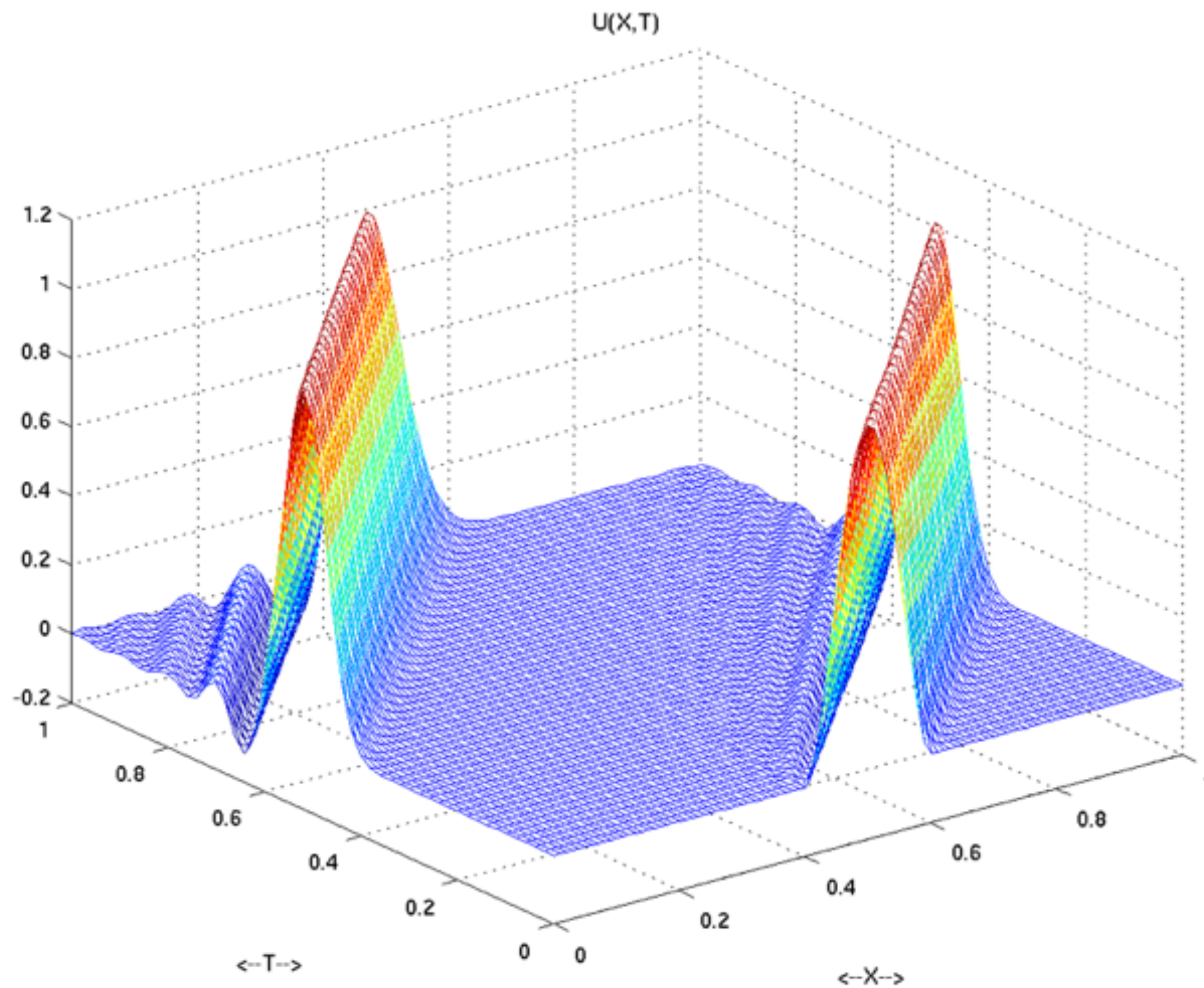
Diferenciación numérica

MAT-251

Dr. Alonso Ramírez Manzanares
CIMAT A.C.
e-mail: alram@cimat.mx
web: http://www.cimat.mx/~alram/met_num/

Dr. Salvador Botello
CIMAT A.C.
e-mail: botello@cimat.mx

¿Cuándo es necesario aplicar diferenciación numérica?



¿Cuándo es necesario aplicar diferenciación numérica?

- En la solución de ecuaciones diferenciales
- En todo lo que resta del curso.
- Ejemplos: Derivadas parciales de funciones R^2 -> R

¿Cuándo es necesario aplicar diferenciación numérica?

- En la solución de ecuaciones diferenciales
- En todo lo que resta del curso.
- Ejemplos: Derivadas parciales de funciones R^2 -> R

Teóricamente , tenemos que

- El cálculo de la derivada en un punto está dada por:

$$f'(x_0) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

- sin embargo, en la práctica (numéricamente) tenemos problemas por error de redondeo.

Aproximación numérica de la derivada

- Ahora, vamos a aproximar $f'(x_0)$, con $x_0 \in (a,b)$ y $f \in C^2[a,b]$, de tal forma que el intervalo define $x_1 = x_0 + h$ para $h \neq 0$, de tal manera que h es lo suficientemente pequeño para que $x_1 \in [a,b]$.

- Aproximamos utilizando el polinomio de Lagrange para f usando x_0 y x_1:

- para un número ξ en [a,b]. Aquí la idea es que obtengamos una cota del error.

Aproximación numérica de la derivada

- Ahora, vamos a aproximar $f'(x_0)$, con $x_0 \in (a,b)$ y $f \in C^2[a,b]$, de tal forma que el intervalo define $x_1 = x_0 + h$ para $h \neq 0$, de tal manera que h es lo suficientemente pequeño para que $x_1 \in [a,b]$.

- Aproximamos utilizando el polinomio de Lagrange para f usando x_0 y x_1:

$$
\begin{aligned}
f(x) &= P_{0,1}(x) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2!} f''(\xi(x)) \\
&= \frac{f(x_0)(x-x_0-h)}{-h} + \frac{f(x_0+h)(x-x_0)}{h} + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2} f''(\xi(x))
\end{aligned}
$$

- para un número ξ en $[a,b]$. Aquí la idea es que obtengamos una cota del error.

Aproximación numérica de la derivada

- Derivando

$$
\begin{aligned}
f(x) &= P_{0,1}(x) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2!} f''(\xi(x)) \\
&= \frac{f(x_0)(x-x_0-h)}{-h} + \frac{f(x_0+h)(x-x_0)}{h} + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2} f''(\xi(x))
\end{aligned}
$$

- obtenemos

Aproximación numérica de la derivada

- Derivando

$$\begin{aligned} f(x) &= P_{0,1}(x) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2!} f''(\xi(x)) \\ &= \frac{f(x_0)(x-x_0-h)}{-h} + \frac{f(x_0+h)(x-x_0)}{h} + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2} f''(\xi(x)) \end{aligned}$$

- obtenemos

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} + D_x\left[\frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2} f''(\xi(x))\right] \\ &= \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} + \frac{2(x-x_0)-h}{2} f''(\xi(x)) \\ &\quad + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2} D_x(f''(\xi(x))), \end{aligned}$$

Aproximación numérica de la derivada

- Por lo tanto la aproximación **PARA TODO x** que obtenemos es (lo que habíamos supuesto, mhh):

$$f'(x) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h},$$

- pero ahora tenemos una expresión para el error:

Aproximación numérica de la derivada

- Por lo tanto la aproximación **PARA TODO x** que obtenemos es (lo que habíamos supuesto, mhh):

$$f'(x) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h},$$

- pero ahora tenemos una expresión para el error:

$$\frac{2(x-x_0)-h}{2} f''(\xi(x)) + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2} D_x(f''(\xi(x))).$$

Aproximación numérica de la derivada

$$\frac{2(x-x_0)-h}{2} f''(\xi(x)) + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2} D_x(f''(\xi(x))).$$

- Esta parte del error depende de *h* y la segunda derivada de *f*

  - Esta parte del error depende de $D_x f''(\xi(x)) = f'''(\xi(x)) \cdot \xi'(x),$

  - Lo cual NO ES MUY UTIL pues contiene un término desconocido

Aproximación numérica de la derivada

$$\frac{2(x-x_0)-h}{2}f''(\xi(x)) + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2}D_x(f''(\xi(x))).$$

- Esta parte del error depende de *h* y la segunda derivada de *f*

  - Esta parte del error depende de $D_x f''(\xi(x)) = f'''(\xi(x)) \cdot \xi'(x),$

  - Lo cual NO ES MUY UTIL pues contiene un término desconocido

Aproximación numérica de la derivada

$$\frac{2(x-x_0)-h}{2} f''(\xi(x)) + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2} D_x(f''(\xi(x))).$$

- Esta parte del error depende de *h* y la segunda derivada de *f*

  - Esta parte del error depende de $D_x f''(\xi(x)) = f'''(\xi(x)) \cdot \xi'(x),$

  - Lo cual NO ES MUY UTIL pues contiene un término desconocido

Aproximación numérica de la derivada

$$\frac{2(x-x_0)-h}{2}f''(\xi(x)) + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2}D_x(f''(\xi(x))).$$

- Pero cuando $x = x_0$, (para estos puntos es lo que normalmente aproximamos) entonces este término desaparece y queda el error simplificado como:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} - \frac{h}{2}f''(\xi),$$

- para un número $\xi \in [x_0, x_0 + h]$.

Aproximación numérica de la derivada

- Supóngase que $|f''(x)|$ está acotado por M en $[x_0,x_0+h]$, entonces el error está acotado por $M|h| / 2$.

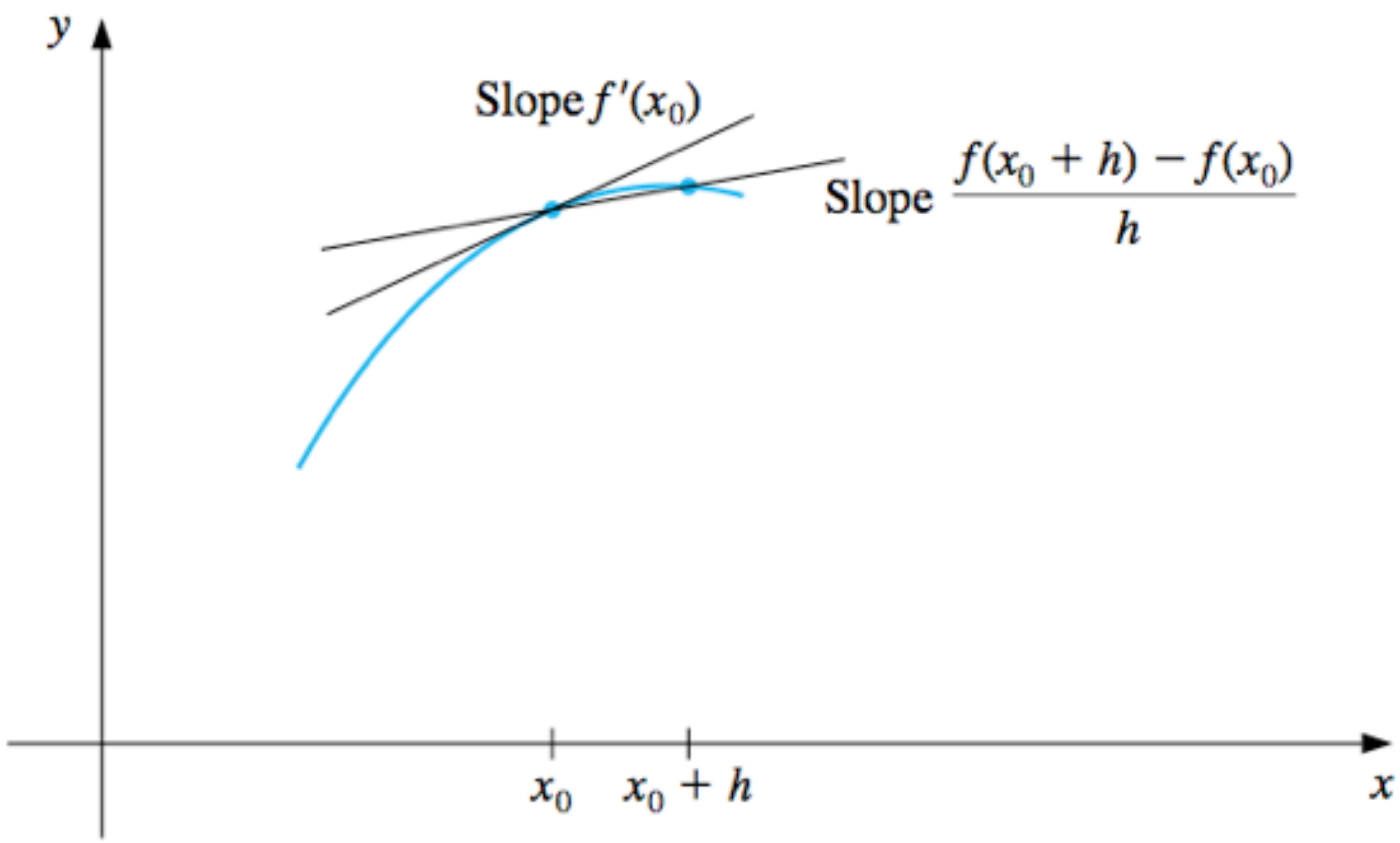
- Esta aproximación es entonces la bien conocida “diferencia hacia adelante” (forward difference formula) para $h > 0$, y “diferencia hacia atras” (backward difference formula) si $h<0$.

Aproximación de diferencias hacia adelante.

Aproximación numérica de la derivada

- Supóngase que $|f''(x)|$ está acotado por M en $[x_0, x_0+h]$, entonces el error está acotado por $M|h| / 2$.

- Esta aproximación es entonces la bien conocida "diferencia hacia adelante" (forward difference formula) para $h > 0$, y "diferencia hacia atras" (backward difference formula) si $h < 0$.



Aproximación de diferencias hacia adelante.

Ejemplo:

- Sea $f(x) = ln(x)$ y $x_0 = 1.8$.

- Donde el error de la aproximación por diferencia hacia adelante se comporta

$$\frac{|hf''(\xi)|}{2} = \frac{|h|}{2\xi^2} \leq \frac{|h|}{2(1.8)^2},$$

Ejemplo:

- Sea *f(x)* = *ln(x)* y $x_0 = 1.8$.

- Donde el error de la aproximación por diferencia hacia adelante se comporta

$$\frac{|hf''(\xi)|}{2} = \frac{|h|}{2\xi^2} \leq \frac{|h|}{2(1.8)^2},$$

Ejemplo:

- Sea $f(x) = ln(x)$ y $x_0 = 1.8$.

- Donde el error de la aproximación por diferencia hacia adelante se comporta

$$\frac{|hf''(\xi)|}{2} = \frac{|h|}{2\xi^2} \leq \frac{|h|}{2(1.8)^2},$$

Caso donde el error es más grande ya que:

Ejemplo:

- Sea *f(x)* = *ln(x)* y $x_0 = 1.8$.

- Donde el error de la aproximación por diferencia hacia adelante se comporta

$$\frac{|hf''(\xi)|}{2} = \frac{|h|}{2\xi^2} \leq \frac{|h|}{2(1.8)^2},$$

Caso donde el error es más grande ya que:

$$1.8 < \xi < 1.8 + h.$$

Ejemplo:

- Aproximaciones obtenidas para diferentes valores de *h* (valor exacto $\frac{1}{1.8} = 0.\bar{5},$)

h	$f(1.8+h)$	$\frac{f(1.8+h)-f(1.8)}{h}$	$\frac{\lvert h\rvert}{2(1.8)^2}$
0.1	0.64185389	0.5406722	0.0154321
0.01	0.59332685	0.5540180	0.0015432
0.001	0.58834207	0.5554013	0.0001543

Aproximación de derivadas en el caso general

- Para *n+1* números distintos en un intervalo $[x_0,x_n]$, y usando polinomios de Lagrange

$$f(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)L_j(x) + \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x))$$

- donde suponemos que $f \in C^{n+1}[x_0,x_n]$ y el valor $\xi(x)$ está dentro de $[x_0,x_n]$.

- La derivada de esta expresión nos lleva a

Aproximación de derivadas en el caso general

- Para *n+1* números distintos en un intervalo $[x_0,x_n]$, y usando polinomios de Lagrange

$$f(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)L_j(x) + \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x))$$

- donde suponemos que $f \in C^{n+1}[x_0,x_n]$ y el valor $\xi(x)$ está dentro de $[x_0,x_n]$.

- La derivada de esta expresión nos lleva a

$$\begin{aligned} f'(x) &= \sum_{j=0}^{n} f(x_j)L_j'(x) + D_x\left[\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!}\right] f^{(n+1)}(\xi(x)) \\ &\quad + \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} D_x[f^{(n+1)}(\xi(x))]. \end{aligned}$$

Aproximación de derivadas en el caso general

- En esta expresión usamos el mismo razonamiento que en el caso anterior, tomando en cuenta la aproximación para los x_k.

$$f'(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)L'_j(x) + D_x\left[\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!}\right] f^{(n+1)}(\xi(x))$$
$$\cancel{+ \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} D_x[f^{(n+1)}(\xi(x))]}.$$

- Quedando en particular:

-

Aproximación de derivadas en el caso general

- En esta expresión usamos el mismo razonamiento que en el caso anterior, tomando en cuenta la aproximación para los x_k.

$$f'(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)L_j'(x) + D_x\left[\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!}\right] f^{(n+1)}(\xi(x))$$
$$\cancel{+ \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} D_x[f^{(n+1)}(\xi(x))].}$$

- Quedando en particular:

$$f'(x_k) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)L_j'(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_k))}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (x_k - x_j).$$

Aproximación de derivadas en el caso general

- En esta expresión usamos el mismo razonamiento que en el caso anterior, tomando en cuenta la aproximación para los x_k.

$$f'(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) L_j'(x) + D_x \left[\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} \right] f^{(n+1)}(\xi(x))$$

$$\cancel{+ \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} D_x[f^{(n+1)}(\xi(x))].}$$

- Quedando en particular:

$$f'(x_k) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) L_j'(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_k))}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n} (x_k - x_j).$$

en el caso de 2 puntos quedaba $x_0 - x_1 = -h$

Aproximación de derivadas en el caso general

$$f'(x_k) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) L_j'(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_k))}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n} (x_k - x_j).$$

- Esta aproximación de derivadas se conoce como la aproximación de n+1 puntos. En teoría, entre más puntos agreguemos es más exacta, pero en la práctica resulta problemático usar muchos puntos por el error de redondeo y las múltiples evaluaciones de la función.

Aproximación de derivada de 3 puntos

- Calculemos

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \rightarrow L_0'(x) = \frac{2x-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

$$L_1'(x) = \frac{2x-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

$$L_2'(x) = \frac{2x-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

Aproximación de derivada de 3 puntos

- Por lo tanto, usando $$f'(x_k) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) L_j'(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_k))}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n} (x_k - x_j).$$
- Tenemos para una x_j
- y cuando los nodos son equidistantes (x_0, $x_1 = x_0+h$, $x_2 = x_0 +2h$)

*

- para un $\xi \in [x_0, x_0 + 2h]$ (queda un -2h y un -h).

Aproximación de derivada de 3 puntos

- Por lo tanto, usando $$f'(x_k) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)L_j'(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_k))}{(n+1)!}\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}(x_k - x_j).$$
- Tenemos para una x_j

$$f'(x_j) = f(x_0)L_0'(x_j) + f(x_1)L_1'(x_j) + f(x_2)L_2'(x_j)$$

- y cuando los nodos son equidistantes (x_0, $x_1 = x_0+h$, $x_2 = x_0 + 2h$)

*

- para un $\xi \in [x_0, x_0 + 2h]$ (queda un -2h y un -h).

Aproximación de derivada de 3 puntos

- Por lo tanto, usando $$f'(x_k) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)L'_j(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_k))}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (x_k - x_j).$$
- Tenemos para una x_j

$$f'(x_j) = f(x_0)L'_0(x_j) + f(x_1)L'_1(x_j) + f(x_2)L'_2(x_j) + \frac{1}{6}f^{(3)}(\xi_j) \prod_{k=0,k\neq j}^{2} (x_j - x_k)$$

- y cuando los nodos son equidistantes (x_0, $x_1 = x_0+h$, $x_2 = x_0 +2h$)

*

- para un $\xi \in [x_0, x_0 + 2h]$ (queda un -2h y un -h).

Aproximación de derivada de 3 puntos

- Por lo tanto, usando $$f'(x_k) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)L_j'(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_k))}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (x_k - x_j).$$
- Tenemos para una x_j

$$f'(x_j) = f(x_0)L_0'(x_j) + f(x_1)L_1'(x_j) + f(x_2)L_2'(x_j)$$

$$+\frac{1}{6}f^{(3)}(\xi_j) \prod_{k=0,k\neq j}^{2} (x_j - x_k)$$

- y cuando los nodos son equidistantes (x_0, $x_1 = x_0+h$, $x_2 = x_0 +2h$)

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_0+h) - f(x_0+2h)] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi) \; *$$

- para un $\xi \in [x_0, x_0 + 2h]$ (queda un -2h y un -h).

Aproximación de derivada de 3 puntos

- Por lo tanto, usando $$f'(x_k) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)L_j'(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_k))}{(n+1)!}\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(x_k - x_j).$$
- Tenemos para una x_j

$$f'(x_j) = f(x_0)L_0'(x_j) + f(x_1)L_1'(x_j) + f(x_2)L_2'(x_j)$$

$$+\frac{1}{6}f^{(3)}(\xi_j)\prod_{k=0,k\neq j}^{2}(x_j - x_k)$$

- y cuando los nodos son equidistantes (x_0, $x_1 = x_0+h$, $x_2 = x_0 +2h$)

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_0+h) - f(x_0+2h)] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi) \; *$$

- para un $\xi \in [x_0, x_0 + 2h]$ (queda un -2h y un -h).

Aproximación de derivada de 3 puntos

- Si hacemos los mismos cálculos, pero ahora tomando el polinomio de Lagrange que pasa por los puntos x_0-h, x_0, x_0+h, obtenemos:
  - para un $\xi \in [x_0-h\ x_0+h]$.
- Pero nótese que este error es la mitad en magnitud que el anterior, y que la función se evalúa en solo 2 puntos (aún así, ambas se llaman fórmulas de aproximación de 3 puntos).
- El anterior se debería de utilizar cuando se está en las fronteras del intervalo, con -h en la frontera derecha y con +h en la frontera izquierda.
- La expresión de arriba se debería de utilizar en todos los demás casos

Aproximación de derivada de 3 puntos

- Si hacemos los mismos cálculos, pero ahora tomando el polinomio de Lagrange que pasa por los puntos x_0-h, x_0, x_0+h, obtenemos:

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[f(x_0+h) - f(x_0-h)] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi),$$

  - para un $\xi \in [x_0-h \ x_0+h]$.

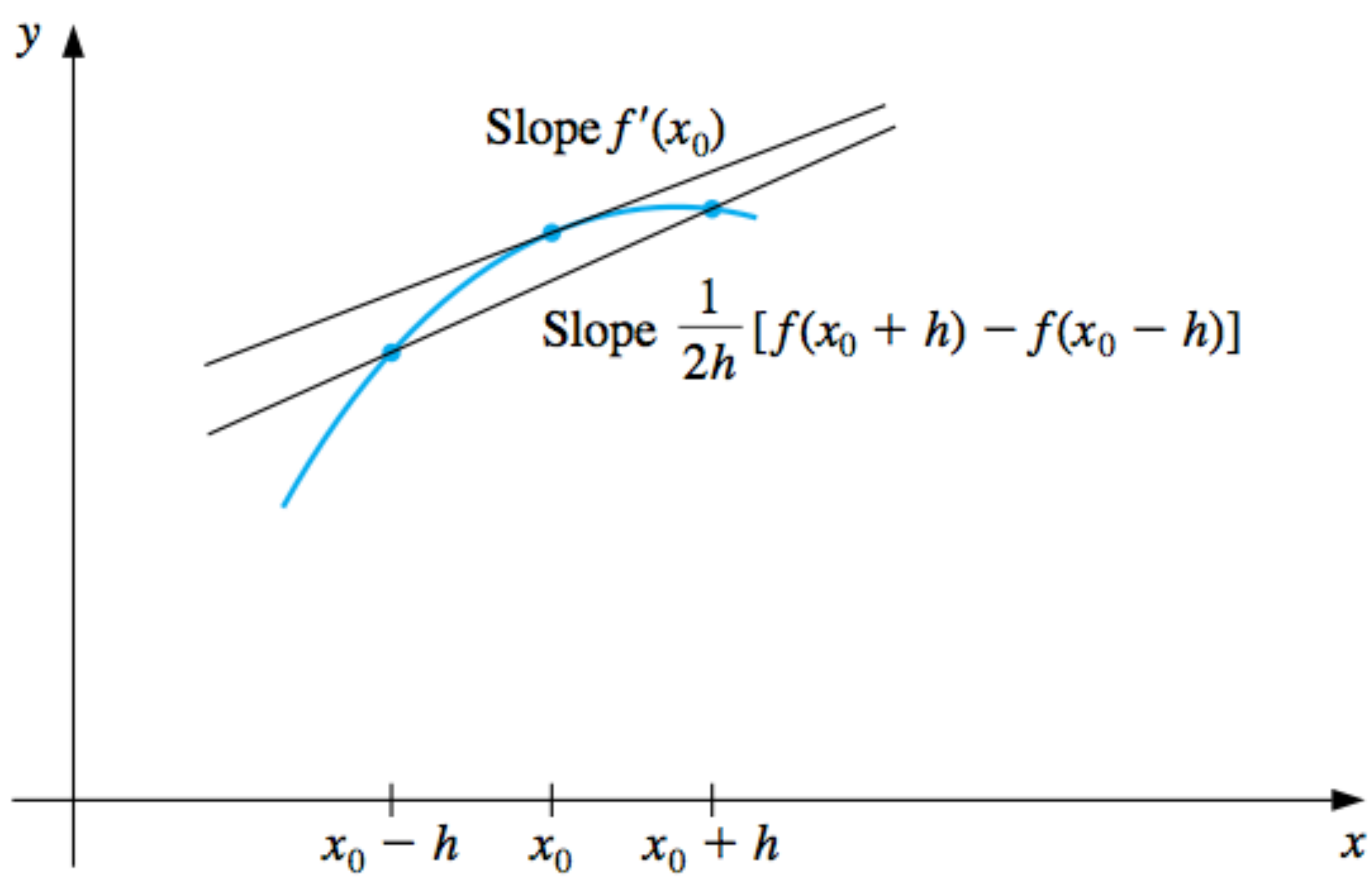
- Pero nótese que este error es la mitad en magnitud que el anterior, y que la función se evalúa en solo 2 puntos (aún así, ambas se llaman fórmulas de aproximación de 3 puntos).

- El anterior se debería de utilizar cuando se está en las fronteras del intervalo, con -h en la frontera derecha y con +h en la frontera izquierda.

- La expresión de arriba se debería de utilizar en todos los demás casos

Aproximación de derivada de 3 puntos

- La última es una aproximación centrada, e intuitivamente funciona mejor porque toma información de adelante y atrás, y no solo de una dirección.



Aproximación de derivada de 5 puntos

- Análogamente, si derivamos las expresiones usando el polinomio de Lagrange que pasa por 5 puntos desde x_0-2h hasta x_0+2h obtenemos

- O bien para el intervalo x_0 hasta x_0+4h

Aproximación de derivada de 5 puntos

- Análogamente, si derivamos las expresiones usando el polinomio de Lagrange que pasa por 5 puntos desde x_0-2h hasta x_0+2h obtenemos

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}[f(x_0-2h) - 8f(x_0-h) + 8f(x_0+h) - f(x_0+2h)] + \frac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi),$$

- O bien para el intervalo x_0 hasta x_0+4h

Aproximación de derivada de 5 puntos

- Análogamente, si derivamos las expresiones usando el polinomio de Lagrange que pasa por 5 puntos desde x_0-2h hasta x_0+2h obtenemos

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}[f(x_0-2h) - 8f(x_0-h) + 8f(x_0+h) - f(x_0+2h)] + \frac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi),$$

- O bien para el intervalo x_0 hasta x_0+4h

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= \frac{1}{12h}[-25f(x_0) + 48f(x_0+h) - 36f(x_0+2h) \\ &\quad + 16f(x_0+3h) - 3f(x_0+4h)] + \frac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi), \end{aligned}$$

Ejemplo comparativo:

- Tenemos la tabla de evaluaciones de la función $f(x) = xe^x$

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

- Queremos aproximar f'(2.0) (sabemos que es $(x+1)e^x$, lo resulta en 22.167168)

- Los errores son:

Ejemplo comparativo:

- Tenemos la tabla de evaluaciones de la función $f(x) = xe^x$

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

- Queremos aproximar f'(2.0) (sabemos que es $(x+1)e^x$, lo resulta en 22.167168)

- Los errores son:

Ejemplo comparativo:

- Tenemos la tabla de evaluaciones de la función $f(x) = xe^x$

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

- Queremos aproximar f'(2.0) (sabemos que es $(x+1)e^x$, lo resulta en 22.167168)

- Los errores son:

Ejemplo comparativo:

- Tenemos la tabla de evaluaciones de la función *f(x) = xe^x*

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

- Queremos aproximar f'(2.0) (sabemos que es $(x+1)e^x$, lo resulta en 22.167168)

- Los errores son:

Ejemplo comparativo:

- Tenemos la tabla de evaluaciones de la función *f(x) = xe^x*

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

- Queremos aproximar f'(2.0) (sabemos que es $(x+1)e^x$, lo resulta en 22.167168)

- Los errores son:

Ejemplo comparativo:

- Tenemos la tabla de evaluaciones de la función $f(x) = xe^x$

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

- Queremos aproximar f'(2.0) (sabemos que es $(x+1)e^x$, lo resulta en 22.167168)

- Los errores son:

Ejemplo comparativo:

- Tenemos la tabla de evaluaciones de la función $f(x) = xe^x$

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

- Queremos aproximar f'(2.0) (sabemos que es $(x+1)e^x$, lo resulta en 22.167168)

Aproximaciones de 3 puntos

- Los errores son:

Ejemplo comparativo:

- Tenemos la tabla de evaluaciones de la función $f(x) = xe^x$

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

- Queremos aproximar f'(2.0) (sabemos que es $(x+1)e^x$, lo resulta en 22.167168)

Aproximaciones de 3 puntos

Endpoint with $h = 0.1$: $\frac{1}{0.2}[-3f(2.0) + 4f(2.1) - f(2.2)] = 22.032310.$

Endpoint with $h = -0.1$: $\frac{1}{-0.2}[-3f(2.0) + 4f(1.9) - f(1.8)] = 22.054525.$

Midpoint with $h = 0.1$: $\frac{1}{0.2}[f(2.1) - f(1.9)] = 22.228790.$

Midpoint with $h = 0.2$: $\frac{1}{0.4}[f(2.2) - f(1.8)] = 22.414163.$

- Los errores son:

Ejemplo comparativo:

- Tenemos la tabla de evaluaciones de la función $f(x) = xe^x$

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

- Queremos aproximar f'(2.0) (sabemos que es $(x+1)e^x$, lo resulta en 22.167168)

Aproximaciones de 3 puntos

Endpoint with $h = 0.1$: $\frac{1}{0.2}[-3f(2.0) + 4f(2.1) - f(2.2)] = 22.032310.$

Endpoint with $h = -0.1$: $\frac{1}{-0.2}[-3f(2.0) + 4f(1.9) - f(1.8)] = 22.054525.$

Midpoint with $h = 0.1$: $\frac{1}{0.2}[f(2.1) - f(1.9)] = 22.228790.$

Midpoint with $h = 0.2$: $\frac{1}{0.4}[f(2.2) - f(1.8)] = 22.414163.$

Aproximación de 5 puntos

- Los errores son:

Ejemplo comparativo:

- Tenemos la tabla de evaluaciones de la función $f(x) = xe^x$

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

- Queremos aproximar f'(2.0) (sabemos que es $(x+1)e^x$, lo resulta en 22.167168)

Aproximaciones de 3 puntos

$$\text{Endpoint with } h = 0.1: \quad \frac{1}{0.2}[-3f(2.0) + 4f(2.1) - f(2.2)] = 22.032310.$$

$$\text{Endpoint with } h = -0.1: \quad \frac{1}{-0.2}[-3f(2.0) + 4f(1.9) - f(1.8)] = 22.054525.$$

$$\text{Midpoint with } h = 0.1: \quad \frac{1}{0.2}[f(2.1) - f(1.9)] = 22.228790.$$

$$\text{Midpoint with } h = 0.2: \quad \frac{1}{0.4}[f(2.2) - f(1.8)] = 22.414163.$$

Aproximación de 5 puntos

$$\frac{1}{1.2}[f(1.8) - 8f(1.9) + 8f(2.1) - f(2.2)] = 22.166999.$$

- Los errores son:

Ejemplo comparativo:

- Tenemos la tabla de evaluaciones de la función $f(x) = xe^x$

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

- Queremos aproximar f'(2.0) (sabemos que es $(x+1)e^x$, lo resulta en 22.167168)

Aproximaciones de 3 puntos

$$\text{Endpoint with } h = 0.1: \quad \frac{1}{0.2}[-3f(2.0) + 4f(2.1) - f(2.2)] = 22.032310.$$

$$\text{Endpoint with } h = -0.1: \quad \frac{1}{-0.2}[-3f(2.0) + 4f(1.9) - f(1.8)] = 22.054525.$$

$$\text{Midpoint with } h = 0.1: \quad \frac{1}{0.2}[f(2.1) - f(1.9)] = 22.228790.$$

$$\text{Midpoint with } h = 0.2: \quad \frac{1}{0.4}[f(2.2) - f(1.8)] = 22.414163.$$

Aproximación de 5 puntos

$$\frac{1}{1.2}[f(1.8) - 8f(1.9) + 8f(2.1) - f(2.2)] = 22.166999.$$

- Los errores son:

$$1.35\times10^{-1}, 1.13\times10^{-1}, -6.16\times10^{-2}, -2.47\times10^{-1},$$

Ejemplo comparativo:

- Tenemos la tabla de evaluaciones de la función $f(x) = xe^x$

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

- Queremos aproximar f'(2.0) (sabemos que es $(x+1)e^x$, lo resulta en 22.167168)

Aproximaciones de 3 puntos

Endpoint with $h = 0.1$: $\frac{1}{0.2}[-3f(2.0) + 4f(2.1) - f(2.2)] = 22.032310.$

Endpoint with $h = -0.1$: $\frac{1}{-0.2}[-3f(2.0) + 4f(1.9) - f(1.8)] = 22.054525.$

Midpoint with $h = 0.1$: $\frac{1}{0.2}[f(2.1) - f(1.9)] = 22.228790.$

Midpoint with $h = 0.2$: $\frac{1}{0.4}[f(2.2) - f(1.8)] = 22.414163.$

Aproximación de 5 puntos

$$\frac{1}{1.2}[f(1.8) - 8f(1.9) + 8f(2.1) - f(2.2)] = 22.166999.$$

- Los errores son:

$$1.35\times10^{-1}, 1.13\times10^{-1}, -6.16\times10^{-2}, -2.47\times10^{-1}, 1.69 \times 10^{-4}$$

Otro Factor: Error de redondeo

- Veamos que tan determinante es el error de redondeo, en la ecuación de 3 puntos centrada

- Cuando calculamos las expresiones tenemos errores numéricos relacionados de la siguiente manera:

- Con el siguiente error de aproximación total (error de redondeo + truncamiento):

Otro Factor: Error de redondeo

- Veamos que tan determinante es el error de redondeo, en la ecuación de 3 puntos centrada

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[f(x_0+h) - f(x_0-h)] - \frac{h^2}{6} f'''(\xi).$$

- Cuando calculamos las expresiones tenemos errores numéricos relacionados de la siguiente manera:

- Con el siguiente error de aproximación total (error de redondeo + truncamiento):

Otro Factor: Error de redondeo

- Veamos que tan determinante es el error de redondeo, en la ecuación de 3 puntos centrada

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[f(x_0+h) - f(x_0-h)] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi).$$

- Cuando calculamos las expresiones tenemos errores numéricos relacionados de la siguiente manera:

$$f(x_0+h) = \tilde{f}(x_0+h) + e(x_0+h) \quad \text{and} \quad f(x_0-h) = \tilde{f}(x_0-h) + e(x_0-h).$$

- Con el siguiente error de aproximación total (error de redondeo + truncamiento):

Otro Factor: Error de redondeo

- Veamos que tan determinante es el error de redondeo, en la ecuación de 3 puntos centrada

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[f(x_0+h) - f(x_0-h)] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi).$$

- Cuando calculamos las expresiones tenemos errores numéricos relacionados de la siguiente manera:

$$f(x_0+h) = \tilde{f}(x_0+h) + e(x_0+h) \quad \text{and} \quad f(x_0-h) = \tilde{f}(x_0-h) + e(x_0-h).$$

- Con el siguiente error de aproximación total (error de redondeo + truncamiento):

$$f'(x_0) - \frac{\tilde{f}(x_0+h) - \tilde{f}(x_0-h)}{2h} = \frac{e(x_0+h) - e(x_0-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}f'''(\xi),$$

Error de redondeo

- Suponiendo que los errores de redondeo están acotados por un número ε y la 3ª derivada de *f(x)* por un valor M, tenemos que:

$$\left| f'(x_0) - \frac{\tilde{f}(x_0+h) - \tilde{f}(x_0+h)}{2h} \right| \leq \frac{\varepsilon}{h} + \frac{h^2}{6} M.$$

- Entonces, como casi siempre en la vida, tenemos un compromiso en *h*: queremos reducir el error de truncamiento pero no aumentar el error de redondeo.

- En la práctica, si usamos un *h* demasiado pequeño el error de redondeo domina (recordar que pasa cuando el error de redondeo es dividido por un número pequeño).

Ejemplo de error de redondeo

- Dada la tabla

Table 4.10

x	$\sin x$	x	$\sin x$
0.800	0.71736	0.901	0.78395
0.850	0.75128	0.902	0.78457
0.880	0.77074	0.905	0.78643
0.890	0.77707	0.910	0.78950
0.895	0.78021	0.920	0.79560
0.898	0.78208	0.950	0.81342
0.899	0.78270	1.000	0.84147

- Aproximar f'(0.9) (el valor de la derivada es cos(0.9)=0.62161) usando la siguiente fórmula para **diferentes** valores de *h (cifras de 5 dígitos, continua...)*

-

Ejemplo de error de redondeo

- Dada la tabla

Table 4.10

x	$\sin x$	x	$\sin x$
0.800	0.71736	0.901	0.78395
0.850	0.75128	0.902	0.78457
0.880	0.77074	0.905	0.78643
0.890	0.77707	0.910	0.78950
0.895	0.78021	0.920	0.79560
0.898	0.78208	0.950	0.81342
0.899	0.78270	1.000	0.84147

- Aproximar f'(0.9) (el valor de la derivada es cos(0.9)=0.62161) usando la siguiente fórmula para **diferentes** valores de *h (cifras de 5 dígitos, continua...)*

- $$f'(0.900) \approx \frac{f(0.900+h) - f(0.900-h)}{2h}$$

Ejemplo de error de redondeo

Table 4.11

h	Approximation to $f'(0.900)$	Error
0.001	0.62500	0.00339
0.002	0.62250	0.00089
0.005	0.62200	0.00039
0.010	0.62150	−0.00011
0.020	0.62150	−0.00011
0.050	0.62140	−0.00021
0.100	0.62055	−0.00106

- Minimizar

- En este caso podemos calcular una cota para M en [.8 y 1] y cos(0.8) para encontrar

Ejemplo de error de redondeo

Table 4.11

h	Approximation to $f'(0.900)$	Error
0.001	0.62500	0.00339
0.002	0.62250	0.00089
0.005	0.62200	0.00039
0.010	0.62150	−0.00011
0.020	0.62150	−0.00011
0.050	0.62140	−0.00021
0.100	0.62055	−0.00106

- Minimizar
- En este caso podemos calcular una cota para M en [.8 y 1] y cos(0.8) para encontrar

Ejemplo de error de redondeo

Table 4.11

h	Approximation to $f'(0.900)$	Error
0.001	0.62500	0.00339
0.002	0.62250	0.00089
0.005	0.62200	0.00039
0.010	0.62150	−0.00011
0.020	0.62150	−0.00011
0.050	0.62140	−0.00021
0.100	0.62055	−0.00106

mínimo cerca de

- Minimizar

- En este caso podemos calcular una cota para M en [.8 y 1] y cos(0.8) para encontrar

Ejemplo de error de redondeo

Table 4.11

h	Approximation to $f'(0.900)$	Error
0.001	0.62500	0.00339
0.002	0.62250	0.00089
0.005	0.62200	0.00039
0.010	0.62150	−0.00011
0.020	0.62150	−0.00011
0.050	0.62140	−0.00021
0.100	0.62055	−0.00106

mínimo cerca de

- Minimizar

$$e(h) = \frac{\varepsilon}{h} + \frac{h^2}{6} M,$$

- En este caso podemos calcular una cota para M en [.8 y 1] y cos(0.8) para encontrar

Ejemplo de error de redondeo

Table 4.11

h	Approximation to $f'(0.900)$	Error
0.001	0.62500	0.00339
0.002	0.62250	0.00089
0.005	0.62200	0.00039
0.010	0.62150	−0.00011
0.020	0.62150	−0.00011
0.050	0.62140	−0.00021
0.100	0.62055	−0.00106

mínimo cerca de

- Minimizar

$$e(h) = \frac{\varepsilon}{h} + \frac{h^2}{6}M, \longrightarrow$$

- En este caso podemos calcular una cota para M en [.8 y 1] y cos(0.8) para encontrar

Ejemplo de error de redondeo

Table 4.11

h	Approximation to $f'(0.900)$	Error
0.001	0.62500	0.00339
0.002	0.62250	0.00089
0.005	0.62200	0.00039
0.010	0.62150	−0.00011
0.020	0.62150	−0.00011
0.050	0.62140	−0.00021
0.100	0.62055	−0.00106

mínimo cerca de

- Minimizar

$$e(h) = \frac{\varepsilon}{h} + \frac{h^2}{6}M, \longrightarrow 0 = e'(h) = -\frac{\varepsilon}{h^2} + \frac{h}{3}M$$

- En este caso podemos calcular una cota para M en [.8 y 1] y cos(0.8) para encontrar

Ejemplo de error de redondeo

Table 4.11

h	Approximation to $f'(0.900)$	Error
0.001	0.62500	0.00339
0.002	0.62250	0.00089
0.005	0.62200	0.00039
0.010	0.62150	−0.00011
0.020	0.62150	−0.00011
0.050	0.62140	−0.00021
0.100	0.62055	−0.00106

mínimo cerca de

- Minimizar

$$e(h) = \frac{\varepsilon}{h} + \frac{h^2}{6}M, \longrightarrow 0 = e'(h) = -\frac{\varepsilon}{h^2} + \frac{h}{3}M$$

- En este caso podemos calcular una cota para M en [.8 y 1] y cos(0.8) para encontrar

$$h = \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{M}} = \sqrt[3]{\frac{3(0.000005)}{0.69671}} \approx 0.028,$$

Ejemplo de error de redondeo

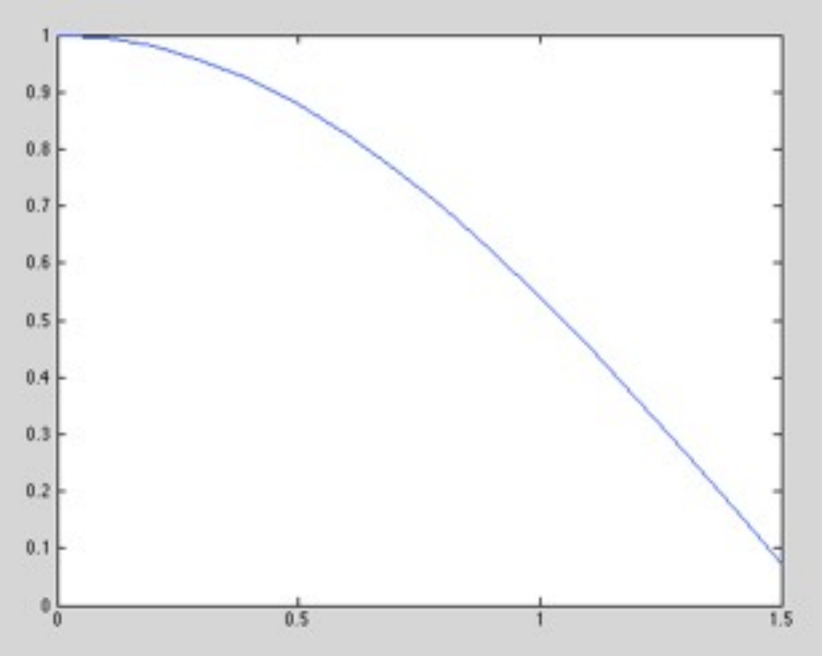


Table 4.11

h	Approximation to $f'(0.900)$	E
0.001	0.62500	0.00339
0.002	0.62250	0.00089
0.005	0.62200	0.00039
0.010	0.62150	−0.00011
0.020	0.62150	−0.00011
0.050	0.62140	−0.00021
0.100	0.62055	−0.00106

mínimo cerca de

- Minimizar

$$e(h) = \frac{\varepsilon}{h} + \frac{h^2}{6}M, \longrightarrow 0 = e'(h) = -\frac{\varepsilon}{h^2} + \frac{h}{3}M$$

- En este caso podemos calcular una cota para M en [.8 y 1] y cos(0.8) para encontrar

$$h = \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{M}} = \sqrt[3]{\frac{3(0.000005)}{0.69671}} \approx 0.028,$$

Conclusiones

Conclusiones

- ¡¡La diferenciación numérica es inestable numéricamente!!

Conclusiones

- ¡¡La diferenciación numérica es inestable numéricamente!!
- Y debe de ser evitada en lo posible.

Conclusiones

- ¡¡La diferenciación numérica es inestable numéricamente!!
- Y debe de ser evitada en lo posible.
- No podemos evitarla :(

Aproximación de derivadas de orden superior

- La aproximación de segundo orden de la derivada centrada en el intervalo $[x_0-h\ ,\ x_0+h]$ está dada por:

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}[f(x_0-h) - 2f(x_0) + f(x_0+h)] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi),$$

- para un número ξ entre $[x_0-h\ ,\ x_0+h]$

Aproximación de derivadas de orden superior

- La aproximación de segundo orden de la derivada centrada en el intervalo $[x_0-h\ ,\ x_0+h]$ está dada por:

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}[f(x_0 - h) - 2f(x_0) + f(x_0 + h)] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi),$$

- para un número ξ entre $[x_0-h\ ,\ x_0+h]$

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

Aproximación de derivadas de orden superior

- La aproximación de segundo orden de la derivada centrada en el intervalo $[x_0-h\ ,\ x_0+h]$ está dada por:

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}[f(x_0-h) - 2f(x_0) + f(x_0+h)] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi),$$

- para un número ξ entre $[x_0-h\ ,\ x_0+h]$

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

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

Aproximación de derivadas de orden superior

- La aproximación de segundo orden de la derivada centrada en el intervalo $[x_0-h\ ,\ x_0+h]$ está dada por:

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}[f(x_0-h) - 2f(x_0) + f(x_0+h)] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi),$$

- para un número ξ entre $[x_0-h\ ,\ x_0+h]$

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

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

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

Aproximación de derivadas de orden superior

- De igual manera se puede aproximar la derivada de segundo orden hacia adelante como

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) + f(x_0)}{h^2}$$

- En general las derivadas centrales quedan como

Aproximación de derivadas de orden superior

- De igual manera se puede aproximar la derivada de segundo orden hacia adelante como

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) + f(x_0)}{h^2}$$

- En general las derivadas centrales quedan como

$$f_h^{(n)}(x_0) = \frac{1}{h^n} \sum_{i=0}^{n} (-1)^i \binom{n}{i} f(x_0 + (n/2 - i)h)$$

Aproximación de derivadas de orden superior

- De igual manera se puede aproximar la derivada de segundo orden hacia adelante como

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) + f(x_0)}{h^2}$$

- En general las derivadas centrales quedan como

$$f_h^{(n)}(x_0) = \frac{1}{h^n} \sum_{i=0}^{n} (-1)^i \binom{n}{i} f(x_0 + (n/2 - i)h)$$

Caso particular:

Aproximación de derivadas de orden superior

- De igual manera se puede aproximar la derivada de segundo orden hacia adelante como

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) + f(x_0)}{h^2}$$

- En general las derivadas centrales quedan como

$$f_h^{(n)}(x_0) = \frac{1}{h^n} \sum_{i=0}^{n} (-1)^i \binom{n}{i} f(x_0 + (n/2 - i)h)$$

Caso particular: $f''(x_0) = \frac{1}{h^2}[f(x_0 - h) - 2f(x_0) + f(x_0 + h)]$

Derivadas de alto orden

- En general, lo que uno hace para aproximar derivadas de alto orden es

S	S'	S''	S'''	$\ldots$
s_0				
	$s_1 - s_0$			
s_1		$s_2 - 2s_1 + s_0$		
	$s_2 - s_1$		$s_3 - 3s_2 + 3s_1 - s_0$	
s_2		$s_3 - 2s_2 + s_1$		
	$s_3 - s_2$		$\ddots$	
s_3				
$\vdots$				