4 Derivación Numérica

Introducción

Aunque las reglas de derivación son suficientemente conocidas para derivar las funciones más usuales, no siempre pueden utilizarse, como por ejemplo en funciones descritas a través de una tabla de valores, o no es conveniente hacerlo, por ejemplo en funciones analíticas demasiado complejas. Para evitar estos problemas recurriremos al cálculo de la función derivada en un punto conociendo los valores de la función en diversos puntos.

La derivada de una función $f(x)$ en un punto x_0 se define como

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

esta fórmula proporciona una forma de obtener un valor aproximado de $f'(x_0)$, simplemente se calcula el cociente

$$\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$

para valores de h pequeños. Sin embargo esta forma no es muy eficaz debido a los errores de redondeo que acarrea.

Fórmulas de derivación mediante el polinomio de Taylor

En primer lugar supongamos que $f(x) \in \mathcal{C}^2[a,b]$ y que queremos calcular la derivada de $f(x)$ en un punto $x_0 \in [a,b]$. Para ello consideramos el desarrollo de Taylor hasta el orden 2 en ese punto

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

donde $\xi \in (a,b)$ es un punto intermedio. Podríamos extraer un valor aproximado de la derivada en x_0, despejando de la ecuación anterior

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

que en el límite cuando $h \to 0$ coincide con la definición de derivada en un punto.

Supongamos que existe un valor $M > 0$, que es una cota de $|f''(x)|$ en $[a,b]$, es decir

$$|f''(x)| \le M \qquad x \in [a,b]$$

entonces para valores de h pequeños obtendremos una cota de error

$$M\frac{|h|}{2}$$

Si $h > 0$ la fórmula se dice *progresiva* y *regresiva* en caso contrario.

h	$f\left(2+h\right)$	$\frac{f(2+h)-f(2)}{h}$	$\lvert e_a \rvert$	$\frac{\lvert h \rvert}{8}$
0.1	0.74193734	0.48790160	0.012098	0.012500
0.01	0.69813472	0.49875400	0.001246	0.001250
0.001	0.69364706	0.49988000	0.000120	0.000125

1.Derivación numérica

Ejemplo 1 *Calcula la derivada de $f\left(x\right)=\ln\left(x\right)$ en $x_0=2$ utilizando la fórmula progresiva a dos puntos y compara el error cometido con la cota de error correspondiente.*

Solución: La fórmula de dos puntos para $f'\left(2\right)$ es
$$f'\left(2\right)=\frac{f\left(2+h\right)-f\left(2\right)}{h}$$
mientras que teniendo en cuenta que $f''\left(x\right)=-\frac{1}{x^2}$, el error viene dado por
$$\frac{\left|hf''\left(\xi\right)\right|}{2}=\frac{|h|}{2\xi^2}\qquad 2<\xi<2+h$$
y como $\frac{1}{x^2}$ es decreciente para $x>0$
$$\frac{\left|hf''\left(\xi\right)\right|}{2}\leq\frac{|h|}{2\left(2\right)^2}=\frac{|h|}{8}$$
Calcularemos el valor aproximado de $f'\left(2\right)$ para distintos valores de h y lo compararemos con el valor exacto que es
$$f'\left(x\right)=\frac{1}{x}\Rightarrow f'\left(2\right)=\frac{1}{2}=0.5$$
Los resultados se muestran en la tabla 1 y como se puede comprobar los errores estimados están muy cerca del verdadero error de las aproximaciones.

Para obtener fórmulas generales de derivación numérica, podemos proceder como en el caso anterior utilizando el desarrollo de Taylor. Por ejemplo, supongamos que $f\left(x\right)\in\mathcal{C}^3[a,b]$. Utilizamos el desarrollo de Taylor hasta el orden 3 para los puntos x_0+h y x_0-h
$$f(x_0+h)=f(x_0)+f'(x_0)h+f''(x_0)h^2+\frac{f'''(\xi_1)}{3!}h^3$$
$$f(x_0-h)=f(x_0)-f'(x_0)h+f''(x_0)h^2-\frac{f'''(\xi_2)}{3!}h^3$$
Restando ambas expresiones
$$f(x_0+h)-f(x_0-h)=2f'(x_0)h+\left(f'''(\xi_1)+f'''(\xi_2)\right)\frac{h^3}{3!}$$
y despejando $f'(x_0)$
$$f'(x_0)=\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}-\left(f'''(\xi_1)+f'''(\xi_2)\right)\frac{h^2}{3!}$$
Más precisa que la anterior, pero que sólamente puede usarse si $f'''(x)$ existe.

Si $f'''\left(x\right)\in\mathcal{C}^3[x_0-h,x_0+h]\Rightarrow$ (Utilizando el teorema de los valores intermedios) $\Rightarrow\exists\xi\in[x_0-h,x_0+h]$ tal que:
$$f'''(\xi)=\frac{f'''(\xi_1)+f'''(\xi_2)}{2}$$

y la expresión anterior queda

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} - \frac{h^2}{3} f'''(\xi)$$

Fórmula para las segundas derivadas

Utilizando el mecanismo anterior y si utilizamos un término más en el desarrollo de Taylor

$$f(x_0+h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_1)}{4!}h^4$$

$$f(x_0-h) = f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2!}h^2 - \frac{f'''(x_0)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_2)}{4!}h^4$$

y a continuación sumamos ambas expresiones para eliminar el término $f'(x_0)$

$$f(x_0+h) + f(x_0-h) = 2f(x_0) + f''(x_0)h^2 + \left(f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2)\right)\frac{h^4}{4!}$$

y por último se despeja $f''(x_0)$ para obtener

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0+h) - 2f(x_0) + f(x_0-h)}{h^2} - \left(f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2)\right)\frac{h^2}{4!}$$

Si ahora $f^{(4)}(x) \in \mathcal{C}^3[x_0-h, x_0+h] \Rightarrow$ (Utilizando el teorema de los valores intermedios) $\Rightarrow \exists\xi \in [x_0-h, x_0+h]$ tal que:

$$f^{(4)}(\xi) = \frac{f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2)}{2}$$

y la expresión anterior queda

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

Fórmulas de derivación de tipo interpolatorio

Otra forma de proceder es aproximar la función $f(x)$ (función explícita o tabla de funciones) mediante un polinomio de interpolación que posteriormente se deriva para obtener una aproximación a la derivada de la función. Dependiendo del número de puntos utilizados, y por tanto del grado del polinomio de interpolación obtendremos una regla de derivación diferente.

Por ejemplo si utilizamos el polinomio de interpolación lineal (orden 1) para dos puntos x_0, $x_1 = x_0 + h$ junto con el término de error obtenemos

$$f(x) = P_1(x) + \frac{f''(\xi_x)}{2!}(x-x_0)(x-x_1)$$

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x-x_0) + \frac{f''(\xi_x)}{2!}(x-x_0)(x-x_1)$$

Y derivando respecto a x, teniendo en cuenta que ξ_x depende del punto x elegido.

$$f'(x) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{f''(\xi_x)}{2!}(x-x_0)(x-x_1)\right)$$

$$f'(x) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{f''(\xi_x)}{2!}\right)(x - x_0)(x - x_1) + \frac{f''(\xi_x)}{2!}(2x - x_0 - x_1)$$

En general no conoceremos el valor de $\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{f''(\xi_x)}{2!}\right)$ y por eso no podemos tener una expresión real del error, pero si utilizamos $x = x_0$ obtendremos

$$f'(x_0) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} + \frac{f''(\xi_x)}{2!}(x_0 - x_1)$$
$$f'(x_0) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} - \frac{f''(\xi_x)}{2!}h$$

que es la misma expresión que hemos encontrado antes para $f'(x_0)$.

El desarrollo general es el siguiente. A partir de la función $f(x)$ (tabla de valores o explícita), se construye el polinomio de interpolación que pasa por $(n+1)$ puntos conocidos: $\{(x_k, f(x_k)\}_{k=0}^{n}$

$$f(x) \cong \sum_{k=0}^{n} f(x_k)L_k(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}(x - x_0)\cdots(x - x_n)$$

siendo

$$\xi_x \in [\min\{x_k\}, \max\{x_k\}]$$

si ahora derivamos la expresión del polinomio interpolador obtenemos

$$f'(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)L'_k(x) + \frac{d}{dx}\left(\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}(x - x_0)\cdots(x - x_n)\right)$$

Derivando el término de error obtenemos

$$f'(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)L'_k(x) + \frac{\prod_{k=0}^{n}(x - x_k)}{(n+1)!}\frac{d}{dx}\left(f^{(n+1)}(\xi_x)\right) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\frac{d}{dx}\left(\prod_{k=0}^{n}(x - x_k)\right)$$

Como en el caso lineal, tenemos un problema con $\frac{d}{dx}\left(f^{(n+1)}(\xi_x)\right)$, puesto que en general ξ_x es desconocido, sin embargo, si queremos calcular la derivada en alguno de los nodos x_j ese término se anula y la fórmula se puede simplificar

$$f'(x_j) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)L'_k(x_j) + \frac{f^{(n+1)}\left(\xi_{x_j}\right)}{(n+1)!}\prod_{k=0,k\neq j}^{n}(x_j - x_k)$$

Fórmulas de 3 puntos

En este tipo de expresiones se utilizan 3 puntos, y por tanto el polinomio de interpolación es de grado ≤ 2. Por regla general estos puntos son equidistantes. En este caso

$$\begin{aligned}
L_0(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \Rightarrow L_0'(x) = \frac{2x-(x_1+x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \\
L_1(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \Rightarrow L_0'(x) = \frac{2x-(x_0+x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \\
L_2(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \Rightarrow L_0'(x) = \frac{2x-(x_0+x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}
\end{aligned}$$

Si queremos obtener una aproximación de la derivada en alguno de los extremos del intervalo es más útil utilizar los siguientes

$$\begin{aligned}
x_0 &\equiv x_0 \\
x_1 &\equiv x_0+h \\
x_2 &\equiv x_0+2h
\end{aligned}$$

y en este caso

$$\begin{aligned}
L_0'(x_0) &= \frac{2x_0-(x_1+x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} = -\frac{3}{2h} \\
L_0'(x_0) &= \frac{2x_0-(x_0+x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} = \frac{2}{h} \\
L_0'(x_0) &= \frac{2x_0-(x_0+x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} = -\frac{1}{2h}
\end{aligned}$$

y $f'(x_0)$ se puede calcular como

$$\begin{aligned}
f'(x_0) &= \sum_{k=0}^{2} f(x_k)L_k'(x_j) + \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}(x_0-x_1)(x_0-x_2) \\
&= -\frac{3f(x_0)}{2h} + \frac{2f(x_0+h)}{h} - \frac{f(x_0+2h)}{2h} + \frac{f^{(3)}(\xi)}{3}h^2
\end{aligned}$$

o de forma más compacta

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\left(-3f(x_0) + 4f(x_0+h) - f(x_0+2h)\right) + h^2\frac{f^{(3)}(\xi)}{3} \tag{1}$$

Se toma $h > 0$ o $h < 0$, dependiendo de si el punto extremo es el izquierdo o el derecho, respectivamente.

Para puntos interiores es mejor utilizar la fórmula para los puntos

$$\begin{aligned}
x_0 &\equiv x_1-h \\
x_1 &\equiv x_1 \\
x_2 &\equiv x_1+h
\end{aligned}$$

y en este caso

$$L_0'(x_1) = \frac{2x_1 - (x_1 + x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{2x_1 - (x_1 + x_1 + h)}{(x_1 - h - x_1)(x_1 - h - x_1 - h)} = -\frac{1}{2h}$$

$$L_0'(x_1) = \frac{2x_1 - (x_0 + x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = \frac{2x_1 - (x_1 - h + x_1 + h)}{(x_1 - x_1 + h)(x_1 - x_1 - h)} = 0$$

$$L_0'(x_1) = \frac{2x_1 - (x_0 + x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{2x_1 - (x_1 - h + x_1)}{(x_1 + h - x_1 - h)(x_1 + h - x_1)} = \frac{1}{2h}$$

y $f'(x_1)$ será

$$\begin{aligned} f'(x_1) &= \sum_{k=0}^{2} f(x_k) L_k'(x_1) + \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \\ &= -f(x_0)\frac{1}{2h} + f(x_1)\cdot 0 + f(x_2)\frac{1}{2h} - \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}h^2 \end{aligned}$$

o en forma compacta

$$f'(x_1) = \frac{1}{2h}(f(x_2) - f(x_0)) - \frac{f^{(3)}(\xi)}{6}h^2$$

Por último si los puntos son $x_0 - h$, x_0 y $x_0 + h$ entonces

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}(f(x_0 + h) - f(x_0 - h)) - \frac{f^{(3)}(\xi)}{6}h^2$$

Fórmulas de cinco puntos

Del mismo modo existen fórmulas para 5 puntos utilizando un polinomio de interpolación de grado ≤ 4, introducimos aquí las expresiones tanto para puntos en los extremos del intervalo, como para puntos intermedios. La deducción se realiza de forma análoga a la realizada para las fórmulas de 3 puntos.

- **Fórmula de 5 puntos para el punto medio**: Si existe $f^{(5)}(x)$ en un intervalo donde están $x_0 - 2h$ y $x_0 + 2h$ entonces
$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{12h} + \frac{h^4 f^{(5)}(\xi)}{30}$$
siendo ξ un punto entre $x_0 - 2h$ y $x_0 + 2h$.
- **Fórmula de 5 puntos para un extremo**: Si existe $f^{(5)}(x)$ en un intervalo donde están x_0 y $x_0 + 4h$ entonces
$$f'(x_0) = \frac{-25f(x_0) + 48f(x_0 + h) - 36f(x_0 + 2h) + 16f(x_0 + 3h) - 3f(x_0 + 4h)}{12h} + \frac{h^4 f^{(5)}(\xi)}{5}$$
siendo ξ un punto entre x_0 y $x_0 + 4h$. En este caso se toma $h > 0$ si la aproximación se hace en el extremo izquierdo y $h < 0$ si se hace en el derecho.