M. Belén Díaz

Diferenciación Numérica

1.1 Introducción

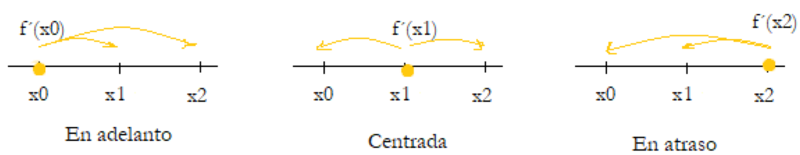
En algunas ocasiones, pueden presentarse funciones continuas difíciles o imposibles de diferenciar analíticamente o podemos tener una función tabulada donde los valores de x y f(x) estén dados como un conjunto discreto de puntos, obtenidos de forma experimental. En estas situaciones será útil aplicar métodos de diferenciación numérica para hallar aproximaciones de las derivadas. En esta sección resolveremos algunos ejercicios utilizando el método de los *coeficientes indeterminados*.

1.2 Aplicación práctica

Eje 1. Construir una aproximación en atraso con tres puntos de f´(x) y analizar la precisión del esquema obtenido.

Utilizaremos el método de los coeficientes indeterminados para construir la aproximación de f´(x), en este caso, utilizando tres puntos x0, x1, x2. El método consiste en plantear f´(x) como una combinación lineal de los valores dato f(x0), f(x1), f(x2). Estos valores f(xi) se los reemplazará por el desarrollo de la serie de Taylor entorno a un punto, que dicho punto dependerá de si queremos generarnos una aproximación *en atraso, en adelanto o centrada*.

El enunciado nos pide que la aproximación sea "*en atraso*"; esto implica que lo que debemos calcular es f´(x2), ya que para aproximar utiliza los datos "que le quedan a la izquierda". La aproximación será *en adelanto* f´(x0), si para aproximar usamos datos que "quedan a la derecha" y será *centrada* f´(x1), cuando tenga igual cantidad de puntos a ambos lados.



Planteemos la combinación lineal de f´(x2) en función de los f(xi):

$$f'(x2) = a\, f(xo) + b\, f(x1) + c\, f(x2) \qquad (1)$$

Reemplazaremos los valores de f(x0) y f(x1) por expansiones de la serie de Taylor, en torno al punto x2. Como tenemos tres puntos, llevaremos la expansión hasta el término que contiene f'''(x). Este último término estará asociado al error de truncamiento.

$$f(x) = f(x2) + f'(x2)(x - x2) + \frac{f''(x2)(x - x2)^2}{2!} + \frac{f'''(x2)\,(x - x2)^3}{3!} + O(h^4)$$

Y además sabemos que:

$$h = x2 - x1$$

$$2h = x2 - x0$$

Calculando Taylor para f(x0) y f(x1) nos queda:

$$f(x0) = f(x2) + f'(x2)(x0 - x2) + \frac{f''(x2)(x0 - x2)^2}{2!} + \frac{f'''(x2)\,(x0 - x2)^3}{3!} + O(h^4)$$

$$f(x0) = f(x2) + f'(x2)(-2h) + \frac{f''(x2)(-2h)^2}{2!} + \frac{f'''(x2)\,(-2h)^3}{3!} + O(h^4) \qquad (2)$$

$$f(x1) = f(x2) + f'(x2)(x1 - x2) + \frac{f''(x2)(x1 - x2)^2}{2!} + \frac{f'''(x2)\,(x1 - x2)^3}{3!} + O(h^4)$$

$$f(x1) = f(x2) + f'(x2)(-h) + \frac{f''(x2)(-h)^2}{2!} + \frac{f'''(x2)\,(-h)^3}{3!} + O(h^4) \qquad (3)$$

Reemplazando (2) y (3) en (1) resulta:

$$f'(x2) = a\left[f(x2) + f'(x2)(-2h) + \frac{f''(x2)(-2h)^2}{2!} + \frac{f'''(x2)\,(-2h)^3}{3!} + O(h^4)\right] + b\left[f(x2) + f'(x2)(-h) + \frac{f''(x2)(-h)^2}{2!} + \frac{f'''(x2)\,(-h)^3}{3!} + O(h^4)\right] + c\,f(x2)$$

Sacando factor común y reordenando:

$$f'(x2) = f(x2)\underbrace{[a + b + c]}_{0} + f'(x2)\underbrace{[-2ha - hb]}_{1} + f''(x2)\underbrace{\left[\frac{4h^2a}{2} + \frac{h^2b}{2}\right]}_{0} + \underbrace{f'''(x2)\left[\frac{-8h^3a}{6} - \frac{h^3b}{6}\right] + O(h^4)}_{\textbf{error de trunc.}}$$

Para que la expresión anterior sea una igualdad, al segundo término le pediremos que sea igual a uno, y el resto que sea igual a cero. El término que contiene f'''(x) nos servirá luego para calcular una cota de error de truncamiento.

Planteamos las condiciones (tenemos 3 incógnitas y 3 ecuaciones) y resolvemos el sistema:

$$\begin{cases} a + b + c = 0 \\ -2ha - hb = 1 \\ \dfrac{4h^2a}{2} + \dfrac{h^2b}{2} = 0 \end{cases} \rightarrow \quad a = \frac{1}{2h} \qquad b = \frac{-2}{h} \qquad c = \frac{3}{2h}$$

Una vez obtenido el valor de los coeficientes, volvemos a (1) y reemplazamos:

$$f'(x2) = \frac{1}{2h}\,f(xo) - \frac{2}{h}\,f(x1) + \frac{3}{2h}\,f(x2)$$

$$\boxed{f'(x2) = \frac{1}{h}\left[\frac{1}{2}\,f(xo) - 2\,f(x1) + \frac{3}{2}\,f(x2)\right]}$$

Esta expresión que obtuvimos, corresponde a la aproximación en atraso de f´(x2) para tres puntos utilizando el método de los coeficientes indeterminados. Los valores de h, f(x0), f(x1), f(x2) son dato.

Analicemos el error de truncamiento. Como la expansión de la serie de Taylor es un desarrollo de infinitos términos, y nosotros vamos a truncarlo, aparecerá como ya hemos visto, un error de truncamiento. Vamos a generarnos una cota para este error utilizando el término que contiene f'''(x) y acotándolo para el valor max|f'''(x)| con xo ≤ x ≤ x2. Tener en cuenta, que para poder realizar esto, deberíamos conocer la función f(x).

$$\text{cota error trunc.} \leq \left| \text{máx}|f'''(x)| \left[\frac{-8h^3 a}{6} - \frac{h^3 b}{6} \right] \right| \quad con \qquad xo \leq x \leq x2$$

$$\boxed{\text{cota error trunc.} \leq \quad \text{máx}|f'''(x)| \ \frac{h^2}{3} \qquad con \qquad xo \leq x \leq x2} \qquad (4)$$

Veamos que el error es de $O(h^2)$ (orden 2) y que en principio, si reducimos el tamaño del paso "h" mejoraríamos nuestra aproximación, ya que disminuye el error de truncamiento. Hay que ser cuidadosos con lo anterior, porque si bien al disminuir "h" disminuye el error de trunc., sucede que el error de redondeo aumenta, y si seguimos reduciendo "h" hasta valores muy pequeños, puede que en lugar de mejorar la aproximación, la empeoremos. Por este motivo se dice que la diferenciación numérica es inestable.

El Orden de Precisión (OP) también podríamos haberlo deducido de la siguiente expresión:

$$\text{OP} = \text{N} - \text{OD}^{1} \qquad (5)$$

Siendo "N" el número de puntos y "OD" el orden de la derivada que queremos aproximar. En nuestro caso nos quedaría: $\text{OP} = 3 - 1 = 2$

lo que comprobamos en la expresión (4).

Un punto importante es que, en los casos de los esquemas centrados que cumplan con paridad(N)≠paridad(OD), la ecuación (5) se convierte en $\text{OP} = \text{N} - \text{OD} + 1$. Hecho interesante que nos agrega un OP. Por ejemplo, si tuviésemos que aproximar f´´(x) (OD=2) y tengo tres puntos (N=3), en el caso de ser posible nos convendría elegir un esquema centrado (OP=2) antes que uno en adelanto/atraso (OP=1).

Eje 2. Se tiene la siguiente tabla de valores para función sen(x):

x	0,920	0,950	1,000
sen(x)	0,7956	0,81342	0,84147

a) Estimar el valor de la derivada de la función de x=1 utilizando dos aproximaciones en diferencias en atraso. Calcular una cota del error de truncamiento y compararlo con el valor exacto.

b) Mejore la solución obtenida en a) utilizando la extrapolación de Richardson. Calcular una cota del error de truncamiento y compararlo con el valor exacto.

c) Desarrollar un esquema OP=2 que permita mejorar la precisión de la aproximación. Calcular una cota del error de truncamiento y compararlo con el valor exacto.

[1] Válida para esquemas en adelanto, en atraso y centrada sii paridad(N)=paridad(OD)

Resolución

Para la resolución del ejercicio voy a considerar:

x0 = 0,920	x1= 0,950	x2 = 1,000
f(x0) = 0,7956	f(x1) = 0,81342	f(x2) = 0,84147

h1=x2 – x0 = 0,08

h2=x2 – x1 = 0,05

Valor exacto de f´(x=1,000)= cos(1,000)=0,54030

a) •Para la primera aproximación en atraso de f´(x2) voy a utilizar

x0 = 0,920	x2 = 1,000
f(x0) = 0,7956	f(x2) = 0,84147

h1=x2 – x0 = 0,08

Armo la combinación lineal de f´(x2) y el desarrollo de Taylor para f(x0). En este caso tenemos dos puntos, así que expandiremos la serie hasta f´´(x). Deberíamos obtener un esquema de OP= 2-1=1.

$$f'(x2) = a\, f(xo) + b\, f(x2) \qquad (6)$$

Taylor:

$$f(x0) = f(x2) + f'(x2)(x0 - x2) + \frac{f''(x2)(x0 - x2)^2}{2!} + O({h_1}^3)$$

$$f(x0) = f(x2) + f'(x2)(-h_1) + \frac{f''(x2)(-h_1)^2}{2!} + O({h_1}^3)$$

Reemplazo f(x0) en (6), saco factor común y resuelvo el sistema de 2x2:

$$f'(x2) = a\left[f(x2) + f'(x2)(-h_1) + \frac{f''(x2)(-h_1)^2}{2!} + O({h_1}^3)\right] + b\, f(x2)$$

$$f'(x2) = f(x2)\underbrace{[a+b]}_{0} + f'(x2)\underbrace{[-h_1 a]}_{1} + \underbrace{f''(x2)\left[\frac{{h_1}^2 a}{2}\right] + O({h_1}^3)}_{\textbf{Error de trunc.}}$$

$$\begin{cases} a + b = 0 \\ -h_1 a = 1 \end{cases} \rightarrow \qquad a = \frac{-1}{h_1} \qquad b = \frac{1}{h_1}$$

Reemplazo en (6) y resuelvo:

$$f'(x2) = \frac{1}{h_1}\,[\,f(x2) - f(x0)] = \frac{1}{0.08}\,[\,0{,}84147 - 0{,}7956\,]$$

$$\boxed{f'(x2) = 0{,}57338}$$

Para la cota del error de truncamiento planteamos:

$$\text{cota error trunc.} \leq \left| \text{máx}|\, f''(x)|\, \frac{{h_1}^2 a}{2} \right| \qquad con\ \ 0{,}920\ \leq\ \mathrm{x}\ \leq\ 1{,}000$$

$$\text{cota error trunc.} \leq \left| \text{máx}|-\text{sen}(\mathrm{x})|\left(-\frac{h_1}{2}\right) \right|$$

De la expresión anterior vemos que el error es de $O(h_1)$, tal como lo habíamos calculado. Por otro lado, el máx|-sen(x)| se obtiene para x=1 y vale |-sen(1)|=0.84147.

$$\text{cota error trunc.} \leq \left| 0{,}84147\left(-\frac{0{,}08}{2}\right) \right|$$

$$\boxed{\text{cota error trunc.} \leq\ \ 0{,}034\ \approx 0{,}04}$$

Si lo comparamos con el error de truncamiento, vemos que la cota contiene efectivamente al error:

$$\text{error trunc.} = |\cos(1{,}000) - 0{,}57338| = 0{,}033$$

•Para la segunda aproximación en atraso de f´(x2) voy a utilizar

x1 = 0,950	x2 = 1,000
f(x1) = 0,81342	f(x2) = 0,84147

h2=x2 – x1 = 0,05

Armo la combinación lineal de f´(x2) y el desarrollo de Taylor para f(x1). En este caso tenemos dos puntos, así que expandiremos la serie hasta f´´(x). Deberíamos obtener un esquema de OP= 2-1=1.

$$f'(x2) = a\, f(x1) + b\, f(x2) \qquad (7)$$

Taylor:

$$f(x1) = f(x2) + f'(x2)(x1 - x2) + \frac{f''(x2)(x1 - x2)^2}{2!} + O({h_2}^3)$$

$$f(x1) = f(x2) + f'(x2)(-h_2) + \frac{f''(x2)(-h_2)^2}{2!} + O({h_2}^3)$$

Reemplazo f(x1) en (7), saco factor común y resuelvo el sistema de 2x2:

$$f'(x2) = a\left[f(x2) + f'(x2)(-h_2) + \frac{f''(x2)(-h_2)^2}{2!} + O({h_2}^3)\right] + b\, f(x2)$$

$$f'(x2) = f(x2)\underbrace{[a + b]}_{\mathbf{0}} + f'(x2)\underbrace{[-h_2 a]}_{\mathbf{1}} + \underbrace{f''(x2)\left[\frac{{h_2}^2 a}{2}\right] + O({h_2}^3)}_{\textbf{Error de trunc.}}$$

$$\begin{cases} a + b = 0 \\ -h_2 a = 1 \end{cases} \quad \rightarrow \quad a = \frac{-1}{h_2} \qquad b = \frac{1}{h_2}$$

Reemplazo en (7) y resuelvo:

$$f'(x2) = \frac{1}{h_2}\,[\,f(x2) - f(x1)] = \frac{1}{0.05}\,[\,0{,}84147 - 0.81342\,]$$

$$\boxed{f'(x2) = 0{,}56100}$$

Para la cota del error de truncamiento planteamos:

$$\text{cota error trunc.} \leq \left|\text{máx}|-\text{sen(x)}|\left(-\frac{h_2}{2}\right)\right| \qquad\qquad con\ \ 0{,}950\ \leq\ \text{x}\ \leq\ 1{,}000$$

De la expresión anterior vemos que el error es de $O(h)$, tal como lo habíamos calculado.

$$\text{cota error trunc.} \leq \left|0{,}84147\left(-\frac{0{,}05}{2}\right)\right|$$

$$\boxed{\text{cota error trunc.} \leq \ \ 0{,}021\ \approx 0{,}03}$$

Si lo comparamos con el error de truncamiento, vemos que la cota contiene efectivamente al error:

$$\text{error trunc.} = |\cos(1{,}000) - 0{,}56100| = 0{,}0207$$

De los desarrollos anteriores, podemos ver que efectivamente cuando disminuimos el tamaño del paso "h", el error de truncamiento disminuyó y por lo tanto nuestra aproximación mejoró.

b) Planteando la fórmula de extrapolación de Richardson:

$$f'_R(x2) = f'_2(x2) - \frac{f'_2(x2) - f'_1(x2)}{1 - \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^{OP=1}}$$

$$f'_R(x2) = 0{,}56100 - \frac{0{,}56100 - 0{,}57338}{1 - \left(\frac{0{,}08}{0{,}05}\right)^{OP=1}}$$

$$f'_R(x2) = 0{,}540367$$

Si lo comparamos con el valor exacto, vemos que mejora:

$$\text{error trunc.} = |\cos(1{,}000) - 0{,}540367| = 0{,}000064$$

c) En este caso veremos que también podemos mejorar la precisión de nuestra aproximación en atraso, aumentado el OP del esquema, pero para ello debemos adicionar un punto dato(N=3) ya que 2=N-1. Para este caso usaremos:

x0 = 0,920	x1= 0,950	x2 = 1,000
f(x0) = 0,7956	f(x1) = 0,81342	f(x2) = 0,84147

h1=x2 – x0 = 0,08

h2=x2 – x1 = 0,05

Armo la combinación lineal de f´(x2) y el desarrollo de Taylor para f(x1) y f(x0). En este caso tenemos tres puntos, así que expandiremos la serie hasta f´´´(x).

$$f'(x2) = a\,f(x0) + b\,f(x1) + c\,f(x2) \qquad (8)$$

Taylor:

$$f(x0) = f(x2) + f'(x2)(x0 - x2) + \frac{f''(x2)(x0 - x2)^2}{2!} + \frac{f'''(x2)\,(x0 - x2)^3}{3!} + O({h_1}^4)$$

$$f(x0) = f(x2) + f'(x2)(-h_1) + \frac{f''(x2)(-h_1)^2}{2!} + \frac{f'''(x2)\,(-h_1)^3}{3!} + O({h_1}^4)$$

$$f(x1) = f(x2) + f'(x2)(x1 - x2) + \frac{f''(x2)(x1 - x2)^2}{2!} + \frac{f'''(x2)\,(x1 - x2)^3}{3!} + O({h_2}^4)$$

$$f(x1) = f(x2) + f'(x2)(-h_2) + \frac{f''(x2)(-h_2)^2}{2!} + \frac{f'''(x2)\,(-h_2)^3}{3!} + O({h_2}^4)$$

Reemplazo f(x1) y f(x0) en (8), saco factor común y resuelvo el sistema de 3x3:

$$f'(x2) = f(x2)\underbrace{[a + b + c]}_{\mathbf{0}} + f'(x2)\underbrace{[-h_1 a - h_2 b]}_{\mathbf{1}} + \underbrace{f''(x2)\left[\frac{{h_1}^2 a}{2} + \frac{{h_2}^2 b}{2}\right]}_{\mathbf{0}} + \underbrace{f'''(x2)\left[\frac{-{h_1}^3 a}{6} - \frac{{h_2}^3 b}{6}\right] + O({h_1}^4) + O({h_2}^4)}_{\textbf{Error de trunc.}}$$

$$\begin{cases} a + b + c = 0 \\ -h_1 a - h_2 b = 1 \\ \dfrac{{h_1}^2 a}{2} + \dfrac{{h_2}^2 b}{2} = 0 \end{cases} \rightarrow \qquad a = \frac{h_2}{{h_1}^2 - h_2 h_1} = 20{,}833 \qquad b = \frac{-h_1}{h_2(h_1 - h_2)} = -53{,}333 \qquad c = -b - a = 32{,}500$$

Reemplazo en (8) y resuelvo:

$$f'(x2) = 20{,}833\,f(x0) - 53{,}333\,f(x1) + 32{,}500\,f(x2)$$

$$\boxed{f'(x2) = 0{,}54038}$$

Para la cota del error de truncamiento planteamos:

$$\text{cota error trunc.} \leq \left| \text{máx}\,|f'''(x)| \left[\frac{-{h_1}^3 a}{6} - \frac{{h_2}^3 b}{6}\right] \right| \qquad con\ \ 0{,}920 \ \leq\ \mathrm{x}\ \leq\ 1{,}000$$

$$\text{cota error trunc.} \leq \left| \text{máx}|-\cos(\mathrm{x})| \left(\frac{-{h_1}^3 a}{6} - \frac{{h_2}^3 b}{6}\right) \right| \qquad con\ \ 0{,}920 \ \leq\ \mathrm{x}\ \leq\ 1{,}000$$

Siendo el máx|-cos(x)| para x=0,920 y vale |-cos(0,920)|=0,60582.

$$\text{cota error trunc.} \leq \ |0{,}60582\,.\,(-0{,}00066666)|$$

$$\boxed{\text{cota error trunc.} \leq \ 0{,}00040388 \ \approx 0{,}0005}$$

Si lo comparamos con el error de truncamiento, vemos que la cota contiene efectivamente al error:

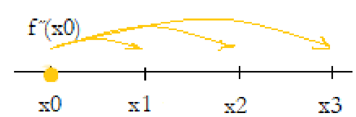
$$\text{error trunc.} = |\cos(1{,}000) - 0{,}54038| = 0{,}0000777$$

De los desarrollos anteriores, podemos ver que la precisión aumentó debido a que el esquema que usamos tenia OP=2, con tres puntos mientras que los que usamos en a) tenían OP=1.
De los incisos a), b) y c) obtuvimos tres formas de cómo mejorar la precisión de nuestra aproximación[2].

Eje 3. Obtener la fórmula de aproximación en diferencias finitas en adelanto de una derivada de orden 2 con orden de precisión 2.

En este caso nos piden OP= N – OD → 2=N – 2 → N=4 por lo que necesitaremos cuatro puntos para el desarrollo del esquema.

x1-x2=h ; x2-x0=2h ; x3-x0=3h



En adelanto

Planteamos la combinación lineal de f´´(x0) y desarrollaremos Taylor hasta el cuarto orden de la derivada:

$$f''(x0) = a\,f(x0) + bf(x1) + cf(x2) + df(x3) \qquad (9)$$

Taylor:

$$f(x1) = f(x0) + f'(x0)(h) + \frac{f''(x0)(h)^2}{2!} + \frac{f'''(x0)\,(h)^3}{3!} + \frac{f^{iv}(x0)\,(h)^4}{4!} + O(h^5)$$

$$f(x2) = f(x0) + f'(x0)(2h) + \frac{f''(x0)4\,h^2}{2!} + \frac{f'''(x0)\,8\,h^3}{3!} + \frac{f^{iv}(x0)\,16\,h^4}{4!} + O(h^5)$$

$$f(x3) = f(x0) + f'(x0)(3h) + \frac{f''(x0)9\,h^2}{2!} + \frac{f'''(x0)\,27\,h^3}{3!} + \frac{f^{iv}(x0)\,81\,h^4}{4!} + O(h^5)$$

Reemplazo en (9) y saco factor común:

$$f''(x0) = f(x0)[a+b+c+d] + f'(x0)[hb + 2hc + 3hd] + f''(x0)\left[\frac{h^2 b}{2} + \frac{4h^2 c}{2} + \frac{9h^2 d}{2}\right] + f'''(x0)\left[\frac{h^3 b}{6} + \frac{8h^3 c}{6} + \frac{27h^3 d}{6}\right] + f^{iv}(x0)\left[\frac{h^4 b}{24} + \frac{16\,h^4 c}{24} + \frac{81\,h^4 d}{24}\right] + O(h^5)$$

[2] Recordar que no siempre reducir el paso “h” implica una mejor aproximación, debido al aumento de los errores de redondeo.

Resolviendo para el sistema 4x4:

$$\begin{cases} a+b+c+d=0 \\ hb+2hc+3hd=0 \\ \dfrac{h^2b}{2}+\dfrac{4h^2c}{2}+\dfrac{9h^2d}{2}=1 \\ \dfrac{h^3b}{6}+\dfrac{8h^3c}{6}+\dfrac{27h^3d}{6}=0 \end{cases} \rightarrow \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & h & 2h & 3h & 0 \\ 0 & \frac{h^2}{2} & 2h^2 & \frac{9h^2}{2} & 1 \\ 0 & \frac{h^3}{6} & \frac{4h^3}{3} & \frac{9h^3}{2} & 0 \end{array}\right)$$

$$\rightarrow \quad a=\frac{2}{h^2} \quad b=\frac{-5}{h^2} \quad c=\frac{4}{h^2} \quad d=\frac{-1}{h^2}$$

Reemplazando en (9) obtenemos la fórmula de aproximación de la derivada de orden dos, utilizando un esquema en adelanto con tres puntos y orden de precisión 2:

$$\boxed{f''(x0)=\frac{1}{h^2}[2f(x0)-5f(x1)+4f(x2)-f(x3)]}$$

Y la cota del error de truncamiento:

$$\text{cota error trunc.} \leq \left|\text{máx}\left|f^{iv}(x)\right|\left[\frac{h^4b}{24}+\frac{16\,h^4c}{24}+\frac{81\,h^4d}{24}\right]\right| \qquad con\ \ \text{x0} \leq \text{x} \leq \text{x3}$$

$$\boxed{\text{cota error trunc.} \leq \left|\text{máx}\left|f^{iv}(x)\right|.\frac{h^2 11}{12}\right|}$$

Corroboramos el $O(h^2)$ del error como lo habían pedido en el enunciado.

Eje 4. Aproximar la segunda derivada para x=2 utilizando un esquema centrado y otro en adelanto utilizando en ambos casos tres puntos. Compare los órdenes del error de truncamiento.

x	x_0=1,90	x_1=2,00	x_2=2,10	x_3=2,20
xe^x	12,703199	14,778112	17,148957	19,855030

•Para el cálculo de la aproximación de f´´(2) con esquema centrado y tres puntos, debemos utilizar:

x	x_0=1,90	x_1=2,00	x_2=2,10
xe^x	12,7032	14,77811	17,14896

h= x1-x0 = x2-x1 = 0,1

Valor exacto de f´´(2,00)=29,556224

Este es un ejemplo donde la paridad(N)≠paridad(OD), y sucede que para los esquemas centrados vale OP=N-OD+1. Por lo que, si los cálculos no nos fallan, deberíamos obtener un error de orden 2.
La ecuación utilizando coeficientes indeterminados nos queda planteada como:

$$f''(x1)=a\,f(xo)+b\,f(x1)+c\,f(x2)$$

Los desarrollos de la serie de Taylor de f(x0) y f(x2) entorno a x1 se los dejamos a ustedes en esta oportunidad, pero les adelantamos que para este caso debido a lo antes mencionado sobre el OP que se gana, la expansión de Taylor la deberán extender hasta el término que contiene f^{iv}. Deberían llegar a la siguiente expresión de aproximación:

$$f''(x1) = \frac{1}{h^2}[\, f(xo) - 2\, f(x1) + \, f(x2)]$$

$$f''(2{,}00) = \frac{1}{0{,}1^2}[\, 12{,}703199 - 2.\,14{,}778112 + \, 17{,}148957]$$

$$\boxed{f''(2{,}00) = 29{,}593200}$$

y la cota de error de truncamiento como calculamos de antemano, tiene $O(h^2)$:

$$\text{cota error trunc.} \leq \left| \text{máx}\left|f^{iv}(x)\right| . \frac{h^2}{12} \right| \qquad con\ \text{x0} \leq \text{x} \leq \text{x2}$$

$$\text{cota error trunc.} \leq \left| \text{máx}\left|e^{x}(4+x)\right| . \frac{h^2}{12} \right|$$

$$\boxed{\text{cota error trunc.} \leq \ 0{,}0415 \ \approx 0{,}05}$$

Siendo el $\text{máx}|e^{x}(4+x)|$ para x=2,1y vale 49,813636.

Si lo comparamos con el error de truncamiento, vemos que la cota contiene efectivamente al error:

$$\text{error trunc.} = |e^{2}4 - 29{,}593200| = 0{,}0369767$$

•Para el cálculo de la aproximación de f´´(2) con esquema en adelanto y tres puntos, debemos utilizar:

x	x1=2,00	x2=2,10	x3=2,20
xe^{x}	14,778112	17,148957	19,855030

x3-x1=2h=0,2

x2-x1 = h=0,1

Valor exacto de f´´(2,00)=29,556224

Para un esquema en adelanto vale que OP=N-OD=1. Por lo que, si los cálculos no nos fallan, deberíamos obtener un error de orden 1.
La ecuación utilizando coeficientes indeterminados nos queda planteada como:

$$f''(x1) = a\, f(x1) + b\, f(x2) + c\, f(x3)$$

Los desarrollos de la serie de Taylor de f(x2) y f(x3) entorno a x1 se los dejamos a ustedes, pero tengan en cuenta que ya que tenemos tres puntos, la expansión de Taylor la deberán extender hasta el término que contiene f'''. Deberían llegar a la siguiente expresión de aproximación:

$$f''(x1) = \frac{1}{h^2}[\,f(x1) - 2\,f(x2) + \,f(x3)]$$

$$f''(2{,}00) = \frac{1}{0{,}1^2}[\,14{,}778112 - 2.\,17{,}148957 + \,19{,}855030]$$

$$\boxed{f''(2{,}00) = 33{,}5228}$$

y la cota de error de truncamiento como calculamos de antemano, tiene $O(h\,)$ y por lo tanto menor precisión que en el esquema centrado:

$$\text{cota error trunc.} \leq \left|\text{máx}\left|f'''(x)\right| .\text{h}\right| \qquad con\ \text{x1} \leq \text{x} \leq \text{x3}$$

$$\text{cota error trunc.} \leq \left|\text{máx}\left|e^x(3+x)\right| .\text{h}\right|$$

$$\boxed{\text{cota error trunc.} \leq 4{,}69 \approx 5}$$

Siendo el $\text{máx}|e^x(3+x)|$ para x=2,2 y vale 46,930070.

Si lo comparamos con el error de truncamiento, vemos que la cota contiene efectivamente al error:

$$\text{error trunc.} = |e^2 4 - 33{,}522800| = 3{,}967$$

De lo calculado anteriormente, podemos comprobar la ventaja de precisión que conseguimos utilizando un esquema centrado respecto de uno en adelanto/atraso cuando la paridad(N)≠paridad(OD) para igual cantidad de puntos, ganamos un orden de precisión.

1.2.1 Método alternativo de resolución con coeficientes indeterminados.

Para la resolución de los ejercicios anteriores, usamos expansiones de la serie de Taylor para luego calcular los coeficientes. Un método alternativo es generarse la misma combinación lineal, pero en lugar de reemplazar a las f(x) con Taylor, hacerlo con funciones sencillas de f(x) centradas en el punto donde se quiere calcular la derivada. Resolvamos el ejercicio 4 aplicando este método:

Eje 4. Aproximar la segunda derivada para x=2 utilizando un esquema centrado y otro en adelanto utilizando en ambos casos tres puntos. Compare los órdenes del error de truncamiento.

•Para el caso de aproximación en adelanto:

x	x_1=2,00	x_2=2,10	x_3=2,20
xe^x	14,778112	17,148957	19,855030

Nos planteamos la misma combinación lineal de f´´(x1):

$$f''(x1) = a\,f(x1) + b\,f(x2) + c\,f(x3) \qquad (11)$$

Tenemos 3 parámetros a elegir (a,b,c) y 3 puntos dato, por lo que vamos a armarnos una serie de funciones f(x) o polinomios de hasta orden 2 para los que sabemos que la segunda derivada f´´(x) dará valores exactos.

Si f(x)=1 → $f''(x1) = 0 = a + b + c$

Si f(x)=x-x1 → $f''(x1) = 0 = a\,(x1 - x1) + b\,(x2 - x1) + c\,(x3 - x1)$

Si f(x)=$(x - x1)^2$ → $f''(x1) = 2 = a\,(x1 - x1)^2 + b\,(x2 - x1)^2 + c\,(x3 - x1)^2$

Vemos que x3-x1=2h , x2-x1=h. Reemplazamos y nos queda:

Si f(x)=1 → $f''(x1) = 0 = a + b + c$

Si f(x)=x-x1 → $f''(x1) = 0 = b\,h + c\,2h$

Si f(x)=$(x - x1)^2$ → $f''(x1) = 2 = b\,h^2 + c\,4h^2$

Resolvemos este sistema de 3x3 y despejamos los coeficientes:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & h & 2h & 0 \\ 0 & h^2 & 4h^2 & 2 \end{array}\right| \rightarrow a = \frac{1}{h^2} \quad b = \frac{-2}{h^2} \quad c = \frac{1}{h^2}$$

Reemplazamos en (11) y vemos que llegamos a la misma expresión que empelando Taylor:

$$\boxed{f''(x1) = \frac{1}{h^2}[\,f(x1) - 2\,f(x2) + f(x3)]}$$

También aplica que OP=N-OD, y en este caso OP=1.

•Para la aproximación centrada f´´(x1):

x	x0=1,90	x1=2,00	x2=2,10
xe^x	12,7032	14,77811	17,14896

h= x1-x0 = x2-x1

Planteamos:

$$f''(x1) = a\,f(x0) + b\,f(x1) + c\,f(x2)$$

Si f(x)=1 → $f''(x1) = 0 = a + b + c$

Si f(x)=x-x1 → $f''(x1) = 0 = a\,(x0 - x1) + b\,(x1 - x1) + c\,(x2 - x1)$

Si f(x)=$(x - x1)^2$ → $f''(x1) = 2 = a\,(x0 - x1)^2 + b\,(x1 - x1)^2 + c\,(x2 - x1)^2$

Vemos que x2-x1=h , x1-x0=h. Reemplazamos y nos queda:

Si f(x)=1 → $f''(x1) = 0 = a + b + c$

Si f(x)=x-x1 → $f''(x1) = 0 = -ah + c\,h$

Si f(x)=$(x - x1)^2$ → $f''(x1) = 2 = a\,h^2 + c\,h^2$

Resolvemos el sistema 3x3:

$$\left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 0 \\ -h & 0 & h & 0 \\ h^2 & 0 & h^2 & 2 \end{array}\right| \rightarrow a = \frac{1}{h^2} \quad b = \frac{-2}{h^2} \quad c = \frac{1}{h^2}$$

Y la fórmula de aproximación nos queda:

$$\boxed{f''(x1) = \frac{1}{h^2}[\,f(x0) - 2\,f(x1) + f(x2)]}$$

que coincide con la calculada anteriormente. También aplica que OP=N-OD, y en este caso OP=1.

1.3 Conclusiones

De todo lo calculado anteriormente, remarquemos algunos puntos importantes:

• En general a mayor cantidad de puntos dato (más información que le agregamos al esquema), mejor aproximación obtenemos, pero aumentamos la cantidad de evaluaciones funcionales y también aumenta nuestro error de redondeo. Por lo tanto, la incorporación de más puntos no siempre implica un aumento de precisión.

•En general a pasos "h" más pequeños, mejor aproximación obtenemos, ya que disminuye el error de truncamiento. Pero, al mismo tiempo aumenta el error de redondeo, por lo que pasos más pequeños no siempre implican un aumento de precisión. Este efecto es el que hace a la diferenciación numérica inestable.

•Podemos mejorar una aproximación utilizando la extrapolación de Richardson.

• Podemos mejorar una aproximación utilizando esquemas de órdenes superiores, cumpliendo con OP=N-OD y OP=N-OD+1 para esquemas centrados cuando la paridad(N)≠paridad(OD).

•Prestar atención en la práctica a los errores de redondeo, ya que la diferenciación numérica es inestable porque valores pequeños de "h" que reducen el error de truncamiento, aumentan el error de redondeo.