Objetivo: Recordar diferencias finitas y pasos óptimos en una dimensión.

1. Teoría de aproximar derivadas

Bajo las hipótesis $f \in C^3[a-\delta, a+\delta]$ y $|h| \le \delta$, se puede mostrar que existe $\xi \in [a-h, a+h]$, tal que

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi)\,.$$

Ayuda: Se requiere el teorema de valor intermedio.

Denotamos la diferencia central de la función f en el punto $a \in \mathbb{R}$ por $D_h^c[f]|_a$, *i.e.*

$$D_h^c[f]|_a := \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}\,, \qquad f'(a) = D_h^c[f]|_a - \frac{h^2}{6} f'''(\xi)\,.$$

En general, se puede ver que D_h^c es un operador lineal (en f) y aproxima a $f'(a)$. Nótese que $D_h^c[f]|_a$ se obtiene ignorando un termino $e_T(h)$, este se llama *error de truncamiento*. En este caso: $e_T(h) = \frac{h^2}{6} f'''(\xi)$.

Con el fin de deducir un paso óptimo $h_\star$, supongamos que el error de truncamiento e_T es acotado.

Sea $|f'''(t)| \le M$ para toda $t \in [a-\delta, a+\delta]$, entonces para $|h| \le \delta$, entonces

$$|e_T(h)| = \left|f'(a) - D_h^c[f]\right| \le \frac{h^2 M}{6}\,.$$

Esa cota se cumple en aritmética continua (NO en la computadora). La razón es que en la máquina no evaluamos a $f(a)$ de manera exacta, sino a $\tilde{f}$ (una versión de f redondeada). Por errores de redondeo se cumple $\tilde{f}(a) = f(a) + r(a)$, donde la función del error r no es continua y satisface $|r(a)| \le \epsilon_f := C \cdot \varepsilon_M$ con una constante $C > 0$ que depende de como f este evaluada, de que tan rápido cambia f y de la distancia entre dos puntos flotantes al rededor de a . Además, es razonable suponer que $r(a \pm h) \approx r(a)$ si f se comporta similar al rededor de a. Entonces, la linealidad de D_h^c y la desigualdad del triángulo nos da:

$$\left|D_h^c[\tilde{f}] - D_h^c[f]\right| = \left|D_h^c[r]\right| \le \frac{|r(a+h)| + |r(a-h)|}{2h} \le \frac{\epsilon_f}{h}.$$

Juntando las dos cotas, la desigualdad del triángulo implica

$$\left|f'(a) - D_h^c[\tilde{f}]\right| \;\le\; \left|f'(a) - D_h^c[f]\right| + \left|D_h^c[f] - D_h^c[\tilde{f}]\right| \;\le\; g(h) := \frac{h^2 M}{6} + \frac{\epsilon_f}{h}\,. \tag{1}$$

Note, la definición de la cota superior $g(h)$ del error total.

Esa cota $g(h)$ es convexa para $h > 0$ y tiene un mínimo global en $h_\star = \left(3\epsilon_f / M\right)^{1/3} > 0$.

En la práctica usamos $\tilde{h}_\star := (\varepsilon_M)^{1/3}(|a| + 1) > |a| \cdot \varepsilon_M/2$.

Las razones son de Matemática Computacional:

- La distancia entre un punto flotante a y su sucesor es proporcional a $|a|$. Más aún, si $h < |a| \cdot \varepsilon_M/2$, entonces $a + h \overset{\text{comp}}{=\!=} a$. Por lo cual, $D_h^c[f]|_a \overset{\text{comp}}{=\!=} 0$ para $h < |a| \cdot \varepsilon_M/2$ (independiente de la función). Para esos pasos el error total es igual a $|f'(a)|$.
- Queremos $\tilde{h}_\star > 0$, por lo cual sumamos 1 a $|a|$.
- Bajo la hipótesis $3C/M \approx 1$ (ya que las constantes son desconocidos) obtenemos $\tilde{h}_\star \approx h_\star$.

1.1. Cálculos exactos.

1. Suponga que $f \in C^3$ con $|f'''(t)| \le M$ y evaluada con un error tal que $|r(t)| \le \epsilon_f$. Ahora, considere la diferencia finita centrada $D_h^c[f]\big|_a$ que aproxima a $f'(a)$ y la cota $g(h)$ de la teoría, ver (1).

a) Encuentre el paso óptimo $h_\star$, es decir, el paso que minimice la cota $g(h)$.
Respuesta: $h_\star = \left(3\epsilon_f/M\right)^{1/3}$.

b) ¿Cuál es el valor mínimo de la cota, *i.e.*, $g(h_\star)$? *Respuesta:* $g(h_\star) = 3\Big({\epsilon_f}^2 M/24\Big)^{1/3}$.

c) Si $\epsilon_f = 2^{-52}$ y $M = 1$. ¿Cuál es el paso óptimo?
¿Cuántas cifras decimales correctas se pueden esperar en el paso óptimo?
Respuesta: $g(h_\star) \approx 3.8 \cdot 10^{-11}$ *(casi once cifras).*

2. Un ejemplo para la primera derivada

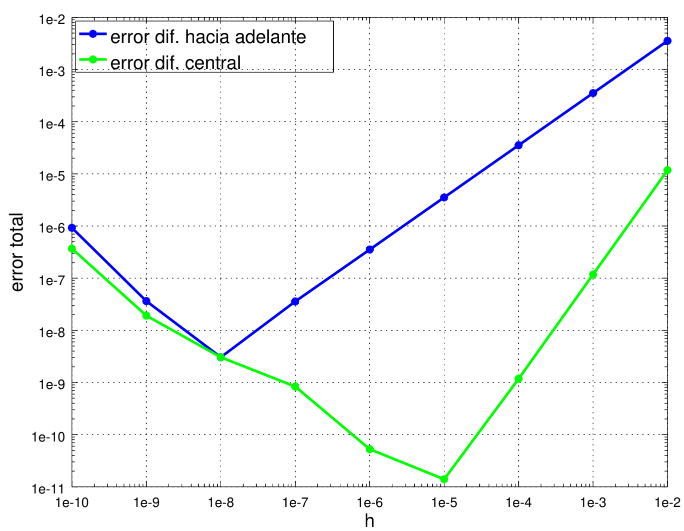
La a diferencia hacia adelante esta definida por

$$D_h^+[f] \coloneqq \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \qquad \text{y tiene la cota del error} \qquad g(h) = \frac{hM}{2} + \frac{2\epsilon_f}{h}\,.$$

La diferencia central esta (como arriba) definida por

$$D_h^c[f] \coloneqq \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} \qquad \text{y su cota del error es} \qquad g(h) = \frac{h^2 M}{6} + \frac{\epsilon_f}{h}\,.$$

He usado D_h^+ y D_h^c para aproximar la primera derivada de $f(x) = \sin(x)$ en $x = a = \pi/4$ y hice la siguiente visualización de los errores con distintos pasos h en escalas logarítmicas (usando el comando `loglog` de MatLab):



Lo importante es que el paso óptimo teórico de D_h^c tiene la aproximación

$$h_\star \approx (\varepsilon_M)^{1/3}(|a| + 1)\,.$$

Note que $\varepsilon_M \approx 10^{-16}$.

3. Un ejemplo para la segunda derivada

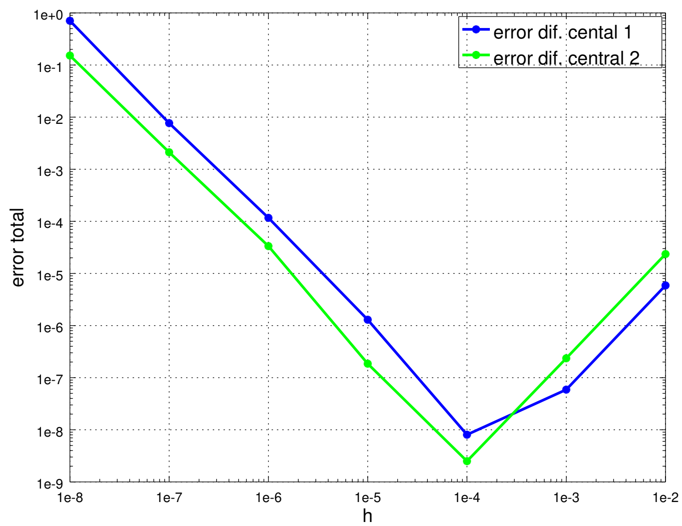
El argumento teórico de la página 1 se puede aplicar a aproximaciones de la segunda derivada. Aquí solo muestro el resultado de tal argumento. Definimos dos aproximaciones de la segunda derivada. A la primera le llamamos *diferencia central 1*. Esa, esta definida por

$$D_1^c[f] \coloneqq \frac{f(a+h) - 2f(a) - f(a-h)}{h^2} \qquad \text{y tiene la cota del error} \qquad g(h) = \frac{h^2 M}{12} + \frac{4\epsilon_f}{h^2}\,.$$

La segunda, se llama *diferencia central 2* y definida por

$$D_2^c[f] \coloneqq \frac{f(a+2h) - 2f(a) - f(a-2h)}{4h^2} \qquad \text{y su cota del error es} \qquad g(h) = \frac{h^2 M}{3} + \frac{\epsilon_f}{h^2}\,.$$

He usado D_1^c y D_2^c para aproximar la segunda derivada de $f(x) = \sin(x)$ en $x = a = \pi/4$ y hice la siguiente visualización de los errores con distintos pasos h en escalas logarítmicas (usando el comando `loglog` de MatLab):



Lo importante es que el paso óptimo teórico (de las dos aproximaciones) tiene la aproximación

$$h_\star \approx (\varepsilon_M)^{1/4}(|a| + 1)\,.$$

Note que $\varepsilon_M \approx 10^{-16}$.