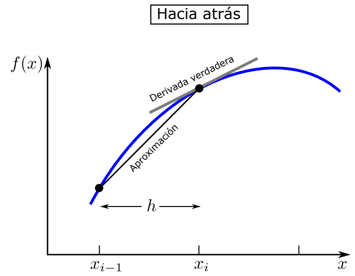
$$\boxed{f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + O(h^2)}$$

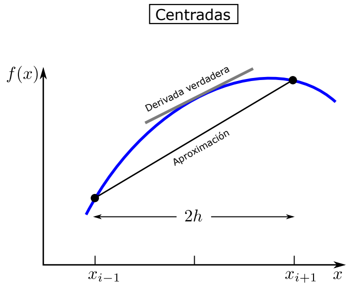
Diferencias finitas divididas

- Hacia adelante y hacia atrás $\rightarrow$ tienen un error de truncamiento del orden de h
  $\Rightarrow$ Si se toma una valor de la mitad de h, el error de truncamiento será de la mitad.
- Centradas $\rightarrow$ tienen un error de truncamiento del orden de h^2
  $\Rightarrow$ Al reducir h a la mitad, el error de truncamiento se reducirá a la cuarta parte.

Diferencias finitas divididas







Diferencias finitas divididas

Ejemplo 1

Dada la siguiente función:

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

Aproxime la primera derivada usando las tres aproximaciones de diferencias finitas divididas en el punto $x = 0.5$, usando $h = 0.5$ y $h = 0.25$. En cada caso calcule el error de truncamiento.

Solución:
Para esta función sencilla se puede determinar fácilmente la primera derivada:

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

Esto permite conocer el valor verdadero de la derivada en $x = 0.5$, el cual se puede usar para calcular el error de truncamiento:

$$\boxed{f'(0.5) = -0.9125}$$

Diferencias finitas divididas

Ejemplo 1

$$\boxed{f'(x_i) = \frac{f(x_i+h) - f(x_i)}{h} + O(h)}$$

$$\boxed{f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_i-h)}{h} + O(h)}$$

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

Por lo tanto, se debe evaluar:

$$f(x_i - h) \qquad f(x_i) \qquad f(x_i + h)$$

Diferencias finitas divididas

Ejemplo 1: $h = 0.5$

$$\begin{aligned} x_i - h &= 0 &\Rightarrow\quad & f(x_i - h) = 1.2 \\ x_i &= 0.5 &\Rightarrow\quad & f(x_i) = 0.925 \\ x_i + h &= 1 &\Rightarrow\quad & f(x_i + h) = 0.2 \end{aligned}$$

Diferencias hacia adelante:

$$f'(0.5) \cong \frac{0.2 - 0.925}{0.5} = -1.45 \qquad \varepsilon_t = 58.9\,\%$$

Diferencias hacia atrás:

$$f'(0.5) \cong \frac{0.925 - 1.2}{0.5} = -0.55 \qquad \varepsilon_t = 39.7\,\%$$

Diferencias centradas:

$$f'(0.5) \cong \frac{0.2 - 1.2}{1.0} = -1.0 \qquad \varepsilon_t = 9.6\,\%$$

Diferencias finitas divididas

Ejemplo 1: $h = 0.25$

$$\begin{aligned} x_i - h &= 0.25 &\Rightarrow\quad & f(x_i - h) = 1.10351563 \\ x_i &= 0.5 &\Rightarrow\quad & f(x_i) = 0.925 \\ x_i + h &= 0.75 &\Rightarrow\quad & f(x_i + h) = 0.63632813 \end{aligned}$$

Diferencias hacia adelante:

$$f'(0.25) \cong \frac{0.63632813 - 0.925}{0.25} = -1.155 \qquad \varepsilon_t = 26.5\,\%$$

Diferencias hacia atrás:

$$f'(0.25) \cong \frac{0.925 - 1.10351563}{0.25} = -0.714 \qquad \varepsilon_t = 21.7\,\%$$

Diferencias centradas:

$$f'(0.25) \cong \frac{0.63632813 - 1.10351563}{0.5} = -0.934 \qquad \varepsilon_t = 2.4\,\%$$

Ejemplo 1

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

Errores de truncamiento [%]

h	**Hacia adelante**	**Hacia atrás**	**Centradas**
0.5	58.9	39.7	9.6
0.25	26.5	21.7	2.4

Ejemplo 2

Desarrolle una aproximación numérica para determinar la velocidad de caída de un paracaidista en función del tiempo.

Modelo físico: Caída libre
Modelo matemático: Segunda ley de Newton

$$m\frac{dV(t)}{dt} = F_D + F_U$$

$F_D = mg$ Fuerza gravedad
$F_U = -CV(t)$ Fuerza de arrastre

Variables:

- t : Tiempo [s]
- $V(t)$: Velocidad de caída [m/s]
- F_D : Fuerza de gravedad [N]
- F_U : Fuerza de arrastre [N]
- m : Masa del paracaidísta [kg]
- C : Coeficiente de arrastre [Ns/m]

Ejemplo 2

Solución analítica

$$V(t) = \frac{mg}{C}\left[1 - e^{-\left(\frac{C}{m}\right)t}\right] \quad (1) \qquad V(0) = 0$$

Solución numérica

Se parte del modelo matemático:

$$m\frac{dV(t)}{dt} = F_D + F_U \quad \Rightarrow \frac{dV(t)}{dt} = \frac{F_D + F_U}{m}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{dV(t)}{dt} = g - \frac{CV(t)}{m}} \quad (2)$$

Se busca una aproximación para la primera derivada de la velocidad

$\downarrow$

Diferencias finitas divididas

Ejemplo 2

Solución numérica

Se conoce el valor de la velocidad en el instante inicial ($t_i = 0$)
$V(0) = 0 \rightarrow$ Se puede estimar la velocidad para cualquier instante posterior: $V(t_{i+1}) \rightarrow$ Diferencias finitas divididas hacia adelante:

$$\boxed{\frac{dV(t_i)}{dt} \cong \frac{V(t_{i+1}) - V(t_i)}{t_{i+1} - t_i}} \quad (3)$$

$$\boxed{\frac{dV(t)}{dt} = g - \frac{CV(t)}{m}} \quad (2)$$

Se reemplaza la ec. (3) en la ec. (2).
Organizando términos se obtiene:

$$\boxed{V(t_{i+1}) \cong V(t_i) + \left[g - \frac{CV(t_i)}{m}\right](t_{i+1} - t_i)} \quad (4)$$

Ejemplo 2

Solución numérica

$$\boxed{V(t) = \frac{mg}{C}\left[1 - e^{-\left(\frac{C}{m}\right)t}\right]} \quad (1)$$

$$\boxed{V(t_{i+1}) \cong V(t_i) + \left[g - \frac{CV(t_i)}{m}\right](t_{i+1} - t_i)} \quad (4)$$

- La ec. (4) es una aproximación numérica a la solución exacta de la ec. (1), y se puede usar para estimar la evolución temporal de la velocidad de caída del paracaidista.
- Para un valor inicial de velocidad en algún tiempo t_i, es posible calcular con facilidad la velocidad en un tiempo posterior t_{i+1}. Este nuevo valor de la velocidad en t_{i+1} sirve para calcular la velocidad en t_{i+2}, y así sucesivamente.

Ejemplo 2

Solución numérica

1. Resuelva numéricamente hasta 14 s con un paso temporal de 2 s, usando los siguientes parámetros:

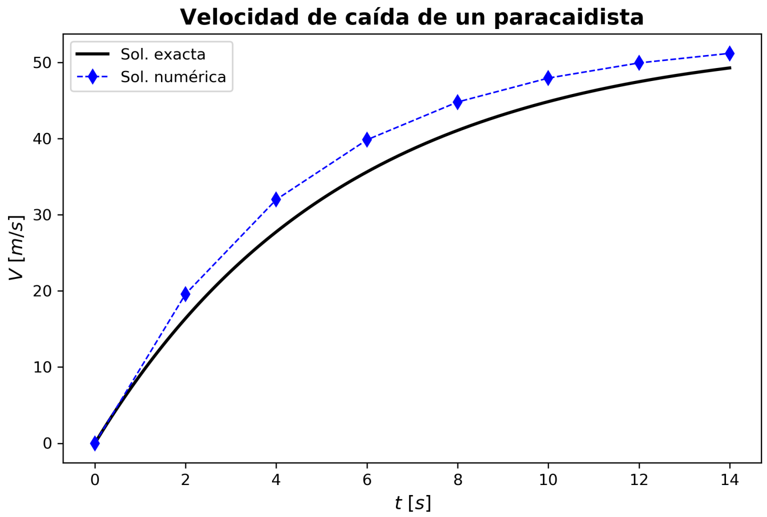
$$V(0) = 0 \qquad C = 12.5\left[\frac{Ns}{m}\right] \qquad g = 9.8\left[\frac{m}{s^2}\right] \qquad m = 68.1\,[kg]$$

2. Grafique las soluciones analítica y numérica en la misma figura.
3. Explore con pasos temporales de 2 s, 1 s, 0.5 s, y 0.1 s.

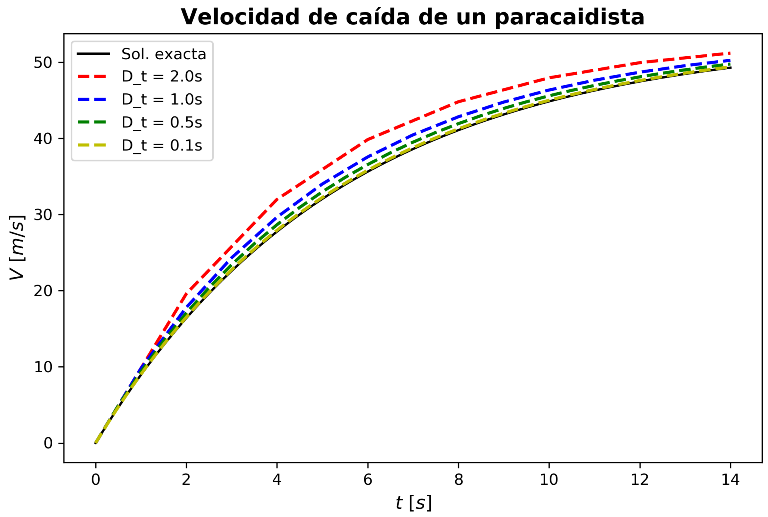
Ejemplo 2 ($\Delta t = 2\ s$)

i	$t_i[s]$	$V(t)[m/s]$	$V_a(t)[m/s]$
1	0	0	0
2	2	16.405	19.6
3	4	27.769	32.005
4	6	35.642	39.856
5	8	41.095	44.824
6	10	44.873	47.969
7	12	47.49	49.959
8	14	49.303	51.219

Ejemplo 2 ($\Delta t = 2\ s$)



Ejemplo 2



Derivadas de orden superior

Derivadas de orden superior

La expansión en serie de Taylor para $f(x_i + h)$ en función de $f(x_i)$ es:

$$f(x_i + h) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \cdots \qquad (1)$$

Donde $\boxed{h = x_i - x_{i-1} = x_{i+1} - x_i = \text{cte}}$

La respectiva expansión para $f(x_i + 2h)$ en función de $f(x_i)$ es:

$$f(x_i + 2h) = f(x_i) + f'(x_i)(2h) + \frac{f''(x_i)}{2!}(2h)^2 + \cdots \qquad (2)$$

Ahora se puede multiplicar la ecuación (1) por 2, y restarla de la ecuación (2), con lo cual:

$$f(x_i + 2h) - 2f(x_i + h) = -f(x_i) + f''(x_i)h^2 + \cdots \qquad (3)$$

Derivadas de orden superior

Derivadas de orden superior

Al despejar la segunda derivada de la ecuación (3), se obtiene:

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i + 2h) - 2f(x_i + h) + f(x_i)}{h^2} + O(h) \qquad (4)$$

El término $O(h)$ representa un error de truncamiento de orden h.

La ecuación (4) proporciona una aproximación de primer orden a la segunda derivada, llamada segunda diferencia finita hacia adelante:

$$\boxed{f''(x_i) = \frac{f(x_i + 2h) - 2f(x_i + h) + f(x_i)}{h^2} + O(h)} \qquad (5)$$

Derivadas de orden superior

Derivadas de orden superior

Usando manipulaciones similares se pueden obtener las versiones hacia atrás y centrada.

Segunda diferencia finita hacia atrás:

$$\boxed{f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_i - h) + f(x_i - 2h)}{h^2} + O(h)} \qquad (6)$$

Segunda diferencia finita centrada:

$$\boxed{f''(x_i) = \frac{f(x_i + h) - 2f(x_i) + f(x_i - h)}{h^2} + O(h^2)} \qquad (7)$$

De nuevo se tiene que el error de truncamiento de las segundas diferencias hacia adelante y hacia atrás es del orden de h, mientras que para la segunda diferencia centrada, este error es del orden de h^2.

Fórmulas de alta precisión

Fórmulas de alta precisión

La precisión de las diferencias finitas divididas se puede mejorar aumentando el número de términos de la expansión en serie de Taylor.

Recordemos la ecuación (1):

$$f(x_i + h) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + O(h^2) \qquad (1)$$

Despejando la primera derivada de esta ecuación, se obtiene:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h} - \frac{f''(x_i)}{2}h + O(h^2) \qquad (8)$$

Conservando el término de la segunda derivada, y reemplazando su aproximación de la ecuación (5), se obtiene la ecuación (9).

Fórmulas de alta precisión

Fórmulas de alta precisión

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i+h)-f(x_i)}{h} - \frac{f(x_i+2h)-2f(x_i+h)+f(x_i)}{2h^2}h + O(h^2) \qquad (9)$$

Simplificando esta ecuación se llega a:

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_i+2h)+4f(x_i+h)-3f(x_i)}{2h} + O(h^2) \qquad (10)$$

Esta aproximación corresponde a una diferencia finita dividida hacia adelante mejorada. $\rightarrow$ Se observa que al incluir el término de la segunda derivada se mejoró la precisión de $O(h)$ a $O(h^2)$.

Usando un procedimiento similar, se pueden obtener versiones mejoradas de las diferencias hacia atrás y centrada, así como de las derivadas de orden superior.

Diferencias finitas hacia adelante

Primera derivada:

$$\boxed{f'(x_i) \cong \frac{f(x_i+h)-f(x_i)}{h}} \quad O(h)$$

$$\boxed{f'(x_i) \cong \frac{-f(x_i+2h)+4f(x_i+h)-3f(x_i)}{2h}} \quad O(h^2)$$

Segunda derivada:

$$\boxed{f''(x_i) \cong \frac{f(x_i+2h)-2f(x_i+h)+f(x_i)}{h^2}} \quad O(h)$$

$$\boxed{f''(x_i) \cong \frac{-f(x_i+3h)+4f(x_i+2h)-5f(x_i+h)+2f(x_i)}{h^2}} \quad O(h^2)$$

Diferencias finitas hacia adelante

Tercera derivada:

$$\boxed{f^{(3)}(x_i) \cong \frac{f(x_i+3h)-3f(x_i+2h)+3f(x_i+h)-f(x_i)}{h^3}} \quad O(h)$$

$$\boxed{f^{(3)}(x_i) \cong \frac{-3f(x_i+4h)+14f(x_i+3h)-24f(x_i+2h)+18f(x_i+h)-5f(x_i)}{2h^3}} \quad O(h^2)$$

Cuarta derivada:

$$\boxed{f^{(4)}(x_i) \cong \frac{f(x_i+4h)-4f(x_i+3h)+6f(x_i+2h)-4f(x_i+h)+f(x_i)}{h^4}} \quad O(h)$$

$$\boxed{f^{(4)}(x_i) \cong \frac{-2f(x_i+5h)+11f(x_i+4h)-24f(x_i+3h)+26f(x_i+2h)-14f(x_i+h)+3f(x_i)}{h^4}} \quad O(h^2)$$

Diferencias finitas hacia atrás

Primera derivada:

$$\boxed{f'(x_i) \cong \frac{f(x_i)-f(x_i-h)}{h}} \quad O(h)$$

$$\boxed{f'(x_i) \cong \frac{3f(x_i)-4f(x_i-h)+f(x_i-2h)}{2h}} \quad O(h^2)$$

Segunda derivada:

$$\boxed{f''(x_i) \cong \frac{f(x_i)-2f(x_i-h)+f(x_i-2h)}{h^2}} \quad O(h)$$

$$\boxed{f''(x_i) \cong \frac{2f(x_i)-5f(x_i-h)+4f(x_i-2h)-f(x_i-3h)}{h^2}} \quad O(h^2)$$

Diferencias finitas hacia atrás

Tercera derivada:

$$\boxed{f^{(3)}(x_i) \cong \frac{f(x_i) - 3f(x_i - h) + 3f(x_i - 2h) - f(x_i - 3h)}{h^3}} \quad O(h)$$

$$\boxed{f^{(3)}(x_i) \cong \frac{5f(x_i) - 18f(x_i - h) + 24f(x_i - 2h) - 14f(x_i - 3h) + 3f(x_i - 4h)}{2h^3}} \quad O(h^2)$$

Cuarta derivada:

$$\boxed{f^{(4)}(x_i) \cong \frac{f(x_i) - 4f(x_i - h) + 6f(x_i - 2h) - 4f(x_i - 3h) + f(x_i + 4h)}{h^4}} \quad O(h)$$

$$\boxed{f^{(4)}(x_i) \cong \frac{3f(x_i) - 14f(x_i - h) + 26f(x_i - 2h) - 24f(x_i - 3h) + 11f(x_i - 4h) - 2f(x_i - 5h)}{h^4}} \quad O(h^2)$$

Diferencias finitas centradas

Primera derivada:

$$\boxed{f'(x_i) \cong \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h}} \quad O(h^2)$$

$$\boxed{f'(x_i) \cong \frac{-f(x_i + 2h) + 8f(x_i + h) - 8f(x_i - h) + f(x_i - 2h)}{12h}} \quad O(h^4)$$

Segunda derivada:

$$\boxed{f''(x_i) \cong \frac{f(x_i + h) - 2f(x_i) + f(x_i - h)}{h^2}} \quad O(h^2)$$

$$\boxed{f''(x_i) \cong \frac{-f(x_i + 2h) + 16f(x_i + h) - 30f(x_i) + 16f(x_i - h) - f(x_i - 2h)}{12h^2}} \quad O(h^4)$$

Diferencias finitas centradas

Tercera derivada:

$$\boxed{f^{(3)}(x_i) \cong \frac{f(x_i + 2h) - 2f(x_i + h) + 2f(x_i - h) - f(x_i - 2h)}{2h^3}} \quad O(h^2)$$

$$\boxed{f^{(3)}(x_i) \cong \frac{-f(x_i + 3h) + 8f(x_i + 2h) - 13f(x_i + h) + 13f(x_i - h) - 8f(x_i - 2h) + f(x_i - 3h)}{8h^3}} \quad O(h^4)$$

Cuarta derivada:

$$\boxed{f^{(4)}(x_i) \cong \frac{f(x_i + 2h) - 4f(x_i + h) + 6f(x_i) - 4f(x_i - h) + f(x_i - 2h)}{h^4}} \quad O(h^2)$$

$$\boxed{f^{(4)}(x_i) \cong \frac{-f(x_i + 3h) + 12f(x_i + 2h) + 39f(x_i + h) + 56f(x_i) - 39f(x_i - h) + 12f(x_i - 2h) + f(x_i - 3h)}{6h^4}}$$

$$O(h^4)$$

Fórmulas de diferenciación de alta precisión

Ejemplo 3

Use la función del primer ejemplo, así como las tres fórmulas de diferenciación de alta precisión, para aproximar la primera derivada en $x = 0.5$, con un paso $h = 0.25$.

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

Se sabe que el valor verdadero de la derivada en $x = 0.5$ es $f'(0.5) = -0.9125$.

Fórmulas de diferenciación de alta precisión

Ejemplo 3

$$\boxed{f'(x_i) \cong \frac{-f(x_i+2h)+4f(x_i+h)-3f(x_i)}{2h}} \quad O(h^2)$$

$$\boxed{f'(x_i) \cong \frac{3f(x_i)-4f(x_i-h)+f(x_i-2h)}{2h}} \quad O(h^2)$$

$$\boxed{f'(x_i) \cong \frac{-f(x_i+2h)+8f(x_i+h)-8f(x_i-h)+f(x_i-2h)}{12h}} \quad O(h^4)$$

En este caso hace falta evaluar la función en 5 puntos:

$$\begin{aligned}
x_i-2h &= 0 && \Rightarrow && f(x_i-2h) = 1.2\\
x_i-h &= 0.25 && \Rightarrow && f(x_i-h) = 1.1035156\\
x_i &= 0.5 && \Rightarrow && f(x_i) = 0.925\\
x_i+h &= 0.75 && \Rightarrow && f(x_i+h) = 0.6363281\\
x_i+2h &= 1 && \Rightarrow && f(x_i+2h) = 0.2
\end{aligned}$$

Fórmulas de diferenciación de alta precisión

Ejemplo 3

Usando las fórmulas presentadas antes, se obtiene:

Diferencias hacia adelante de precisión $O(h^2)$:

$$f'(0.5) \cong \frac{-0.2+4(0.63632813)-3(0.925)}{2(0.25)} = -0.859375 \qquad \varepsilon_t = 5.82\,\%$$

Diferencias hacia atrás de precisión $O(h^2)$:

$$f'(0.5) \cong \frac{3(0.925)-4(1.10351563)+1.2}{2(0.25)} = -0.878125 \qquad \varepsilon_t = 3.77\,\%$$

Diferencias centradas de precisión $O(h^4)$:

$$f'(0.5) \cong \frac{-0.2+8(0.63632813)-8(1.10351563)+1.2}{12(0.25)} = -0.9125 \qquad \varepsilon_t = 0\,\%$$

Fórmulas de diferenciación de alta precisión

Ejemplo 3

Comparación de resultados con el ejemplo 1 (precisión de $O(h)$):

	Hacia adelante	Hacia atrás	Centrada
ε_t [%]	26.5 $O(h)$	21.7 $O(h)$	2.4 $O(h^2)$
ε_t [%]	5.82 $O(h^2)$	3.77 $O(h^2)$	0 $O(h^4)$

Extrapolación de Richardson

Extrapolación de Richardson

Es una forma de mejorar la aproximación a una derivada, al combinar dos aproximaciones con paso (h) diferente:

$$\boxed{D \cong \frac{4}{3}D(h_2) - \frac{1}{3}D(h_1)} \qquad (11)$$

Donde D es la aproximación mejorada, $D(h_2)$ es la aproximación usando un paso h_2, y $D(h_1)$ es la aproximación usando un paso h_1, donde se debe cumplir que:

$$h_2 = \frac{1}{2}h_1$$

Para la aproximación de una diferencia centrada con $O(h^2)$, este método da una aproximación mejorada con $O(h^4)$.

Extrapolación de Richardson

Ejemplo 4

Use la función de los ejemplos anteriores para mejorar la aproximación de diferencias centradas a la primera derivada en $x = 0.5$, con pasos $h_1 = 0.5$ y $h_2 = 0.25$. Se sabe que el valor verdadero de la derivada en $x = 0.5$ es $f'(0.5) = -0.9125$.

Del primer ejemplo se tiene que:

$$D(0.5) = \frac{0.2 - 1.2}{1.0} = -1.0 \qquad |\varepsilon_t| = 9.6\,\%$$

$$D(0.25) = \frac{0.63632813 - 1.10351563}{0.5} = -0.934 \qquad |\varepsilon_t| = 2.4\,\%$$

Aplicando la extrapolación de Richardson, se obtiene:

$$D \cong \frac{4}{3}(-0.934) - \frac{1}{3}(-1.0) = -0.9125 \qquad \varepsilon_t = 0\,\%$$

Diferenciación de datos con espaciamiento no uniforme

Derivadas de datos con espaciamiento no uniforme

Los métodos vistos hasta este momento son válidos únicamente para datos espaciados de manera uniforme.

Estas técnicas no se pueden aplicar cuando los datos tienen un espaciamiento no uniforme, lo cual puede ocurrir cuando éstos provienen de mediciones experimentales.

En estos casos se puede emplear una fórmula de aproximación de la primera derivada, que resulta de tomar los datos en grupos de a 3, ajustarles un polinomio de segundo grado, y derivar éste.

Derivadas de datos con espaciamiento no uniforme

Derivadas de datos con espaciamiento no uniforme

$$\boxed{\begin{aligned} f'(x) \cong\ & f(x_{i-1})\frac{2x - x_i - x_{i+1}}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})} \\ & + f(x_i)\frac{2x - x_{i-1} - x_{i+1}}{(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})} \\ & + f(x_{i+1})\frac{2x - x_{i-1} - x_i}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)} \end{aligned}} \qquad (12)$$

Esta aproximación es válida para datos con espaciamiento no uniforme y tiene la misma precisión que una diferencia centrada.

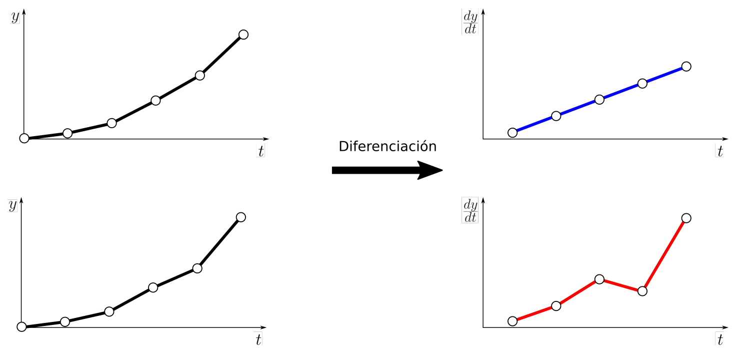
Se puede usar para aproximar la derivada en cualquier punto x del intervalo definido por $[x_{i-1}, x_{i+1}]$.

Diferenciación de datos con errores

Diferenciación de datos con errores

- Los datos experimentales suelen tener errores asociados.
- La diferenciación numérica tiende a amplificar errores en los datos.

En estos casos se debe ajustar una curva suave a los datos, antes de realizar la diferenciación (filtrado o tratamiento de señales).



Derivadas parciales

Derivadas parciales

Las derivadas parciales con respecto a una sola variable se aproximan de la misma forma que las ordinarias.

Para una función $f(x,y)$, las fórmulas usando diferencias centradas con datos espaciados uniformemente, son las siguientes:

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial x} \cong \frac{f(x+\Delta x,\, y) - f(x-\Delta x,\, y)}{2\Delta x}} \quad (13)$$

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial y} \cong \frac{f(x,\, y+\Delta y) - f(x,\, y-\Delta y)}{2\Delta y}} \quad (14)$$

Derivadas parciales

Derivadas parciales

Para derivadas de orden superior se necesita derivar con respecto a dos o más variables. $\rightarrow$ Derivada parcial mixta. Por ejemplo, para una función $f(x,y)$:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)$$

La aproximación a esta derivada en diferencias centradas es:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \cong \frac{\frac{\partial f}{\partial y}(x+\Delta x,\, y) - \frac{\partial f}{\partial y}(x-\Delta x,\, y)}{2\Delta x} \quad (15)$$

Derivadas parciales

Derivadas parciales

Usando la ecuación (14) en la (15), y organizando términos, se obtiene la aproximación en diferencias centradas para la derivada parcial mixta:

$$\boxed{\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \cong \frac{f(x+\Delta x,y+\Delta y) - f(x+\Delta x,y-\Delta y) - f(x-\Delta x,y+\Delta y) + f(x-\Delta x,y-\Delta y)}{4\Delta x\Delta y}} \quad (16)$$

A continuación

Próxima clase

- Integración numérica