REVISTA PROYECCIONES N° 6: 115-125.
DICIEMBRE 1983.

RESUMEN DE SEMINARIOS:

DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA Y UN ESTUDIO OPTIMAL
(SEMINARIO DE TITULACIÓN CARRERA PEDAGOGÍA
MATEMÁTICAS Y FÍSICA).

SEMINARISTAS: MARIO ALVAREZ S.
VICTOR TAPIA M.

PROFESOR GUIA: RICARDO SOTO M.

1. INTRODUCCION.

Las fórmulas de diferenciación numérica para la j -ésima derivada $f^{(j)}(x)$ son esencialmente de la forma

$$(1.1) \quad \sum_{i=0}^n a_i f(x_i) \approx f^{(j)}(x)$$

donde los puntos x_i son llamados "nodos" y los números a_i son llamados "pesos".

Un modo frecuentemente usado para obtener fórmulas de **diferenciación numérica** es a partir de polinomios de interpolación, diferen-

ciándolos. Este tipo de fórmulas son llamadas **FÓRMULAS LAGRANGIANAS**, debido a que son obtenidas diferenciando el polinomio interpolante de Lagrange. En este caso los nodos x_i están predeterminados (son los puntos de interpolación), siendo necesario entonces sólo determinar los parámetros a_i .

Otro camino para obtener fórmulas de diferenciación numérica considera eliminar la restricción de que $f(x)$ sea evaluada en puntos x_i predeterminados. Es decir, para obtener la fórmula, es necesario ahora determinar tanto los coeficientes a_i como los nodos x_i . Estas fórmulas se dice que son del **TIPO GAUSSIANO**.

El problema entonces es escoger los nodos y pesos de modo que la suma en (1.1) sea una "buena aproximación" a la derivada $f^{(j)}(x)$. Esto significa que el **error de diferenciación**, el cual definimos por

$$(1.2) \quad E^{(j)}(f(x)) = f^{(j)}(x) - \sum_{i=0}^n a_i f(x_i)$$

sea en valor absoluto, menor o igual que un cierto valor $\epsilon > 0$ deseado.

Un criterio frecuentemente usado para estimar la exactitud de una fórmula de diferenciación tiene su fundamento en la siguiente

Definición 1.1.

Diremos que una fórmula de diferenciación numérica para la j -ésima derivada tiene "grado de exactitud m ", si m es el máximo entero para el cual $E^{(j)}(x^K) = 0$, $K=1,2,\dots, m$, mientras que $E^{(j)}(x^{m+1}) \neq 0$. Es decir, si una fórmula tiene grado de exactitud m , entonces todo polinomio de grado menor o igual a m es derivado exactamente por dicha fórmula.

2. FORMULAS LAGRANGIANAS.

Sea $f(x)$ una función que pasa por los $n+1$ puntos $\{(x_i, f(x_i))\}$ y $L(x) = \sum_{i=0}^n \ell_i(x) f(x_i)$, con $\ell_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x-x_j}{x_i-x_j}$, el polinomio interpolante de Lagrange. Entonces

$$(2.1) \quad f(x) = L(x) + E(x), \quad \text{con}$$

$$(2.2) \quad E(x) = f(x) - L(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

donde ξ depende de x y $\xi \in I = [a, b]$, intervalo que contiene todos los puntos x_i .

Es razonable suponer que diferenciando ambos miembros de (2.1) puede obtenerse una aproximación para la derivada $f'(x)$.

$$(2.3) \quad f'(x) \cong L'(x) = \sum_{i=0}^n \ell'_i(x) f(x_i), \quad \text{con "error de discretización"}$$

$$(2.4) \quad E(f(x)) = \frac{1}{(n+1)!} \frac{d}{dx} \left[\sum_{i=0}^n (x - x_i) f^{(n+1)}(\xi) \right]$$

Bajo el supuesto que $f(x)$ es $n + j$ veces continuamente diferenciable sobre I , puede probarse ([11]) que la suma

$$(2.5) \quad \sum_{i=0}^n \ell_i^{(j)}(x) f(x_i) \quad \text{da una aproximación para la } j\text{-ésima derivada de } f(x), \text{ con error dado por}$$

$$(2.6) \quad E^{(j)}(f(x)) = \sum_{K=0}^j \binom{j}{K} \frac{f^{(n+1+K)}(\eta_K)}{(n+1+K)!} \left[\prod_{i=0}^n (x-x_i) \right]^{(j)},$$

$$a \leq \eta_K \leq b$$

Más interesante es el caso en que los puntos x_i son igualmente espaciados, es decir,

$$h = x_{i+1} - x_i \quad \text{y} \quad s = \frac{x - x_0}{h}, \quad i = 0, 1, \dots, n-1$$

Después de algún trabajo se obtiene

$$(2.7) \quad f^{(j)}(x_s) \approx \frac{1}{h^j} \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^{n-i} f(x_i)}{i!(n-i)!} \frac{d^j}{dx^j} \left[\frac{s^{[n]}}{s-i} \right]$$

donde $s^{[n]} = s(s-1)(s-2) \dots (s-n)$ y

$$(2.8) \quad E^{(j)}(f(x)) = \sum_{K=0}^j \binom{j}{K} \frac{f^{(n+1+K)}(\eta_K)}{(n+1+K)!} \left[h^{n+1} s^{[n]} \right]^{(j-K)}$$

Para $n=2$, por ejemplo, resulta fácil obtener las conocidas fórmulas de 3 puntos

$$(2.9) \quad f'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - \frac{1}{6} h^2 f'''(\eta_i)$$

$$(2.10) \quad f''(x_i) = \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2} - \frac{1}{12} h^2 f^{(IV)}(\eta_i)$$

La siguiente tabla da los coeficientes de las fórmulas lagran-
gianas de la forma

$$(2.11) \quad f^{(j)}(x_s) = \frac{1}{\alpha h^j} \sum_{i=0}^n a_i f(x_i) + E_j^{(j)}(f(x_s))$$

n	j	α	s	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	$E_j(f_s)$
1	1	1	0	-1	1					$-1/2 h f''$ $1/2$

n	j	α	s	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	E_j
2	1	2	0	-3	4	-1				$1/3 h^2 f'''$
		2	1	-1	0	1				$-1/6$
		2	2	1	-4	3				$1/3$
2	2	1	0	1	-2	1				$-h f'''$
		2	1	1	1	-2	1			$-1/12 h^2 f^{IV}$
		1	2	1	-2	1				$h f'''$

n	j	α	s	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	E_j
3	1	6	0	-11	18	-9	2			$-1/4 h^3 f^{IV}$
		6	1	-2	-3	6	1			$1/12$
		6	2	1	-6	3	2			$-1/12$
		6	3	-2	9	-18	11			$1/4$
3	2	1	0	2	-5	4	-1			$11/12 h^2 f^{IV}$
		1	1	1	-2	1	0			$-1/12$
		1	2	0	1	-2	1			$-1/12$
		1	3	-1	4	-5	2			$11/12$

n	j	α	s	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	$E_j(f_s)$
3	3	1	0	-1	3	-3	1			$-3/2 h f^{IV}$
		1	1	-1	3	-3	1			$-1/2$
		1	2	-1	3	-3	1			$1/2$
		1	3	-1	3	-3	1			$3/2$

n	j	α	s	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	$E_j(f_s)$
4	1	12	0	-25	48	-36	16	-3		$1/5 h^4 f^V$
		12	1	-3	10	18	-6	1		$-1/20$
		12	2	1	-8	0	8	-1		$1/30$
		12	3	-1	6	-18	10	3		$-1/20$
		12	4	3	-16	36	-48	25		$1/5$
4	2	12	0	35	-104	114	-56	11		$-5/6 h^3 f^V$
		12	1	11	-20	6	4	-1		$1/12$
		12	2	-1	16	-30	16	-1		$1/90 h_3^4 f^{VI}$
		12	3	-1	4	6	-20	11		$-1/12 h_3^3 f^V$
		12	4	11	-56	114	-104	35		$5/6$
4	3	2	0	-5	18	-24	19	-3		$7/4 h^2 f^V$
		2	1	-3	10	-12	6	-1		$1/4$
		2	2	-1	2	0	-2	1		$-1/4$
		2	3	1	-6	12	-10	3		$1/4$
		2	4	3	-14	24	-18	5		$7/4$
4	4	1	0	1	4	6	-4	1		$-2 h f^V$
		1	1	1	4	6	-4	1		-1
		1	2	1	4	6	-4	1		$-1/6 h_3^2 f^{VI}$
		1	3	1	4	6	-4	1		$1 h f^V$
		1	4	1	4	6	-4	1		2

3. COMENTARIOS.

3.1. Las fórmulas lagrangianas de diferenciación numérica, con $(n+1)$ puntos, tienen grado de exactitud n , es decir, son exactas cuando se aplican a polinomios de grado menor o igual a n . En efecto, si $f(x)$ es un polinomio de grado n , entonces $f^{(n+1)}(x) = 0$ y

$$E^{(j)}(f(x)) = 0$$

3.2. Por simple observación de las fórmulas dadas por (2.11) vemos que el error de discretización decrece a medida que h se toma más pequeño. Parecería entonces, que bastaría tomar h suficientemente pequeño para obtener fórmulas arbitrariamente exactas. Sin embargo, en la práctica se presenta generalmente otro factor que causa errores. Este es debido a los errores en los valores $f(x_i)$ o errores de entrada y es llamado "error de redondeo". Así entonces, vemos que si en (2.11) empleamos los valores aproximados $\tilde{f}(x_i)$ en lugar de los valores exactos $f(x_i)$, decrecer el valor de h implicará incrementar el error de redondeo pues la diferencia $f(x_i) - \tilde{f}(x_i)$ en cada término de la suma aparece multiplicado por el factor $\frac{1}{h^j}$.

Como el error de discretización depende directamente de h , mientras que el error de redondeo depende inversamente de h , la conclusión entonces es que debe existir un **valor óptimo de h** , por debajo del cual la aproximación empeora.

En el caso particular de la fórmula (2.9) el error de discretización E_D aparece dado por

$$(3.1) \quad |E_D| = \frac{1}{6} h^2 f'''(\eta) \quad , \quad x_{i-1} \leq \eta \leq x_{i+1} \quad ,$$

mientras que el error de redondeo E_R está acotado por

$$(3.2) \quad |E_R| \leq \frac{\delta}{h}, \text{ donde}$$

$$|f(x_i) - \tilde{f}(x_i)| \leq \delta \quad \forall i$$

Luego para obtener un h óptimo para la fórmula (2.9) debemos minimizar

$$(3.3) \quad E(h) = \frac{h^2}{6} M + \frac{\delta}{h},$$

$$\text{siendo} \quad M = \max_{x_{i-1} \leq x \leq x_{i+1}} |f^{III}(x)|$$

Resulta entonces para la fórmula (2.9) un espaciado h óptimo dado por

$$h = \sqrt[3]{\frac{3\delta}{M}}$$

con el mismo argumento obtenemos para la fórmula (2.10)

$$h = 2 \sqrt[4]{\frac{3\delta}{M}}$$

4. PUNTOS OPTIMOS DE DIFERENCIACION NUMERICA.

En esta sección se busca localizar la existencia de puntos "óptimos" que permitan incrementar la exactitud de las fórmulas Lagrangianas.

$$(4.1) \quad f^{(j)}(x) = \sum_{i=0}^n \ell_i^{(j)}(x) f(x_i) + E^{(j)}(f(x)), \text{ las que son exactas}$$

tas si $f(x)$ es un polinomio de grado menor o igual a n .

Se quiere entonces hallar $(n+1)$ puntos distintos x_i , $i=0,1,\dots,n$, localizados "irregularmente", tal que la fórmula (4.1) alcance el máximo grado de exactitud en un punto fijo $x = a$.

Mediante la transformación $x' = x - a$ puede tomarse este punto fijo como $x' = 0$ o simplemente $x = 0$ para simplificar la escritura.

Entonces la fórmula que buscamos es del tipo Gaussiano y tiene la forma

$$(4.2) \quad \left. \frac{d^j}{dx^j} [P_{n+m}(x)] \right|_{x=0} = \sum_{i=0}^n \lambda_i P_{n+m}(x_i)$$

donde $P_{n+m}(x)$ es un polinomio de grado $n+m$ y los x_i y λ_i dependen sólo de n .

Interesa, ahora, determinar para cada j el mayor entero m para el cual la fórmula (4.2) es válida.

Sea $j = 1$. Entonces el error de diferenciación (2.6) puede escribirse como

$$(4.3) \quad E^{(1)}(f(x)) = \frac{d}{dx} \left[\prod_{i=0}^n (x - x_i) \right] \frac{f^{(n+1)}(\xi_0)}{(n+1)!} + \prod_{i=0}^n (x - x_i) \frac{f^{(n+2)}(\xi_1)}{(n+2)!}$$

Si f es un polinomio de grado $n+1$, es claro que el segundo término del lado derecho se anula. Luego para que el error en (4.3) sea nulo es suficiente que

$$(4.4) \quad \left. \frac{d}{dx} \left[\prod_{i=0}^n (x - x_i) \right] \right|_{x=0} = \sum_{k=0}^n x_0 x_1 \dots x_{k-1} x_{k+1} \dots x_n = 0$$

lo que equivale a la condición

$$(4.5) \quad \sum_{i=0}^n \frac{1}{x_i} = 0, \quad x_i \neq 0$$

Si $f(x)$ es una función arbitraria, en (4.3) no podemos hacer nulos simultáneamente los dos términos del segundo miembro. Podemos elegir sin embargo, los puntos x_i satisfaciendo (4.5), lo que hará más pequeño el valor absoluto del coeficiente de $f^{(n+2)}(\xi_1)$ al reducir $\prod_{i=0}^n x_i$ en valor absoluto sujeto a la condición $|x_i| \leq 1$.

Por ejemplo, para una fórmula de tres puntos podemos satisfacer

$$\sum_{i=0}^n \frac{1}{x_i} = 0 \quad \text{y} \quad |x_i| \leq 1,$$

poniendo $x_0 = 1/N$, $x_1 = -1/(N+1)$, $x_2 = 1$.

Así $|x_0 x_1 x_2| = \frac{1}{N(N+1)} < \varepsilon$ para N arbitrariamente grande.

Sin embargo, en la práctica no podemos hacer ε indefinidamente pequeño porque esto requeriría que al menos dos de los puntos x_i llegaran a estar indefinidamente próximos uno del otro.

Para la segunda derivada ($j=2$), la condición (4.5) toma la forma

$$(4.6) \quad \sum_{\substack{i,K=0 \\ i \neq K}}^n \frac{1}{x_i x_K} = 0$$

Si algún x_i es cero, la condición necesaria para que la fórmula (4.2) tenga exactitud de grado $n+1$ puede escribirse como

$$(4.7) \quad \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{1}{x_j} = 0$$

Se prueba también, en el trabajo que aquí se resume, que la fórmula (4.2) de $n+1$ puntos es exacta para la derivada j -ésima ($j > 2$) de polinomios de grado menor o igual a $(n+1)$ y además que esta fórmula no es válida cuando se aplica a polinomios de grado mayor o igual que $(n+2)$. Es decir, $(n+1)$ es el mayor grado de exactitud que alcanzan las fórmulas del tipo Gaussiano (con $n+1$ puntos) para la derivada j -ésima.

BIBLIOGRAFIA.

- [1] BICKLEY, W.G. Formulae for Numerical Differentiation. The Mathematical Gazette. Vol. 25, Pags. 19-27. 1941.
- [2] CONTE, S.D., DE BOOR, Carl. Análisis Numérico. Mc Graw-Hill. México 1972. Segunda Edición.
- [3] DAHLQUIST, Germund, BJORCK, Ake. Numerical Methods. Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey 1974.
- [4] DEMIDOVICH, B.P., MARON, I.A. Cálculo Numérico Fundamental. Paraninfo, Madrid 1977.
- [5] DEMIDOVICH, B.P., MARON, I.A., SCHUWALOWA, E.S. Métodos Numéricos de Análisis. Paraninfo, Madrid 1980.
- [6] GERALD, Curtis F. Applied Numerical Analysis. Addison-Wesley, Publishing Company. 1978.
- [7] KOPCHENOVA, N.V., MARON, I.A. Computational Mathematics. Mir Publishers. Moscu 1975.
- [8] RALSTON, Anthony, RABINOWITZ, Philip. A First Course in Numerical Analysis. Mc Graw-Hill, Inc. Estados Unidos 1975.
- [9] SALZER, Herbert E. Optimal Points for Numerical Differentiation. Numerische Mathematik. Vol. 2, Pags. 214-227. 1960.
- [10] SOTO M., Ricardo. Cuadratura Numérica. Curso dictado en las Primeras Jornadas de Matemáticas, Agosto 1982. Departamento de Matemáticas. Universidad del Norte.
- [11] SZIDAROVSKY, Ferenc, YAKOWITZ, Sidney. Principles and Procedures of Numerical Analysis. Plenum Press, New York, 1978.