APLICACIONES COMPUTACIONALES

INGENIERÍA EJECUCIÓN MECÁNICA

DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA

UdeSantiago de Chile

Teorema de Taylor

Si la función f y sus primeras $n + 1$ derivadas son continuas en un intervalo que contiene a y x, entonces el valor de la función en x está dado por

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

$$+ \frac{f^{(3)}(a)}{3!}(x-a)^3 + \cdots$$

$$+ \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + R_n$$

=> Serie de Taylor

donde el residuo R_n se define como

$$R_n = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x_{i+1} - x_i)^{n+1}$$

=> Residuo

En esencia, la *serie de Taylor* proporciona un medio para predecir el valor de una función en un punto en términos del valor de la función y sus derivadas en otro punto. En particular, el teorema establece que cualquier función suave puede aproximarse por un polinomio.

Aproximación de Orden Cero

$$f(x_{i+1}) \approx f(x_i)$$

Aproximación de Orden Uno o Primer Orden

$$f(x_{i+1}) \approx f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i)$$

Aproximación de Orden Dos o Segundo Orden

$$f(x_{i+1}) \approx f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}(x_{i+1} - x_i)$$

De manera similar, se agregan términos adicionales para desarrollar la expansión completa de la serie de Taylor:

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

=> Serie de Taylor

$$+ \frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}(x_{i+1} - x_i)^3 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(x_{i+1} - x_i)^n + R_n$$

Con frecuencia es conveniente simplificar la serie de Taylor definiendo un tamaño de paso o incremento *h* = *x(i*+1) – *x(i)* y expresando la ecuación (4.5) como:

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

DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA

SERIE DE TEYLOR

UdeSantiago de Chile

Aproximaciones de un polinomio mediante la serie de Taylor

Planteamiento del problema. Use expansiones de la serie de Taylor de los órdenes cero hasta cuatro para aproximar la función

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

desde $x_i = 0$ con $h = 1$. Esto es, prediga el valor de la función en $x_{i+1} = 1$.

$$f(x_{i+1}) \cong 1.2$$

$$f(x_{i+1}) \cong 1.2 - 0.25h$$

$$f(x_{i+1}) \cong 1.2 - 0.25h - 0.5h^2$$

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

n	f(1)
0	1,2
1	0,95
2	0,45
4	0,2

SERIE DE TEYLOR

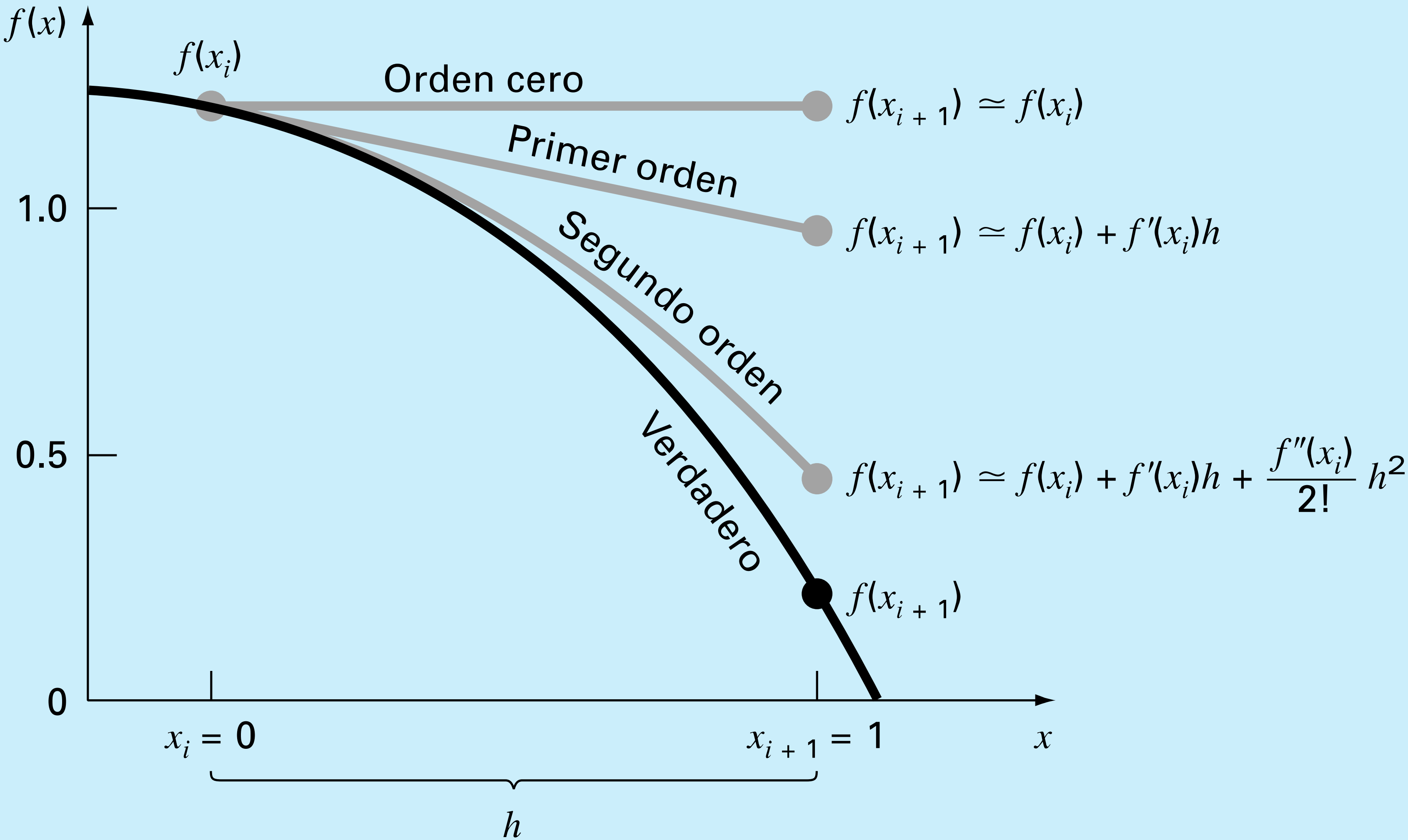


TABLA 4.1 Aproximaciones mediante la serie de Taylor de $f(x) = \cos x$ en $x_{i+1} = \pi/3$ usando como punto base $\pi/4$. Los valores se presentan para varios órdenes (n) de aproximación.

Orden n	$f^{(n)}(x)$	$f(\pi/3)$	ε_t
0	$\cos x$	0.707106781	−41.4
1	$-\text{sen}\ x$	0.521986659	−4.4
2	$-\cos x$	0.497754491	0.449
3	$\text{sen}\ x$	0.499869147	2.62×10^{-2}
4	$\cos x$	0.500007551	-1.51×10^{-3}
5	$-\text{sen}\ x$	0.500000304	-6.08×10^{-5}
6	$-\cos x$	0.499999988	2.40×10^{-6}

Observe que la mejor aproximación se consigue con los primeros términos. En este caso, al agregar el tercer termino, el error se redujo al 2.62E–02 %, lo cual significa que se alcanzó el 99.9738% del valor exacto. Por consiguiente, aunque se le agreguen más términos a la serie el error decrece, aunque la mejoría será mínima.

Ahora, truncando la serie después del termino con la primera derivada y despejando la derivada, se obtiene:

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

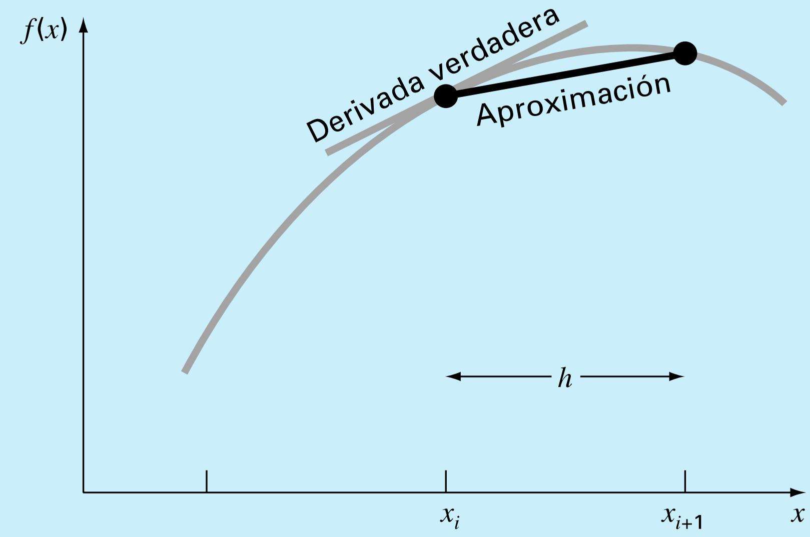
$$f'(x_i) = \frac{\Delta f_i}{h} + O(h)$$

donde a "*Δfi*" se le conoce como la ***primera diferencia hacia adelante*** y a "*h*" se le llama el tamaño del **paso o incremento**; esto es, la longitud del intervalo sobre el cual se realiza la aproximación.

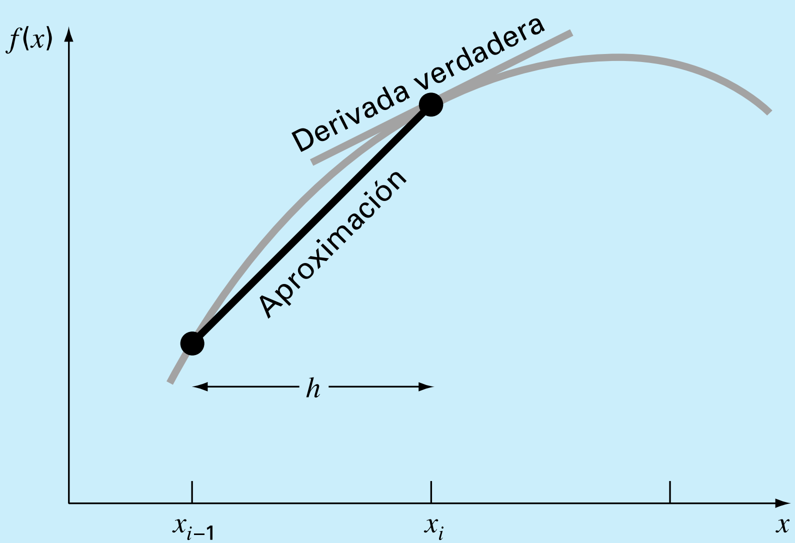
Se le llama diferencia "hacia delante", porque usa los datos en *(i)* e *(i + 1)* para estimar la derivada.

Al termino completo *Δf/h* se le conoce como *primer diferencia finita dividida.*

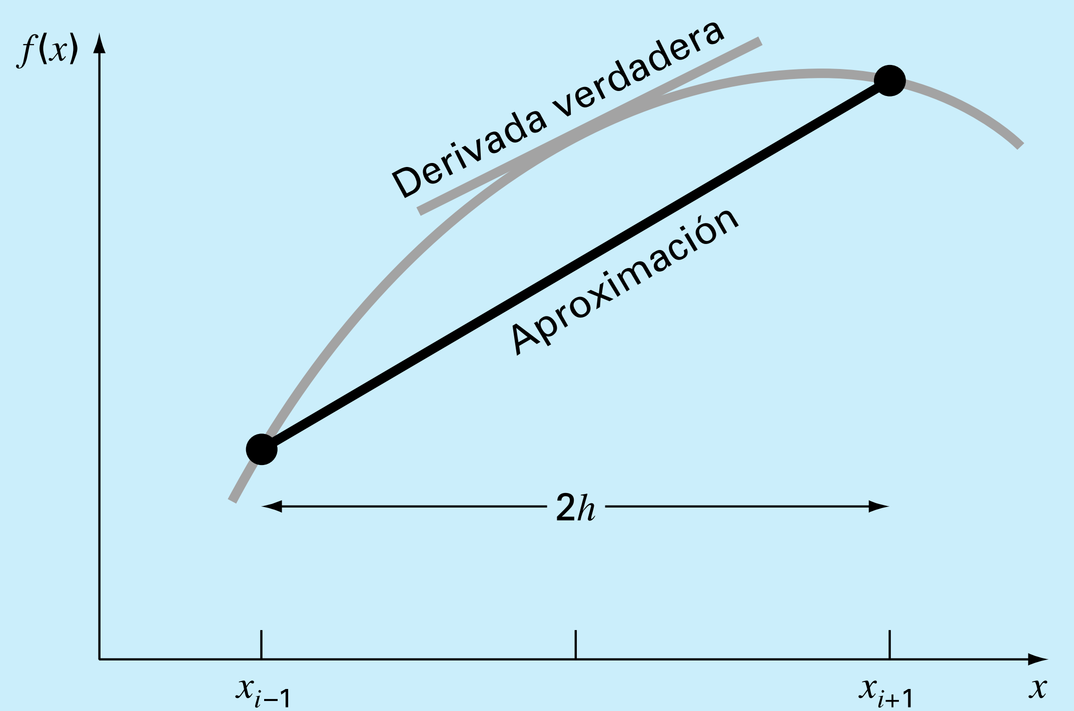
Gráfica de aproximaciones con diferencias finitas divididas de la primera derivada:
a) hacia delante,
b) hacia atrás,
c) centrales.



a)



b)



c)

Aproximación a la primera derivada con diferencia hacia atrás. La serie de Taylor se expande hacia atrás para calcular un valor anterior sobre la base del valor actual,

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 - \cdots \tag{4.19}$$

Truncando la ecuación después de la primera derivada y reordenando los términos se obtiene

$$f'(x_i) \cong \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} = \frac{\nabla f_1}{h} \tag{4.20}$$

donde el error es $O(h)$, y a ∇f_i se le conoce como *primera diferencia dividida hacia atrás*.

Aproximación a la primera derivada con diferencias centradas. Una tercera forma de aproximar la primera derivada consiste en restar la ecuación (4.19) de la expansión de la serie de Taylor hacia adelante:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \cdots \tag{4.21}$$

para obtener

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

de donde se despeja

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

o

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} - O(h^2) \tag{4.22}$$

UdeSantiago de Chile

Aproximación de derivadas por diferencias finitas divididas

Planteamiento del problema. Use aproximaciones con diferencias finitas hacia adelante y hacia atrás de $O(h)$ y una aproximación de diferencia centrada de $O(h^2)$ para estimar la primera derivada de

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

en $x = 0.5$ utilizando un incremento de $h = 0.5$. Repita el cálculo con $h = 0.25$. Observe que la derivada se calcula directamente como

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

y se puede utilizar para calcular el valor verdadero como $f'(0.5) = -0.9125$.

DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA

DIFERENCIA FINITA DIVIDIDA

UdeSantiago de Chile

ERROR	h=0.5	h=0.25
Diferencia Finita hacia adelante	58.9 %	26.5 %
Diferencia Finita hacia atrás	39.7 %	21.7 %
Diferencia Finita Centrada	9.6 %	2.4 %

Observe que el error de truncamiento es del orden de h^2 en contraste con las aproximaciones hacia adelante y hacia atrás, que fueron del orden de *h.* Por lo tanto, el análisis de la serie de Taylor ofrece la información práctica de que la diferencia centrada es una representación más exacta de la derivada. Por ejemplo, si se disminuye el tamaño del incremento a la mitad, usando diferencias hacia atrás o hacia adelante, el error de truncamiento se reducirá aproximadamente a la mitad; mientras que con diferencias centradas el error se reduciría a la cuarta parte.

Aproximaciones por diferencias finitas para derivadas de orden superior. Además de las primeras derivadas, la expansión en serie de Taylor sirve para obtener estimaciones numéricas de las derivadas de orden superior. Para esto, se escribe la expansión en serie de Taylor hacia adelante para $f(x_{i+2})$ en términos de $f(x_i)$:

$$f(x_{i+2}) = f(x_i) + f'(x_i)(2h) + \frac{f''(x_i)}{2!}(2h)^2 + \cdots \tag{4.23}$$

La ecuación (4.21) se multiplica por 2 y se resta de la ecuación (4.23) para obtener

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

de donde se despeja

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} + O(h) \tag{4.24}$$

Esta relación se llama la *segunda diferencia finita dividida hacia adelante*. Manipulaciones similares se emplean para obtener la versión hacia atrás

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

y la versión centrada

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

Como fue el caso con las aproximaciones de la primer derivada, el caso centrado es más exacto. Observe también que la versión centrada puede ser expresada en forma alternativa como

$$f''(x_i) \cong \frac{\dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \dfrac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}}{h}$$

DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA
DIFERENCIA FINITA DIVIDIDA DE ORDEN SUPERIOR

UdeSantiago de Chile

Fórmulas de diferencias divididas finitas hacia delante.

Primera derivada	Error
$f'(x_i) = \dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}$	$O(h)$
$f'(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h}$	$O(h^2)$
Segunda derivada	
$f''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2}$	$O(h)$
$f''(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+3}) + 4f(x_{i+2}) - 5f(x_{i+1}) + 2f(x_i)}{h^2}$	$O(h^2)$

Se muestran 2 versiones: La última versión emplea más términos de la expansión de la serie de Taylor y, en consecuencia, es más exacta.

Fórmulas de diferencias divididas finitas hacia delante.

Tercera derivada

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

$$f'''(x_i) = \frac{-3f(x_{i+4}) + 14f(x_{i+3}) - 24f(x_{i+2}) + 18f(x_{i+1}) - 5f(x_i)}{2h^3} \qquad O(h^2)$$

Cuarta derivada

$$f''''(x_i) = \frac{f(x_{i+4}) - 4f(x_{i+3}) + 6f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^4} \qquad O(h)$$

$$f''''(x_i) = \frac{-2f(x_{i+5}) + 11f(x_{i+4}) - 24f(x_{i+3}) + 26f(x_{i+2}) - 14f(x_{i+1}) + 3f(x_i)}{h^4} \qquad O(h^2)$$

Se muestran 2 versiones: La última versión emplea más términos de la expansión de la serie de Taylor y, en consecuencia, es más exacta.

UdeSantiago de Chile

Fórmulas de diferencias divididas finitas hacia atrás.

Primera derivada	Error
$f'(x_i) = \dfrac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}$	$O(h)$
$f'(x_i) = \dfrac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{2h}$	$O(h^2)$
Segunda derivada	
$f''(x_i) = \dfrac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2}$	$O(h)$
$f''(x_i) = \dfrac{2f(x_i) - 5f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{h^2}$	$O(h^2)$

Se muestran 2 versiones: La última versión emplea más términos de la expansión de la serie de Taylor y, en consecuencia, es más exacta.

Fórmulas de diferencias divididas finitas hacia atrás.

Tercera derivada

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

$$f'''(x_i) = \frac{5f(x_i) - 18f(x_{i-1}) + 24f(x_{i-2}) - 14f(x_{i-3}) + 3f(x_{i-4})}{2h^3} \qquad O(h^2)$$

Cuarta derivada

$$f''''(x_i) = \frac{f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + 6f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-3}) + f(x_{i-4})}{h^4} \qquad O(h)$$

$$f''''(x_i) = \frac{3f(x_i) - 14f(x_{i-1}) + 26f(x_{i-2}) - 24f(x_{i-3}) + 11f(x_{i-4}) - 2f(x_{i-5})}{h^4} \qquad O(h^2)$$

Se muestran 2 versiones: La última versión emplea más términos de la expansión de la serie de Taylor y, en consecuencia, es más exacta.

UdeSantiago de Chile

Fórmulas de diferencias divididas finitas centradas.

Primera derivada — Error

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

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{12h} \qquad O(h^4)$$

Segunda derivada

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

$$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 16f(x_{i+1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{12h^2} \qquad O(h^4)$$

Se muestran 2 versiones: La última versión emplea más términos de la expansión de la serie de Taylor y, en consecuencia, es más exacta.

Fórmulas de diferencias divididas finitas centradas.

Tercera derivada

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

$$f'''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 8f(x_{i+2}) - 13f(x_{i+1}) + 13f(x_{i-1}) - 8f(x_{i-2}) + f(x_{i-3})}{8h^3} \qquad O(h^4)$$

Cuarta derivada

$$f''''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + 6f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^4} \qquad O(h^2)$$

$$f''''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 12f(x_{i+2}) + 39f(x_{i+1}) + 56f(x_i) - 39f(x_{i-1}) + 12f(x_{i-2}) + f(x_{i-3})}{6h^4} \qquad O(h^4)$$

Se muestran 2 versiones: La última versión emplea más términos de la expansión de la serie de Taylor y, en consecuencia, es más exacta.