DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA

Se trata de determinar el valor de la derivada en un punto x_0 cuando se conoce un conjunto de puntos(x_k , y_k), con $x_k \in (a, b)$, y que se suponen parte de una función f del espacio vectorial de las funciones continuas en un intervalo de IR, $C_{[a, b]}$

1. Para ello es posible generar fórmulas numéricas, en primer lugar vamos a analizar las fórmulas hacia delante, ellas provienen de la función de interpolación de Newton para diferencias no divididas, lo que implica que los valores de x están a la misma distancia h.

La función de interpolación φ mencionada es tal que verifica que:

$f(x_i) = \varphi(x_i)$ para todo x_i del intervalo $[a, b]$
$f(x) = \varphi(x) + \varepsilon(x)$ siendo $\varepsilon(x)$ el error de interpolación

La expresión de la función de interpolación es:

$$\varphi(x) = f(x_0) + (x - x_0)\frac{\Delta f(x_0)}{h} + (x - x_0)(x - x_1)\frac{\Delta^2 f(x_0)}{2h^2} + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\frac{\Delta^3 f(x_0)}{3!h^3} + \dots$$

$$\dots + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\dots(x - x_{n-1})\frac{\Delta^n f(x_0)}{n!h^n}$$

Derivando la función de interpolación respecto de x resulta:

$$\varphi'(x) = \frac{\Delta f(x_0)}{h} + [(x - x_1) + (x - x_0)]\frac{\Delta^2 f(x_0)}{2h^2} + [(x - x_1)(x - x_2) + (x - x_0)(x - x_2) + (x - x_0)(x - x_1)]$$

$$\frac{\Delta^3 f(x_0)}{3!h^3} + \dots + [(x - x_1)(x - x_2)\dots(x - x_{n-1}) + (x - x_0)(x - x_2)(x - x_3)\dots(x - x_{n-1}) + \dots + (x - x_0)$$

$$(x - x_1)\dots(x - x_{n-2})]\frac{\Delta^n f(x_0)}{n!h^n}$$

Si buscamos la derivada en el punto x_0 quedaría:

$$\varphi'(x_0) = \frac{\Delta f(x_0)}{h} + [(x_0 - x_1) + (x_0 - x_0)]\frac{\Delta^2 f(x_0)}{2h^2} + [(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) + (x_0 - x_0)(x_0 - x_2) + (x_0 - x_0)$$

$$(x_0 - x_1)]\frac{\Delta^3 f(x_0)}{3!h^3} + \dots + [(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)\dots(x_0 - x_{n-1}) + (x_0 - x_0)(x_0 - x_2)(x_0 - x_3)\dots(x_0 - x_{n-1}) +$$

$$\dots + (x_0 - x_0)(x_0 - x_1)\dots(x_0 - x_{n-2})]\frac{\Delta^n f(x_0)}{n!h^n} =$$

Como $x_i - x_0 = i\,h$, pues todos los puntos están a la misma distancia h:

$$\varphi'(x_0) = \frac{\Delta f(x_0)}{h} + [-h]\,\frac{\Delta^2 f(x_0)}{2h^2} + [(-h)(-2h)]\,\frac{\Delta^3 f(x_0)}{3!h^3} + \ldots + [(-h)(-2h)\ldots(-nh)]\,\frac{\Delta^n f(x_0)}{n!h^n} =$$

$$= \frac{\Delta f(x_0)}{h} + [-h]\,\frac{\Delta^2 f(x_0)}{2h^2} + [2\,h]\,\frac{\Delta^3 f(x_0)}{3!h^3} + \ldots + [(-1)^{n-1}(n-1)!\,h^{n-1}]\,\frac{\Delta^n f(x_0)}{n!h^n} =$$

$$= \boxed{\frac{1}{h}\,\left[\Delta f(x_0) - \frac{1}{2}\Delta^2 f(x_0) + \frac{1}{3}\Delta^3 f(x_0) - \ldots + (-1)^{n-1}\frac{1}{n}\Delta^n f(x_0)\right]}$$

Esta es la fórmula que permite calcular la derivada en el punto x_0 denominada fórmula hacia delante en n puntos, es útil cuando el conjunto de puntos a considerar a partir de el valor x_0 es suficiente, la serie se trunca según la cantidad de puntos disponibles.

El error de diferenciación por aproximación depende del error de interpolación:

$$\varepsilon(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)\,\frac{f^{n+1}(\alpha)}{(n+1)!} \qquad \text{siendo } \alpha \in (a, b)$$

Derivamos la expresión del error:

$$\varepsilon'(x) = [(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_n) + (x - x_0)(x - x_2)\ldots(x - x_n) + \ldots + (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})]\,\frac{f^{n+1}(\alpha)}{(n+1)!}$$

Particularizando a x_0 resulta

$$\varepsilon'(x_0) = [(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)\ldots(x_0 - x_n) + (x_0 - x_0)(x_0 - x_2)\ldots(x_0 - x_n) + \ldots + (x_0 - x_0)(x_0 - x_1)\ldots(x_0 - x_{n-1})]$$
$$\frac{f^{n+1}(\alpha)}{(n+1)!} = [(-h)(-2h)\ldots(-nh)]\,\frac{f^{n+1}(\alpha)}{(n+1)!} = (-1)^n h^n n!\,\frac{f^{n+1}(\alpha)}{(n+1)!}$$

$$\boxed{\varepsilon'(x_0) = (-1)^n\; h^n\;\frac{f^{n+1}(\alpha)}{(n+1)},\ \alpha \in (a, b)}$$

Esta expresión permite calcular el error de diferenciación para las fórmulas hacia delante en n puntos.
Si se necesita calcular derivadas de orden mayor es suficiente con seguir el mismo procedimiento, se deriva φ' y ε' tantas veces como se precise.

Si se conocen las evaluaciones en los puntos: x_0, x_1 la ecuación en diferencias hacia delante se puede expresar: $\frac{df}{dx}(x_0) = \frac{1}{h}.\Delta f(x_0)$ es decir:

$$\frac{df}{dx}(x_0) = \frac{1}{h}(f(x_1) - f(x_0)) \qquad \text{que tiene un error del orden de } h^1.$$

Por ejemplo si se quiere generar una fórmula hacia delante para determinar la derivada segunda, hay que volver a derivar a φ' (x) y a ε'(x) y luego aplicar al punto x_0

$$f''(x) = \frac{1}{h^2}\left[\Delta^2 f(x) - \Delta^3 f(x) + \frac{11}{12}\Delta^4 f(x) - \ldots\right]$$

Tal que si se conocen las evaluaciones para x_0, x_1, x_2 se trunca la serie y resulta que la derivada aproximada responde a la fórmula:

$$\frac{d^2}{dx^2} f(x_0) = \frac{1}{h^2}\Delta^2 f(x) = \frac{f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)}{h^2} \qquad \text{que tiene un error del orden de } h^2$$

2. Otras expresiones numéricas que permiten calcular la derivada de la función en un punto, se denominan fórmulas centradas y provienen de la fórmula de Taylor alrededor de un punto:

$$f(x) = f(x_0) + h\frac{f'(x_0)}{1!} + h^2\frac{f^{II}(x_0)}{2!} + h^3\frac{f^{III}(x_0)}{3!} + \ldots + h^n\frac{f^n(x_0)}{n!}$$

Esta expresión de Taylor es tal que si los puntos están a una distancia kh de x_0:

$$f(x+kh) = f(x_0) + kh\frac{f'(x_0)}{1!} + (kh)^2\frac{f^{II}(x_0)}{2!} + (kh)^3\frac{f^{III}(x_0)}{3!} + \ldots + (kh)^n\frac{f^n(x_0)}{n!}$$

Por ejemplo:

$$f(x+h) = f(x_0) + h\frac{f'(x_0)}{1!} + h^2\frac{f^{II}(x_0)}{2!} + h^3\frac{f^{III}(x_0)}{3!} + \ldots + h^n\frac{f^n(x_0)}{n!}$$

$$f(x-h) = f(x_0) - h\frac{f'(x_0)}{1!} + (-h)^2\frac{f^{II}(x_0)}{2!} + (-h)^3\frac{f^{III}(x_0)}{3!} + \ldots + (-h)^n\frac{f^n(x_0)}{n!}$$

Si hacemos una combinación lineal entre ellas: f (x+h) - f (x-h) , restando miembro a miembro y truncando la serie en un término apropiado resulta:

$$f(x+h) - f(x-h) = 2h\frac{f'(x_0)}{1!} + 2h^3\frac{f^{III}(x_0)}{3!} + \ldots$$

Despejando La derivada primera:

$$\boxed{f'(x_0) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} - \frac{h^2 f^{III}(\alpha)}{6} \quad (\alpha \in [x_0 + h, x_0 - h])}$$

El primer término corresponde al valor de la derivada aproximada en x_0 y el segundo término corresponde al error de diferenciación por aproximación.

Este tipo de fórmula es conocida con el nombre de fórmula centrada en dos puntos, observe la importancia de h en la determinación del error, que es del orden de h^2.

Otra combinación lineal de expresiones de Taylor para un número determinado de puntos genera fórmulas centradas de diferenciación, la serie se trunca de manera que permita obtener una expresión para la derivada aproximada y una para el error.

Se pueden generar fórmulas centradas en cuatro puntos, o más, siempre realizando combinaciones lineales de las expresiones de Taylor para tantos puntos como se prefiera.

En esto consisten los métodos numéricos que permiten calcular la derivada de una función en un punto, cuando de ella se conocen ciertos pares ordenados (x_k, y_k)

La elección entre una fórmula hacia delante o una fórmula centrada dependerá de la forma en que se distribuyen los puntos, es decir de la ubicación del punto x_0 donde se quiere calcular el valor de la misma respecto a los demás.

Algunas fórmulas bastante utilizadas que involucran cuatro puntos:

$$\boldsymbol{f'(x) = \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h}}$$

$$\boldsymbol{f''(x) = \frac{-f(x-2h) + 16f(x-h) - 30f(x) + 16f(x+h) - f(x+2h)}{12h^2}}$$