# Derivación Numérica

La derivada es de uso común en la matemática y la ingeniería, sin embargo, en la práctica, de muchas funciones con las que se trabaja, no se conoce su expresión analítica y solamente se dispone de valores en un conjunto de puntos.
En algunos casos es necesario proceder a calcular el valor de alguna derivada de algunas funciones en un punto concreto. En este tipo de situaciones no se puede utilizar el concepto riguroso de derivada por desconocimiento de la expresión de la función. De esta manera surge la necesidad de diseñar métodos numéricos que permitan aproximar el valor de las derivadas de una función en algún punto a partir del conocimiento de los valores de la función en un soporte dado.
Los métodos de derivación numérica desarrollados con el fin de aproximar algún valor buscado, muestran un buen comportamiento en numerosos casos. Es por ello que algunas veces, aun disponiendo de la expresión analítica de las funciones a derivar, se opta por aproximar los valores de las derivadas mediante fórmulas numéricas suficientemente precisas.
La diferenciación numérica es muy útil en casos en los cuales se tiene una función cuya derivada es difícil o complicada de hallar, o en casos en los cuales no se tiene una función explícita sino una serie de datos experimentales.

El problema de la derivación numérica consiste en la evaluación de la derivada de la función en un punto, cuando únicamente conocemos los valores de la función en una colección de puntos x0, x1,... xn.
Aunque, en apariencia se trata de un problema similar al de la Integración numérica; de hecho, la derivación es más complicada ya que, en la integración los errores tienden a cancelarse, y, como vimos, no necesitamos que la aproximación describa con fidelidad la función localmente.
Sin embargo, la derivada es una propiedad esencialmente local, por lo cual deberemos aproximar la función lo más fielmente posible en el entorno inmediato del punto en el que la queramos calcular.

Las fórmulas de derivación numérica aparecen en el desarrollo de algoritmos para la solución de problemas de contorno en ecuaciones diferenciales ordinarias (y en ecuaciones en derivadas parciales). En general, podemos obtener aproximaciones numéricas de la derivada en un punto derivando alguna función interpolante, por ejemplo, un polinomio de Lagrange, algún trazador cúbico, etc. Sin embargo, en la práctica pequeños errores en los datos pueden producir malos resultados en las derivadas. Aquí vamos a experimentar con fórmulas que se obtienen derivando el polinomio interpolante de Lagrange.

**Método de Diferencias Finitas**

El método de diferencias finitas consiste en aproximar la función por polinomios. Las fórmulas resultantes pueden clasificarse de las siguientes maneras:

a) En base al orden de la derivada, obteniéndose $f'(x0)$, $f''(x0)$, $f'''(x0)$, … , $fn(x0)$
b) En base al orden de la diferencia, pueden ser primera, segunda, tercera, etc.
c) En base a los puntos de apoyo de la formula en la tabla, es decir, si se emplean puntos antes, después o ambos lados de algún punto de interés.

**Existen tres tipos y son:**

1) Diferencias hacia adelante, cuando se usan puntos anteriores del punto de interés.

2) Diferencias hacia atrás, cuando se emplean puntos posteriores al punto de interés.
3) Diferencias centrales. Cuando se usan puntos tanto antes como después del punto de interés.

**Referencias para las fórmulas de diferencias finitas:**
$x0$: Indica el punto de interés, de estudio o de análisis.
$h$: Espaciamiento constante de la tabla.
$f(x0)$: Función evaluada en el punto de análisis.
$f(x0+1) = f(x0 + h)$ y $f(x0-1) = f(x0 - h)$
$f(x0+n) = f(x0 + nh)$ y $f(x0-n) = f(x0 - nh)$

**Fórmulas de diferencias finitas hacia adelante**

**Primera diferencia**

$$f'(x_0) = \frac{f(x_{0+1}) - f(x_0)}{h}$$

$$f''(x_0) = \frac{f(x_{0+2}) - 2f(x_{0+1}) + f(x_0)}{h^2}$$

$$f'''(x_0) = \frac{f(x_{0+3}) - 3f(x_{0+2}) + 3f(x_{0+1}) - f(x_0)}{h^3}$$

$$f^{iv}(x_0) = \frac{f(x_{0+4}) - 4f(x_{0+3}) + 6f(x_{0+2}) - 4f(x_{0+1}) + f(x_0)}{h^4}$$

**Segunda diferencia**

$$f'(x_0) = \frac{-f(x_{0+2}) + 8f(x_{0+1}) - 8f(x_{0-1}) + f(x_{0-2})}{12h}$$

$$f''(x_0) = \frac{-f(x_{0+2}) + 16f(x_{0+1}) - 30f(x_0) + 16f(x_{0-1}) - f(x_{0-2})}{12h^2}$$

$$f'''(x_0) = \frac{-f(x_{0+3}) + 8f(x_{0+2}) - 12f(x_{0+1}) + 12f(x_{0-1}) - 8f(x_{0-2}) + f(x_{0-3})}{8h^3}$$

$$f^4(x_0) = \frac{-f(x_{0+3}) + 12f(x_{0+2}) - 39f(x_{0+1}) + 56f(x_0) - 39f(x_{0-1}) + 12f(x_{0-2}) - f(x_{0-3})}{6h^4}$$

## Fórmulas de diferencias finitas hacia atrás

### Primera diferencia

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_{0-1})}{h}$$

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0) - 2f(x_{0-1}) + f(x_{0-2})}{h^2}$$

$$f'''(x_0) = \frac{f(x_0) - 3f(x_{0-1}) + 3f(x_{0-2}) - f(x_{0-3})}{h^3}$$

$$f^{iv}(x_0) = \frac{f(x_0) - 4f(x_{0-1}) + 6f(x_{0-2}) - 4f(x_{0-3}) + f(x_{0-4})}{h^4}$$

### Segunda diferencia

$$f'(x_0) = \frac{3f(x_0) - 4f(x_{0-1}) + f(x_{0-2})}{2h}$$

$$f''(x_0) = \frac{2f(x_0) - 5f(x_{0-1}) + 4f(x_{0-2}) - f(x_{0-3})}{h^2}$$

$$f'''(x_0) = \frac{5f(x_0) - 18f(x_{0-1}) + 24f(x_{0-2}) - 14f(x_{0-3}) + 3f(x_{0-4})}{2h^3}$$

$$f^{iv}(x_0) = \frac{3f(x_0) - 14f(x_{0-1}) + 26f(x_{0-2}) - 24f(x_{0-3}) + 11f(x_{0-4}) - 2f(x_{0-5})}{h^4}$$

**Fórmulas de diferencias finitas centrales**

**Primera diferencia**

$$f'(x_0) = \frac{f(x_{0+1}) - f(x_{0-1})}{2h}$$

$$f''(x_0) = \frac{f(x_{0+1}) - 2f(x_0) + f(x_{0-1})}{h^2}$$

$$f'''(x_0) = \frac{f(x_{0+2}) - 2f(x_{0+1}) + 2f(x_{0-1}) - f(x_{0-2})}{2h^3}$$

$$f^{iv}(x_0) = \frac{f(x_{0+2}) - 4f(x_{0+1}) + 6f(x_0) - 4f(x_{0-1}) + f(x_{0-2})}{h^4}$$

**Segunda diferencia**

$$f'(x_0) = \frac{-f(x_{0+2}) + 8f(x_{0+1}) - 8f(x_{0-1}) + f(x_{0-2})}{12h}$$

$$f''(x_0) = \frac{-f(x_{0+2}) + 16f(x_{0+1}) - 30f(x_0) + 16f(x_{0-1}) - f(x_{0-2})}{12h^2}$$

$$f'''(x_0) = \frac{-f(x_{0+3}) + 8f(x_{0+2}) - 12f(x_{0+1}) + 12f(x_{0-1}) - 8f(x_{0-2}) + f(x_{0-3})}{8h^3}$$

$$f^4(x_0) = \frac{-f(x_{0+3}) + 12f(x_{0+2}) - 39f(x_{0+1}) + 56f(x_0) - 39f(x_{0-1}) + 12f(x_{0-2}) - f(x_{0-3})}{6h^4}$$

**Ejemplos resueltos**

**Problema 1**

Sea la función ln $x$, calcular las derivadas por métodos numéricos en el punto $x = 5$, en base a la siguiente tabla, con $h = 0.1$, aplicando la fórmula de la primera diferencia finita hacia adelante.

| x | 4,7 | 4,8 | 4,9 | 5 | 5,1 | 5,2 | 5,3 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| y | 1,54756251 | 1,56861592 | 1,58923521 | 1,60943791 | 1,62924054 | 1,64865863 | 1,66770682 |

Recordamos

$x0$: Indica el punto de interés, de estudio o de análisis.
$h$: Espaciamiento constante de la tabla.
$f(x_0)$: Función evaluada en el punto de análisis.
$f(x_{0+1}) = f(x_0 + h)$ y $f(x_0{-}1) = f(x_0 - h)$
$f(x_{0+n}) = f(x_0 + nh)$ y $f(x_0{-}n) = f(x_0 - nh)$

**Valor Real**

$$f(x) = \ln(x) \qquad \to f'(x) = \frac{1}{x} \quad \to f'(5) = 0.2$$

$$f''(x) = -\frac{1}{x^2} \quad \to f'(5) = -0.04$$

## Diferencias finitas hacia adelante

**Formula Primer derivada**

$$f'(x_0) = \frac{f(x_{0+1}) - f(x_0)}{h}$$

**Datos Derivada Primera**

$$x_0 = 5 \quad f(x_0) = 1{,}60943791 \qquad h = 0.1$$

$$x_{0+1} = x_0 + h = 5 + 0.1 = 5.1 \qquad f(5.1) = 1{,}62924054$$

**Resolución**

$$f'(x_0) = \frac{f(5.1) - f(5)}{0.1} = 0{,}198$$

**Error**

$$E_r = \left|\frac{v_v - v_a}{v_v}\right| = \left|\frac{0.2 - 0.198}{0.2}\right| = 0.010 \qquad E_{\%} = \;|E_r * 100\%| = 1\%$$

**Formula Segunda derivada**

$$f''(x_0) = \frac{f(x_{0+2}) - 2f(x_{0+1}) + f(x_0)}{h^2}$$

**Datos Derivada Segunda**

$x_{0+2} = x_0 + nh = 5 + 2 * 0.1 = 5.2 \quad f(5.2) = 1{,}64865863$

**Resolución**

$$f''(x_0) = \frac{f(5.2) - 2f(5.1) + f(5)}{0.1^2} = -0{,}038$$

**Error**

$$E_r = \left|\frac{v_v - v_a}{v_v}\right| = \left|\frac{-0.04 - (-0.038)}{-0.04}\right| = 0.05 \qquad E_{\%} = \ |E_r * 100\%| = 5\%$$

## Diferencias finitas hacia atrás

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_{0-1})}{h}$$

**Datos Derivada Primera**

$x_0 = 5 \quad f(x_0) = 1{,}60943791 \quad h = 0.1$

$x_{0-1} = x_0 - h = 5 - 0.1 = 4.9 \quad f(4.9) = 1{,}58923521$

**Resolución**

$$f'(x_0) = \frac{f(5) - f(4.9)}{0.1} = 0{,}2020$$

**Error**

$$E_r = \left|\frac{v_v - v_a}{v_v}\right| = \left|\frac{0.2 - 0.2020}{0.2}\right| = 0.010 \qquad E_{\%} = \ |E_r * 100\%| = 1\%$$

**Datos**

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0) - 2f(x_{0-1}) + f(x_{0-2})}{h^2}$$

$x_{0-2} = x_0 - nh = 5 - 2 * 0.1 = 4.8 \quad f(4.8) = 1{,}56861592$

**Resolución**

$$f''(x_0) = \frac{f(5) - 2f(4.9) + f(4.8)}{0.1^2} = -0{,}0417$$

**Error**

$$E_r = \left|\frac{v_v - v_a}{v_v}\right| = \left|\frac{-0.04 - (-0.038)}{-0.04}\right| = 0.04 \qquad E_{\%} = |E_r * 100\%| = 4\%$$

## Diferencias finitas centrales

$$f'(x_0) = \frac{f(x_{0+1}) - f(x_{0-1})}{2h}$$

**Datos Derivada Primera**

$x_0 = 5 \quad f(x_0) = 1{,}60943791 \qquad h = 0.1$

$x_{0+1} = x_0 + h = 5 + 0.1 = 5.1 \qquad f(5.1) = 1{,}62924054$

$x_{0-1} = x_0 - h = 5 - 0.1 = 4.9 \qquad f(4.9) = 1{,}58923521$

**Resolución**

$$f'(x_0) = \frac{f(5.1) - f(4.9)}{2 * 0.1} = 0{,}20003$$

**Error**

$$E_r = \left|\frac{v_v - v_a}{v_v}\right| = \left|\frac{0.2 - 0.20003}{0.2}\right| = 0{,}0001 \qquad E_{\%} = |E_r * 100\%| = 0{,}01\%$$

$$f''(x_0) = \frac{f(x_{0+1}) - 2f(x_0) + f(x_{0-1})}{h^2}$$

**Resolución**

$$f'(x_0) = \frac{f(5.1) - 2 * f(5) + f(4.9)}{2 * 0.1} = -0{,}04001$$

**Error**

$$E_r = \left|\frac{v_v - v_a}{v_v}\right| = \left|\frac{-0.04 - (-0.0400)}{-0.04}\right| = 0.0001 \qquad E_{\%} = |E_r * 100\%| = 0.01\%$$

# Problemas a resolver

## Problema 1

Para estudiar un determinado fenómeno físico, se registran los cambios producidos en él en la siguiente tabla. Aproxima el valor de la derivada a $f'(1.3)$ utilizando la fórmula de derivación numérica por diferencia centrada. Calcular el error.

| x | 1 | 1.1 | 1.2 | 1.3 | 1.4 | 1.5 | 1.6 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $f(x)$ | 2.5 | 2.436851 | 2.372895 | 2.308785 | 2.245066 | 2.182179 | 2.120472 |

## Problema 2

Aproximar el valor de la función $f'(5.7)$ si $f(x) = 2x\, cos\, x$, utilizando la fórmula diferencias finitas hacia adelante y hacia atrás.

## Problema 3

Con la siguiente tabla de datos

| i | 0 | 1 | 2 |
|---|---|---|---|
| x | 0.349 | 0.436 | 0.523 |
| y | 0.34202 | 0.42262 | 0.5 |

a) Estime la primera derivada de la función F(x) en x= 0.436 utilizando las diferencias hacia adelante, hacia atrás y centrales.
b) Estime la segunda derivada en x=0.436

## Problema 4

Aproxime la f ’(120) y f ‘’(180) para la función f(x) dada la tabla con las Segunda diferencia centrales

| i | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| x | 0 | 60 | 120 | 180 | 240 | 300 |
| y | 0 | 0.0824 | 0.2747 | 0.6502 | 1.3851 | 3.2229 |

# Integración Numérica

Cuando se necesita calcular $I = \int_a^b f(x)dx$ pueden ocurrir dos situaciones que dificultad en el cálculo:

a) No se conoce la expresión analítica de f(x) sino que se dispone de una tabla de valores provenientes, por ejemplo, de resultados experimentales.
b) Se conoce la expresión de f(x) pero no una primitiva, lo que impide aplicar la fórmula de Barrow, por ejemplo $f(x) = \frac{sen\, x}{x}$
c) Se conoce la expresión de f(x) y se sabe que existe primitiva pero su cálculo es muy largo y complicado.

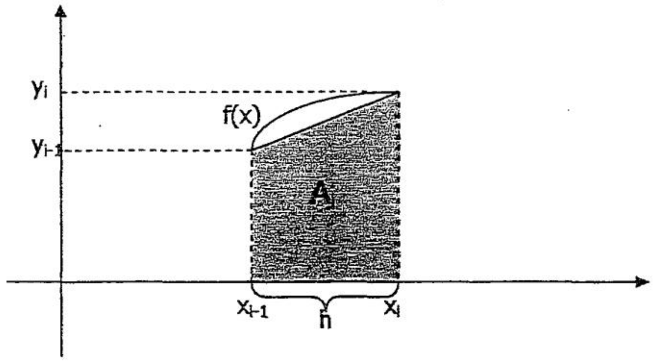
En estos casos, debemos recurrir a métodos de integración numérica.

Desarrollaremos las fórmulas de Newton-Cotes a desarrollar son las tres primeras, constituidas por las reglas del trapecio y de Simpson (regla de un tercio y de tres octavos).

## Método de los trapecios

Para calcular $I = \int_a^b f(x)dx$ se divide el intervalo [a,b] en n su intervalos iguales mediante los puntos : $a = x_o < x_1 \dots < x_n = b$. O sea que el intervalo i-ésimo está comprendido entre $x_{i-1}$ y $x_i$.

En cada uno de los subintervalos se aproxima la función por un segmento de la recta:




$$A = \sum_{i=1}^{n} A_i = \frac{1}{2} * h * \left( y_0 + y_n + 2 * \sum_{i=1}^{n-1} y_i \right)$$

Ejemplo:

Sea la función $f(x) = -x^2 + 6x - 4$. Se desea calcular $I = \int_1^4 f(x)dx$. Considerando h=1 y h =0.5.

Armamos la tabla de valores para h = 1

| i | 0 | 1 | 2 | 3 |
|---|---|---|---|---|
| x | 1 | 2 | 3 | 4 |
| y | 1 | 4 | 5 | 4 |

$$A = \frac{1}{2} * h * \left( y_0 + y_n + 2 * \sum_{i=1}^{n-1} y_i \right)$$

$$A = \frac{1}{2} * 1 * (1 + 4 + 2 * (4 + 5))$$

$$A = \frac{1}{2} * 1 * (1 + 4 + 2 * (4 + 5))$$

$$A = 11.5$$

Armamos la tabla de valores para h = 0.5

| i | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| x | 1 | 1,5 | 2 | 2,5 | 3 | 3,5 | 4 |
| y | 1 | 2,75 | 4 | 4,75 | 5 | 4,75 | 4 |

$$A = \frac{1}{2} * h * \left( y_0 + y_n + 2 * \sum_{i=1}^{n-1} y_i \right)$$

$$A = \frac{1}{2} * 0.5 * (1 + 4 + 2 * (2.75 + 4 + 4.75 + 5 + 4.75))$$

$$A = 11.875$$

Si resolvemos la integral obtenemos lo siguiente:

$$A = \int_1^4 -x^2 + 6x - 4dx = \left[ -\frac{x^3}{3} + 3x^2 - 4x \right]_1^4 = 12$$

Estimación del error:

$$E = \frac{(a-b)}{12} . h^2 . f''(\varphi) \qquad con\ \varphi \in [a,b]$$

Siguiendo el ejemplo:

$$f(x) = -x^2 + 6x - 4 \quad \rightarrow \quad f''(x) = -2$$

Para h = 1 $E = \frac{(1-4)}{12}.1^2.-2 = 0.5$

Para h = 0.5 $E = \frac{(1-4)}{12}.0.5^2.-2 = 0.25$

**REGLA DE SIMPSON DE 1/3**

Este método subdivide al intervalo [a,b] en n subintervalos y cada dos de ellos aproxima por una parábola. Para poder aplicar Simpson n debe ser par.

**Formula del Método de Simpson**

$$\boldsymbol{A = \frac{h}{3}.(E + 4I + 2P)}$$

Donde

$E = y_0 + y_n$ suma de extremos

$I = y_1 + y_3 + y_5 + \cdots + y_{n-1}$ Suma de impares

$P = y_2 + y_4 + y_6 + \cdots + y_{n-2}$ Suma de pares

Estimación del Error en Simpson (cuando se conoce f(x))

$$E = \frac{(a-b)}{180} h^4 f^4(\varphi) \quad con\ \varphi \in [a,b]$$

Ejemplo

Sea la integral $\int_0^1 sen(x)$

a) Halle el valor exacto de la integral y hállelo mediante la regla de Simpson con h= 0.25
b) Halle el error absoluto y relativo y explique porque el valor hallado por Simpson es extremadamente similar al exacto.

Construimos la tabla de valores para h= 0.25 y= sen(x)

| i | x | y |
|---|---|---|
| 0 | 0 | 0 |
| 1 | 0,25 | 0,247403959 |
| 2 | 0,5 | 0,479425539 |
| 3 | 0,75 | 0,68163876 |
| 4 | 1 | 0,841470985 |

$E = y_0 + y_n \quad \rightarrow \quad E = 0 + 0.841470985 = 0.841470985$

$I = y_1 + y_3 + y_5 + \cdots + y_{n-1} \rightarrow I = 0{,}247403959 + 0{,}68163876 = 0{,}929042719$

$P = y_2 + y_4 + y_6 + \cdots + y_{n-2} \rightarrow P = \mathbf{0,479425539}$

$$\boldsymbol{A} = \frac{\boldsymbol{h}}{\mathbf{3}}.(\boldsymbol{E} + \mathbf{4}\boldsymbol{I} + \mathbf{2}\boldsymbol{P})$$

$$\boldsymbol{A} = \frac{\mathbf{0.25}}{\mathbf{3}}.(0.841470985 + \mathbf{4}.0{,}929042719 + \mathbf{2}.\mathbf{0,479425539})$$

$$\boldsymbol{A} = 0{,}459707745$$

Calculamos el error

La solución exacta es

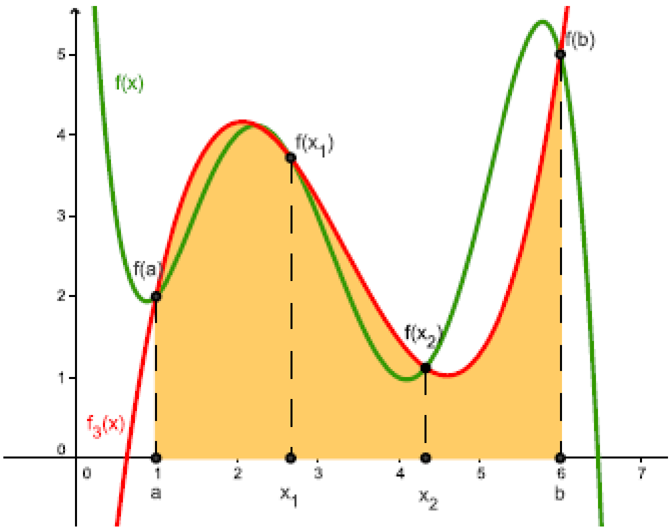
$$I = \int_0^1 sen(x) = 0.459697694$$

$$Error\ Absoluto \quad Ea = I - A = 0.459697694 - 0{,}459707745 = 0.00001005$$

$$Error\ Relativo \quad Er = \frac{I - A}{I} * 100 = \frac{0.00001005}{0.459697694} * 100 = 0.00218\%$$

**REGLA DE SIMPSON DE 3/8**

De la misma forma en que se derivó la Regla del Trapecio y la Regla de Simpson 1/3 se puede obtener la fórmula de la Regla de Simpson 3/8, aproximando la función con un polinomio de interpolación de Lagrange de grado 3.



**Formula de Simpson de 3/8**

$$A = \frac{3}{8}h.\left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)\right] \quad con \;\; h = \frac{b-a}{3}$$

**Error**

$$E_3 = -\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\xi), \quad \text{con } a < \xi < b$$

**Ejemplo**

Aproximar la integral $\int_0^3 xe^{2x}\,dx$

$$h = \frac{3-0}{3} = 1$$

Armamos la tabla de valores

| i | x | y |
|---|---|---|
| 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 7,389056099 |
| 2 | 2 | 109,1963001 |
| 3 | 3 | 1210,28638 |

$$A = \frac{3}{8}h.\left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)\right]$$

$$A = \frac{3}{8} * 1 * [0 + 3 * 7{,}389056099 + 3 * 109{,}1963001 + 1210{,}28638]$$

$$\boldsymbol{A = 585{,}015918}$$

## Problemas a resolver

**Problema 1**

Obtener $\int_1^2 \frac{x^3}{1+x^{1/2}}\,dx$

a) Utilizando el método del trapecio con h=0.5.
b) Utilizando el método de Simpson 1/3
c) Utilizando el método de Simpson 3/8

**Problema 2**

Dada la función $f(x) = 1 + x^3$ en [0,2] calcule la integral:

a) En forma analítica
b) Aproximación mediante trapecios con h=1, h=0.5, h=0.2.

c) Aproximación mediante Simpson con h= 1.
d) Calcule los errores y extraiga conclusiones.

**Problema 3**

Estime $\int_{1}^{1.4} f(x)\, dx$ de la función f dada por la tabla

| i | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|---|---|
| x | 1 | 1.1 | 1.2 | 1.3 | 1.4 |
| y | 0.010 | 0.252 | 0.586 | 1.024 | 1.578 |

a) Por el método de Trapecios
b) Por el método de Simpson

**Problema 4**

Halle h para que al calcular $\int_{0}^{5} (x+1)^5\, dx$ por Simpson el error sea $\varepsilon < 10^{-2}$