

Derivación numérica

Ing. Jesús Javier Cortés Rosas
M. en A. Miguel Eduardo González Cárdenas
M. en A. Víctor D. Pinilla Morán *

2011

Resumen

Introducción. Derivación numérica. Análisis del error. Ejemplo de aplicación. Conclusiones.

1. Introducción

Las técnicas de interpolación numérica proporcionan las herramientas para obtener las funciones analíticas de funciones tabulares que comúnmente son la materia prima de los procesos propios de las prácticas de la Ingeniería.

Sin embargo, cuando se dispone de una función tabular compuesta de un número tal de puntos que hace poco práctica la obtención de la expresión analítica, no resulta sencillo obtener las derivadas (o las integrales) de dicha función. Las siguientes herramientas de derivación numérica permiten obtener la derivada de la función en cualesquiera de los puntos seleccionados, sin necesidad de recurrir a la expresión analítica.

Por tratarse de una herramienta del análisis numérico, los resultados obtenidos serán los valores numéricos de la derivada de una función en un punto. Si se desea obtener como resultado una expresión analítica, corresponde obtener inicialmente dicha función, ya sea por algún polinomio interpolante o por la interpolación de Lagrange y después derivarla.

2. Derivación numérica

Sea $Y = f(X)$ una función tabular continua con n puntos que puede aproximarse a un polinomio de grado $n-1$ que pasa por todos los puntos incluidos en su forma tabular y cuya variable independiente es equiespaciada con paso $h = cte$, el polinomio interpolante que la representa es:

$$Y_k = Y_0 + k\Delta Y_0 + \frac{k(k-1)}{2!}\Delta^2 Y_0 + \frac{k(k-1)(k-2)}{3!}\Delta^3 Y_0 + \dots \quad (1)$$

*Facultad de Ingeniería, UNAM. Profesores de tiempo completo del Departamento de Matemáticas Aplicadas de la División de Ciencias Básicas

Donde: $k = \frac{X_k - X_0}{h}$

Se propone derivar la ecuación (1) con respecto a la variable independiente X . Dada la estructura de esta ecuación, es necesario aplicar la regla de la cadena:

$$\frac{dY}{dX} = \frac{dY}{dk} \cdot \frac{dk}{dX} \quad (2)$$

$$\frac{dk}{dX} = \frac{1}{h} \quad (3)$$

$$\frac{dY}{dk} = \Delta Y_0 + \frac{2k-1}{2!} \Delta^2 Y_0 + \frac{3k^2-6k+2}{3!} \Delta^3 Y_0 + \dots \quad (4)$$

Sustituyendo las ecuaciones (3) y (4) en (2) se obtiene:

$$\frac{dY}{dX} = \frac{1}{h} \left[\Delta Y_0 + \frac{2k-1}{2!} \Delta^2 Y_0 + \frac{3k^2-6k+2}{3!} \Delta^3 Y_0 + \dots \right] \quad (5)$$

Esta última ecuación (5) representa la primera derivada del polinomio interpolante que representa a la función tabular.

Derivando a (5) y utilizando de nuevo la regla de la cadena mostrada en la ecuación (2):

$$\frac{d^2 Y}{dX^2} = \frac{1}{h^2} [\Delta^2 Y_0 + (k-1) \Delta^3 Y_0 + \dots] \quad (6)$$

Derivando de nuevo:

$$\frac{d^3 Y}{dX^3} = \frac{1}{h^3} [\Delta^3 Y_0 + \dots] \quad (7)$$

El proceso puede repetirse las veces que se considere necesario, haciendo notar que al aumentar el orden de la derivada deseada debe aumentarse el orden de la diferencia considerada en el polinomio interpolante.

Retomando la ecuación (5). Si se trunca el polinomio interpolante hasta la primera diferencia y se sustituye a dicha diferencia por los puntos que la conforman en el orden en que aparecen en la función tabular se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{dY}{dX} &= \frac{1}{h} [\Delta Y_0] + e_r \\ &= \frac{1}{h} [(Y_1 - Y_0) + e_r] \\ &= \frac{1}{h} [-Y_0 + Y_1] + e_r \end{aligned} \quad (8)$$

Analizando esta última ecuación se percibe que por provenir de un polinomio interpolante truncado a la primera diferencia resulta sólo función de dos puntos provenientes de la función tabular: (X_0, Y_0) y (X_1, Y_1) . El polinomio que une a dos puntos es de grado $n = 1$, es decir, una línea recta que sólo puede ser derivada en una ocasión (dado que el valor de la siguiente derivada sería 0). Por otra parte, la interpretación que hace el Cálculo diferencial de la derivada en el valor de la pendiente de la recta tangente en determinado punto de la curva a derivar. En este sentido, ya que nuestra curva a derivar es una línea recta compuesta por dos puntos sólo puede obtenerse el valor de la derivada

en cada uno de esos puntos, pero en todo caso, la pendiente de la recta tangente será igual en ambos puntos.

La consideración sobre la obtención de la derivada en un punto es importante en este desarrollo, ya que el resultado del uso de las técnicas de interpolación es obtener el valor de la pendiente de la recta tangente, no su expresión analítica.

Es por esto que de acuerdo al polinomio interpolante seleccionado debe especificarse claramente su orden de interpolación y, en consecuencia, el punto en el cual desea obtenerse la derivada. Este punto seleccionado se denomina *pivote*.

Para la ecuación (8) la derivada puede obtenerse sólo en dos puntos, pero el resultado en ambos es el mismo. Como una convención se establece como pivote al punto (X_0, Y_0) ; para indicarlo se subraya el coeficiente respectivo. Por otra parte, a manera de establecer una notación más práctica, se eliminan los indicativos de las ordenadas de la ecuación dejándose sólo los coeficientes, pero en todo caso, la ecuación de derivación numérica contempla siempre iniciar en la ordenada Y_0 .

$$\frac{dY}{dX} = \frac{1}{h} [-Y_0 + Y_1] + e_r$$

Utilizando una notación más convencional en la derivada e incluyendo el punto de derivación (pivote) se tiene:

$$Y'_{X=X_0} = \frac{1}{h} [\underline{-1}, 1] + e_r \quad (9)$$

Finalmente, e_r representa el error que debe añadirse a la ecuación (9) para que el valor sea exacto. El cálculo del error merece ser analizado en forma separada, pero se adelanta que se obtiene una aproximación a él por medio del criterio del término siguiente [?].

Ahora bien, si se desea obtener fórmulas con menor error intrínseco se propone que la ecuación (5) sea truncada a partir de la segunda diferencia.

$$\frac{dY}{dX} = \frac{1}{h} \left[\Delta Y_0 + \frac{2k-1}{2!} \Delta^2 Y_0 \right] + e_r \quad (10)$$

Las ecuaciones que se obtengan de (10) se denominarán de *segundo orden de interpolación*. Al tomar en cuenta una segunda diferencia se consideran a los puntos (X_0, Y_0) , (X_1, Y_1) y (X_2, Y_2) de la función tabular. En consecuencia pueden ser varios tipos de curvas las que unan a estos tres puntos y que la derivada obtenida en cada punto sea diferente. Dado lo anterior, deben calcularse tres ecuaciones particulares para obtener las derivadas valuadas en (X_0, Y_0) , (X_1, Y_1) y (X_2, Y_2) respectivamente.

- Para la derivada en (X_0, Y_0) . El punto pivote se ubica en el primer punto de la función tabular. Esto tiene como consecuencia que en $k = \frac{X_k - X_0}{h}$ el valor de referencia es el propio $X_k = X_0$, por lo que $k = 0$. Sustituyendo este valor y los respectivos de las diferencias en la ecuación (10) se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{dY}{dX} &= \frac{1}{h} \left[\Delta Y_0 + \frac{2k-1}{2!} \Delta^2 Y_0 \right] + e_r \\ &= \frac{1}{h} \left[(Y_1 - Y_0) - \frac{1}{2}(Y_2 - 2Y_1 + Y_0) \right] + e_r \end{aligned}$$

Factorizando se obtiene:

$$\frac{dY}{dX} = \frac{1}{2h} [-3Y_0 + 4Y_1 - Y_2] + e_r$$

Modificando la notación:

$$Y'_{X=X_0} = \frac{1}{2h} [-\underline{3}, 4, -1] + e_r \quad (11)$$

- Para la derivada en (X_1, Y_1) . El punto pivote se ubica en el segundo punto de la función tabular. Esto tiene consecuencia que en $k = \frac{X_k - X_0}{h}$ el valor de referencia es $X_k = X_1$, por lo que $k = 1$. Sustituyendo este valor y los respectivos de las diferencias en la ecuación (10) se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{dY}{dX} &= \frac{1}{h} [\Delta Y_0 + \frac{2k-1}{2!} \Delta^2 Y_0] + e_r \\ &= \frac{1}{h} [(Y_1 - Y_0) + \frac{1}{2}(Y_2 - 2Y_1 + Y_0)] + e_r \end{aligned}$$

Factorizando se obtiene:

$$\frac{dY}{dX} = \frac{1}{2h} [-Y_0 + Y_2] + e_r$$

Modificando la notación:

$$Y'_{X=X_1} = \frac{1}{2h} [-1, \underline{0}, 1] + e_r \quad (12)$$

- Para la derivada en (X_2, Y_2) . El punto pivote se ubica en el segundo punto de la función tabular. Esto tiene consecuencia que en $k = \frac{X_k - X_0}{h}$ el valor de referencia es $X_k = X_2$, por lo que $k = 2$. Sustituyendo este valor y los respectivos de las diferencias en la ecuación (10) se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{dY}{dX} &= \frac{1}{h} [\Delta Y_0 + \frac{2k-1}{2!} \Delta^2 Y_0] + e_r \\ &= \frac{1}{h} [(Y_1 - Y_0) + \frac{3}{2}(Y_2 - 2Y_1 + Y_0)] + e_r \end{aligned}$$

Factorizando se obtiene:

$$\frac{dY}{dX} = \frac{1}{2h} [Y_0 - 4Y_1 + 3Y_2] + e_r$$

Modificando la notación:

$$Y'_{X=X_2} = \frac{1}{2h} [1, -4, \underline{3}] + e_r \quad (13)$$

Este proceso debe seguirse para definir otras formas de derivación numérica, incluso para derivadas de orden superior. No existe límite en cuanto al orden de interpolación que pueda elegirse, aunque por consideraciones del error el tercer orden de interpolación es el mas utilizado comúnmente.

Se presentan a continuación los esquemas de derivación comúnmente utilizados:

Primer orden de interpolación

$$Y'_{X=X_0} = \frac{1}{h} [-\underline{1}, 1] + e_r \quad (14)$$

Segundo orden de interpolación

$$Y'_{X=X_0} = \frac{1}{2h} [\underline{-3}, 4, -1] + e_r \quad (15)$$

$$Y'_{X=X_1} = \frac{1}{2h} [-1, \underline{0}, 1] + e_r \quad (16)$$

$$Y'_{X=X_2} = \frac{1}{2h} [1, -4, \underline{3}] + e_r \quad (17)$$

$$Y''_{X=X_1} = \frac{1}{h^2} [1, \underline{-2}, 1] + e_r \quad (18)$$

Tercer orden de interpolación

$$Y'_{X=X_0} = \frac{1}{6h} [\underline{-11}, 18, -9, 2] + e_r \quad (19)$$

$$Y'_{X=X_1} = \frac{1}{6h} [-2, \underline{-3}, 6, -1] + e_r \quad (20)$$

$$Y'_{X=X_2} = \frac{1}{6h} [1, -6, \underline{3}, 2] + e_r \quad (21)$$

$$Y'_{X=X_3} = \frac{1}{6h} [-2, 9, -18, \underline{11}] + e_r \quad (22)$$

$$Y''_{X=X_0} = \frac{1}{h^2} [\underline{2}, -5, 4, -1] + e_r \quad (23)$$

$$Y''_{X=X_1} = \frac{1}{h^2} [1, 0, \underline{-2}, 1, 0] + e_r \quad (24)$$

$$Y''_{X=X_0} = \frac{1}{h^2} [0, 1, \underline{-2}, 1] + e_r \quad (25)$$

$$Y''_{X=X_0} = \frac{1}{h^2} [-1, 4, -5, \underline{2}] + e_r \quad (26)$$

Como una técnica de comprobación de la correcta conformación de todas estas fórmulas, los coeficientes que las forman siempre deben sumar 0.

Es necesario resaltar la relación que existe entre el orden de la derivada y el orden de interpolación (orden de la diferencia máxima del polinomio interpolante) de cada fórmula. Si se desea obtener la segunda derivada de una función, para que este valor no sea 0 es necesario que el orden del

polinomio del cual procede sea al menos de 2; para lograr esto, la función deberá ser aproximada a través de un polinomio compuesto por 3 puntos por lo que debe considerar hasta la segunda diferencia. En consecuencia, el menor orden de interpolación disponible para obtener una fórmula de segunda derivada debe ser, precisamente, de segundo orden de interpolación.

3. Análisis del error

Sea el polinomio de Taylor[?]:

$$Y = Y_0 + (X - X_0)Y'_0 + \frac{(X - X_0)^2}{2!}Y''_0 + \frac{(X - X_0)^3}{3!}Y'''_0 + \frac{(X - X_0)^4}{4!}Y^{IV}_0 + \dots \quad (27)$$

Si $X = X_1$ se tiene que $X_1 - X_0 = h$, sustituyendo en (27):

$$Y_1 = Y_0 + hY'_0 + \frac{h^2}{2!}Y''_0 + \frac{h^3}{3!}Y'''_0 + \frac{h^4}{4!}Y^{IV}_0 + \dots \quad (28)$$

Despejando Y'_0 :

$$Y'_0 = \frac{1}{h} \left[Y_1 - Y_0 - \frac{h^2}{2!}Y''_0 - \frac{h^3}{3!}Y'''_0 - \frac{h^4}{4!}Y^{IV}_0 - \dots \right] \quad (29)$$

Esta ecuación puede expresarse como:

$$Y'_0 = \frac{1}{h} [-Y_0 + Y_1] - \frac{h}{2!}Y''_0 - \frac{h^2}{3!}Y'''_0 - \frac{h^3}{4!}Y^{IV}_0 + \dots \quad (30)$$

Puede observarse que la primera parte de la fórmula coincide plenamente con la de la primera derivada numérica de primer orden de interpolación mostrado en la ecuación (14). de acuerdo al criterio del término siguiente [?] podemos aproximar el error cometido en el uso de esta fórmula por el primer término $\frac{h}{2!}Y''_0$. Como seguramente sucederá, no se conoce el valor de Y''_0 , por lo que en forma convencional se dice que el orden de error está en función del valor de h , lo cual suele denotarse por $O(h)$. En conclusión, se dice que el esquema de la primera derivada numérica de primer orden de interpolación tiene un orden de error de $O(h)$.

$$Y'_{X=X_0} = \frac{1}{h} [-1, 1] + O(h) \quad (31)$$

Haciendo un proceso similar en la ecuación (27) cuando $X = X_2$ se tiene que $X_2 - X_0 = 2h$:

$$Y_2 = Y_0 + 2hY'_0 + 2h^2Y''_0 + \frac{4h^3}{3}Y'''_0 + \frac{2h^4}{3}Y^{IV}_0 + \dots \quad (32)$$

Si a la ecuación (32) se le resta cuatro veces la ecuación (28) se tiene:

$$\begin{aligned} Y_2 - 4Y_1 &= \left[Y_0 + 2hY'_0 + 2h^2Y''_0 + \frac{4h^3}{3}Y'''_0 + \frac{2h^4}{3}Y^{IV}_0 + \dots \right] - \\ &\quad \left[4Y_0 + 4hY'_0 + h^2Y''_0 + \frac{2h^3}{3}Y'''_0 + \frac{h^4}{3}Y^{IV}_0 + \dots \right] \\ &= -3Y_0 - 2hY'_0 + \frac{2h^3}{3}Y'''_0 - \frac{h^4}{3}Y^{IV}_0 + \dots \end{aligned} \quad (33)$$

Despejando Y'_0 :

$$Y'_0 = \frac{1}{2h} \left[-3Y_0 + 4Y_1 - Y_2 - \frac{2h^3}{3} Y_0''' + \frac{h^4}{3} Y_0^{IV} + \dots \right] \quad (34)$$

Que puede expresarse como:

$$Y'_0 = \frac{1}{2h} [-3Y_0 + 4Y_1 - Y_2] - \frac{h^2}{3} Y_0''' + \frac{h^4}{6} Y_0^{IV} + \dots \quad (35)$$

Por lo que de acuerdo al criterio del término siguiente se concluye que dicha fórmula, y en general todas las que provengan de un esquema de interpolación de segundo orden, tiene un orden de error de $O(h^2)$.

Se percibe lo importante que resulta elegir un buen orden de interpolación, el tamaño del paso h es determinante para obtener cotas menores de error.

Consideraciones finales

- Cuando las ecuaciones para aproximar a la derivada emplean sólo puntos a la derecha del punto pivote se les denominan *fórmulas de diferencias finitas hacia atrás*; lo cual implica que el valor de la derivada depende sólo de valores de la función de (X_i, Y_i) y previos.
- Cuando las ecuaciones para aproximar a la derivada emplea el mismo número de puntos a la derecha que a la izquierda del punto pivote se les denomina de *diferencias centrales*.
- La evaluación de la n -ésima derivada de la función sólo depende de los valores Y_i y de sus vecinos; es decir, no incluye derivadas de menor orden, por lo cual no es necesario efectuar derivadas sucesivas.
- Se recomienda emplear esquemas de diferencias centrales por ser más precisos que el resto.

4. Ejemplo de aplicación

Para la función definida en forma tabular:

X	Y
1,8	10,8894
1,9	12,7032
2,0	14,7781
2,1	17,1490
2,2	19,8550

Obtener:

- $f'(2,0)$ a partir de un esquema de interpolación de segundo orden. El punto pivote para este cálculo es $(2,0, 14,7781)$. Para la elección de una de las tres fórmulas disponibles dentro del esquema de interpolación de segundo orden debe contemplarse que de acuerdo a la posición

del punto pivote en la función tabular se dispone de puntos hacia atrás y hacia adelante del mismo. De acuerdo a las recomendaciones, cabe elegir una fórmula de diferencias centrales:

$$Y'_{X=X_1} = \frac{1}{2h} [-1, \underline{0}, 1] + e_r$$

Sustituyendo valores para $h = 0,1$:

$$Y'_{X=2,0} = \frac{1}{2(0,1)} [-12,7032 + 0(14,7781) + 17,1490]$$

$$Y'_{X=2,0} = 22,2290$$

- $f'(2,2)$ a partir de un esquema de interpolación de segundo orden. De nuevo, por la ubicación del punto pivote sólo es posible utilizar una fórmula de diferencias finitas hacia atrás, por lo cual la fórmula aconsejada es:

$$Y'_{X=X_2} = \frac{1}{2h} [1, -4, \underline{3}] + e_r$$

Sustituyendo valores para $h = 0,1$:

$$Y'_{X=2,2} = \frac{1}{2(0,1)} [14,7781 - 4(17,1490) + 3(19,8550)]$$

$$Y'_{X=2,2} = 28,7355$$

- $f''(2,0)$ a partir de un esquema de interpolación de segundo orden. Utilizando las mismas consideraciones la fórmula recomendada es:

$$Y''_{X=X_1} = \frac{1}{h^2} [1, \underline{-2}, 1] + e_r$$

Sustituyendo valores para $h = 0,1$:

$$Y''_{X=2,0} = \frac{1}{(0,1)^2} [12,7032 - 2(14,7781) + 17,1490]$$

$$Y''_{X=2,0} = 29,6$$

5. Conclusiones

Los resultados obtenidos demuestran a su vez la relevancia de las herramientas de interpolación, en este caso, para funciones tabulares equiespaciadas.

Las cotas de error, que pueden ser razonablemente estimadas, están en función, primordialmente, del tamaño del paso h . Si se considera, como un ejemplo, la aplicación a un sistema de muestreo a intervalos de tiempo muy pequeños puede percibirse que en la vida real los esquemas mostrados son muy pertinentes.