Diferenciación Numérica.

Cuando se va a practicar una operación en una función tabulada, el camino es aproximar la tabla por alguna función y efectuar la operación aproximadamente. Así se procedió en la integración numérica y así se procederá en la diferenciación numérica; esto es, se aproximara la función tabulada f(x) y se diferenciara la aproximación $p_n(x)$.

Si la aproximación es polinomial y con el criterio de ajuste exacto, la diferenciación numérica consiste simplemente en diferenciar la formula del polinomio interpolante que se utilizo. Sea en general.

$$f(x) = p_n(x) + R_n(x)$$

y la aproximación de la primera derivada queda entonces

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{dp_n(x)}{dx}$$

o en general

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} = \frac{d^n p_n(x)}{dx^n}$$

Diferenciación Numérica.

Al diferenciar la formula fundamental de Newton dada arriba se tiene

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} = \frac{d^n p_n(x)}{dx^n} + \frac{d^n R_n(x)}{dx^n}$$

donde $\frac{d^n R_n(x)}{dx^n}$ es el error que se comete al aproximar $\frac{d^n f(x)}{dx^n}$ por $\frac{d^n p_n(x)}{dx^n}$.

Si las abcisas dadas $x_0, x_1, \ldots, x_n$ están espaciadas regularmente por intervalos de longitud h, entonces $p_n(x)$ puede escribirse en términos de diferencias finitas.

Y la primera derivada de f(x) queda aproximada por

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h}$$

Diferenciación Numérica.

Se desarrollan las diferencias hacia delante y se tiene

$$\frac{df(x)}{dx}=\left(\frac{2x-x_0-x_1-2h}{2h^2}\right)f(x_0)+\left(\frac{2x_0-4x+2x_1+2h}{2h^2}\right)f(x_1)+\left(\frac{2x-x_0-x_1}{2h^2}\right)f(x_2)$$

la segunda derivada puede calcularse derivando una vez mas con respecto a x, o sea

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2}=\frac{1}{h^2}f(x_0)-\frac{2}{h^2}f(x_1)+\frac{1}{h^2}f(x_2)$$

Diferenciación Numérica.

Estas fórmulas son las siguientes:

Dos puntos: $f'(x_0) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} - \frac{h}{2}f''(\varepsilon)$

Tres puntos: $f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_0+h) - f(x_0+2h) + \frac{h^2}{3}f'''(\varepsilon)$

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

Cabe recalcar que si *h*>0 se dice que la formula es progresiva y si *h*<0 se dice que la misma es regresiva.

Además en cálculos prácticos se omite el término del error que aparece con el paso elevado a alguna potencia por alguna derivada de *f*.

Sin mayor formalismo introducimos la formula de la segunda derivada para puntos interiores al conjunto dado:

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

Diferenciación Numérica.

- **Ejemplo 1**: La ecuación de Van der Walls para un gmol de CO2 es

$$\left(P+\frac{a}{v^2}\right)(v-b)=RT$$

donde

$$a = 3.6x10^{-6}\, atm * cm^6 / gmol^2$$

$$b = 42.8 cm^3 / gmol$$

$$R = 82.1 atm * cm^3 / gmol * K$$

Si T = 350 K, se obtiene la siguiente tabla de valores.

Puntos	0	1	2	3
P (atm)	13.782	12.577	11.565	10.704
V (cm^3)	2000	2200	2400	2600

Calcule $\frac{\partial P}{\partial v}$ cuando v = 2300 cm^3 y compárelo con el valor de la derivada analítica

Diferenciación Numérica.

- **Ejemplo 2:** Sea f(x)=ln(x) aproxime la derivada en el intervalo [1, 1.1] usando un paso de 0.01 y compare cada resultado con el valor de la derivada exacta en ese punto. Tenemos antes que nada la siguiente tabla de valores:

j	x_j	$f(x_j)=ln(x_j)$
0	1	0
1	1.01	0.009950331
2	1.02	0.019802627
3	1.03	0.029558802
4	1.04	0.039220713
5	1.05	0.048790164
6	1.06	0.058268908
7	1.07	0.067658648
8	1.08	0.076961041
9	1.09	0.086177696
10	1.1	0.09531018

Diferenciación Numérica.

x_j	$ln(x_j)$	Exacta	Aprox	Error
1	0	1	0.99993485	6.515E-05
1.01	0.009950331	0.99009901	0.99013136	3.2355E-05
1.02	0.019802627	0.980392157	0.98042357	3.1413E-05
1.03	0.029558802	0.970873786	0.97090429	3.0506E-05
1.04	0.039220713	0.961538462	0.9615681	2.9635E-05
1.05	0.048790164	0.952380952	0.95240975	2.8796E-05
1.06	0.058268908	0.943396226	0.94342422	2.7989E-05
1.07	0.067658648	0.934579439	0.93460665	2.7211E-05
1.08	0.076961041	0.925925926	0.92595239	2.6462E-05
1.09	0.086177696	0.917431193	0.91745693	2.5741E-05
1.1	0.09531018	0.909090909	0.90903985	5.1059E-05

Diferenciación Numérica.

Ejemplo 2: Considere la tabla adjunta, en la misma se muestran la posición para determinado tiempo de una partícula moviéndose en el espacio, calcule de ser posible la aceleración de la misma. Si la partícula describe un movimiento parabólico dado por $f(t)=t^2$, calcule el error de la aceleración aproximada.

j	t_j	x_j
0	0	0
1	0.01	0.0001
2	0.02	0.0004
3	0.03	0.0009
4	0.04	0.0016
5	0.05	0.0025

Integración Numérica

- **Formulas simples cerradas de Newton Cotes**

Se denomina formula cerrada de Newton Cotes de n+1 puntos a la expresión usada para aproximar:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$$

Existen expresiones de la sumatoria para cuando el valor de n es par y cuando el mismo es impar sin embargo no entraremos en detalle de las mismas.

De forma genérica introducimos las formulas de Newton Cotes deducidas para n=1, 2, 3:

$$n = 1: \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] - \frac{h^3}{12} f''(\varepsilon), \varepsilon \in [x_0, x_1]$$

$$n = 2: \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^5}{90} f^{iv}(\varepsilon), \varepsilon \in [x_0, x_2]$$

$$n = 3: \int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{8}[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] - \frac{3h^5}{5} f^{iv}(\varepsilon), \varepsilon \in [x_0, x_3]$$

Integración Numérica

- La fórmula para n=1 tiene por nombre especifico Trapecio Simple, para n=2 se denomina Simpson Simple y para n=3 se denomina Simpson Simple 3/8.

- Cada integral divide al intervalo de integración en n+1 particiones, las cuales intervienen como se puede observar en la formula a usarse.

- El termino final de cada formula se considera termino del error y por lo general se omite en los cálculos llegando de esta forma a valores aproximados al eliminarlo.

Integración Numérica

- **Ejemplo:** Aplicación de las fórmulas de Trapecio y de Simpson y comparación entre ellas. Considere la integral dad, aproxime la misma mediante las formulas de Trapecio y de Simpson simples, además halle su valor exacto para con el mismo determinar el valor del error absoluto con cada

$$\int_0^1 e^x dx$$

Integración Numérica

Método del trapecio

La regla del trapecio o regla trapezoidal es la primera de las formulas de integración cerrada de Newton-Cotes. Corresponde al caso donde el polinomio en la ecuación [1] es de primer orden :

$$I = (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}$$