DERIVACIÓN NUMÉRICA

Ya hemos estudiado cómo aproximar los valores de una función mediante la recta tangente.

En lo que queda de tema, vamos a estudiar cómo aproximar la derivada de una función de la que sólo conocemos un conjunto de datos. Para ello, vamos a aprovechar e introducir el concepto de interpolación polinómica, de gran utilidad en diferentes campos.

Interpolación Polinómica

El objetivo de la interpolación polinómica es simple: dado un conjunto de datos, que denominaremos nodos, $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$, busccamos un polinomio que pase por dichos puntos, es decir, de modo que $P(x_i) = y_i$ para cualquier subíndice i. Estos datos representan puntos en el plano por el que sabemos que pasa una cierta función f cuya forma concreta desconocemos. Por ejemplo, son los datos obtenidos a partir de un experimento. La idea fundamental es que, si el conjunto de nodos es suficientemente grande y bien distribuido, dicho polinomio debe aproximar adecuadamente a la fujnción.

Para esto vamos a utilizar los polinomios de Lagrange. Supongamos que tenemos, como hemos dicho antes $n+1$ nodos $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$. El polinomio de Lagrange toma entonces la forma

$$P_{n+1}(x) = \sum_{i=1}^{n} L_{n,i}(x) y_i \tag{1}$$

donde las funciones $L_{n,i}$ son tomadas de tal forma que $L_{n,i}(x_j) = 0$ si $i \neq j$, y $L_{n,i}(x_i) = 1$. Puede verse que esta función toma la forma:

$$L_{n,i}(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} \tag{2}$$

De esta forma, el polinomio de interpolación de grado uno que pasa por dos puntos $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$, con $x_0 \neq x_1$, es:

$$P(x) = L_0(x) y_0 + L_1(x) y_1,$$

$(x_0, y_0), \ (x_1, y_1), \ \dots, \ (x_n, y_n)$ $n+1$ puntos (nodos)

$x_0 \neq x_1$

$P(x) = L_0(x)\, y_0 + L_1(x)\, y_1$, donde

$$L_0(x) = L_{0,1}(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \quad \text{y} \quad L_1(x) = L_{1,1}(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

$$P(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\, y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\, y_1$$

$P(x_0) = y_0$, $P(x_1) = y_1$

$P_3(x) = L_0(x)\, y_0 + L_1(x)\, y_1 + L_2(x)\, y_2$ donde

$(n+1)$

$(2+1) = 3$ nodos

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} \ ; \quad L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \ , \quad L_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_1 - x_0)(x_2 - x_0)}$$

donde

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \qquad \text{y} \qquad L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0},$$

que verifican

$$L_0(x_0) = 1, \quad L_0(x_1) = 0, \quad L_1(x_0) = 0, \quad L_1(x_1) = 1.$$

El polinomio de interpolación de grado dos que pasa por tres puntos $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)$, con $x_i \neq x_j$, es:

$$P(x) = L_0(x)y_0 + L_1(x)y_1 + L_2(x)y_2$$

donde

$$L_0(x) = \frac{(}{x - x_1)(x - x_2)}(x_0 - x_1)(x_0 - x_2), \quad L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}, \quad \text{y} \quad L_2(x) = \frac{(x - x_0)(x -}{x_2 - x_0)(x_2 -}$$

<u>Ejemplo</u>: Consideremos los siguientes nodos $(-1, 1), (0, -1), (1, 4), (2, 2)$.

El polinomio en este caso toma la forma:

$$P_4(x) = y_0 L_{3,0}(x) + y_1 L_{3,1}(x) + y_2 L_{3,2}(x) + y_3 L_{3,3}(x)$$

donde, tras usar la expresión 2,

$$L_{3,0}(x) = -\frac{1}{6}(x^3 - 3x^2 + 2x),$$

$$L_{3,1}(x)\frac{1}{2}(x^3 - 2x^2 - x + 2),$$

$$L_{3,2}(x) = -\frac{1}{2}(x^3 - x^2 - 2x),$$

$$L_{3,3}(x) = \frac{1}{6}(x^3 - x).$$

Es decir, el polinomio nos queda:

$$P_4(x) = -\frac{7}{3}x^3 + \frac{7}{2}x^2 + \frac{23}{6}x - 1,$$

el cual podemos comprobar que satisface que $P_4(x_i) = y_i$.

$(-1,1)\,,\,(0,-1)\,,\,(1,4)\,,\,(2,2)$

x_0	-1	0	1	2
y_0	1	-1	4	2

$$P_4(x) = L_0(x)\,y_0 + L_1(x)\,y_1 + L_2(x)\,y_2 + L_3(x)\,y_3$$

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} = \frac{x(x-1)(x-2)}{(-1)(-2)(-3)} = -\frac{1}{6}\left(x(x-1)(x-2)\right)$$

$$L_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} = \frac{(x+1)(x-1)(x-2)}{1\,(-1)\,(-2)} = \frac{1}{2}\left((x+1)(x-1)(x-2)\right)$$

$$L_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)} = \frac{(x-1)\,x\,(x-2)}{2\cdot 1\,(-1)} = -\frac{1}{2}(x+1)\,x\,(x-2)$$

$$L_3(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)} = \frac{(x+1)\,x\,(x-1)}{3\cdot 2\cdot 1} = \frac{1}{6}\,x(x+1)(x-1)$$

$$P_4(x) = \frac{-1}{6}\,x(x-1)(x-2) - \frac{1}{2}(x+1)(x-1)(x+2) - 2\,(x+1)\,x\,(x-2) + \frac{1}{3}\,x\,(x+1)(x-1)$$

Como es usual, cada vez que se presenta un método de aproximación de soluciones, necesitamos determinar cuál es el error cometido al realizar dicha aproximación. En este sentido, obtenemos el siguiente resultado que nos da una estimación de dicho error:

TEOREMA (FÓRMULA DEL ERROR)

Sea f una función real definida en un intervalo (a, b) y consideremos $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$, $n+1$ nodods de dicha función, es decir, satisfaciendo $y_i = f(x_i)$. Sea P_n el correspondiente polinomio interpolador de Lagrange, y tomemos $x \in (a, b)$. Se tiene entonces que:

valor en (a,b)

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \left| \frac{f^{(n+1)}(\varepsilon)}{(n+1)!} \right| |x - x_0| \cdots |x - x_n|$$

con ε un cierto valor en (a, b).

Como podemos ver, la diferencia entre el valor de la función y el valor aproximado depende fundamentalmente de dos elementos:

Por un lado, la derivada $(n+1)$-ésima de la función. Obviamente, mientras menor sea dicha derivada, menor será el error cometido. Es decir, mientras más "suave"sea la función, menos errático su comportamiento, mejor aproximará el polinomio de Lagrange.

Por otro lado, tenemos la diferencia entre el valor a estimar x y los distintos nodos x_j. Es decir, si el valor que pretendemos estimar está lejos de los nodos usados para obtener el polinomio, entonces el error cometido puede dispararse.

Derivada progresiva y regresiva

Mediante la interpolación polinómica, hemos aproximado el valor de la función por el valor de un polinomio. Ahora, ya estamos en condiciones de aproximar la derivada una vez tenemos datos de la función.

La derivación numérica se usa para realizar derivadas que no tienen una solución conocida o que presentan un desarrollo complicado. Consiste en una técnica de análisis numérico para calcular una aproximación a la derivada de una función en un punto.

La idea fundamental es, dados dos nodos asociados a una función, considerar el polinomio P_2 de Lagrange asociado y usar este para calcular la derivada.

Concretamente, sea $(x_0, f(x_0), (x_1, f(x_1))$ dos nodos de una función f. Sabemos, por la sección anterior, que el polinomio P_2 tiene la expresión

$$P_2(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1) + \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0).$$

No es difícil ver que la derivada de este polinomio puede expresarse como:

$$P_2'(x) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} + \frac{f(x_1)}{x_1 - x_0}$$

lo cual equivale a la pendiente media entre los dos nodos. De este modo

$$P_2'(x_0) \approx f'(x_0) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \quad \text{y} \quad f'(x_1) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \approx P'(x_1) \qquad f'(x_0) = f'(x_1) = f'(x_n)$$

Si reescribimos estas expresiones con otra notación tenemos:

$$f'(c) \approx \frac{f(c+h) - f(c)}{h} \quad \text{y} \quad f'(c) \approx \frac{f(c) - f(c-h)}{h}.$$

Diferencia progresiva de paso h   Diferencia regresiva de paso h

Esto nos sugiere la siguiente forma de aproximar numéricamente la derivada:

DEFINICIÓN

Sea f una función y tomemos un punto c en su dominio. Definimos la fórmula de diferencia progresiva de paso h como:

$$\cup f'(c) = \frac{f(c+h) - f(c)}{h}.$$

De forma análoga, definimos la fórmula de diferencia regresiva de paso h como:

$$\cap f'(x) = \frac{f(c) - f(c-h)}{h}.$$

Usamos la diferencia progresiva y regresiva como aproximación de $f'(x_0)$. Si el paso h es suficientemente pequeño, estas fórmulas nos dan una buena aproximación de la derivada. De hecho, un análisis del error nos dice que:

$$E \leq \left| \frac{f''(\varepsilon)}{2} \right| |h|$$

donde E representa el error cometido al aproximar $f'(x_0)$ con diferencia progresiva o regresiva; $\varepsilon \in (x_0, x_0 + h)$ en el caso de diferencia progresiva y $\varepsilon \in (x_0 - h, x_0)$ en la diferencia regresiva.

Ejercicio:

Sea $f(x) = \frac{x+1}{x}$ y $h = 0,1$.

1. Aproximar $f'(1)$ con las fórmulas de las diferencias regresiva y progresiva.
2. Calcular la cota máxima del error en cada caso.
3. Calcular el error exacto en cada caso y comparar el resultado con lo obtenido en el apartado anterior.

1. $^{v}f'(c) = \frac{f(c+h)-f(c)}{h} = \frac{\frac{c+h+1}{c+h} - \frac{c+1}{c}}{h} = \frac{\frac{c+1,1}{c+0,1} - \frac{c+1}{c}}{0,1} \xrightarrow{f(1)} \frac{\frac{2,1}{1,1} - 2}{0,1} = -0,9090$

$^{n}f'(c) = \frac{f(c)-f(c-h)}{h} = \frac{\frac{c+1}{c} - \frac{c-h+1}{c+h}}{h} = \frac{\frac{c+1}{c} - \frac{c+0,9}{c-0,1}}{0,1} \xrightarrow{f(1)} \frac{2 - \frac{1,9}{0,9}}{0,1} = -1,\hat{1}$

2. $f'(x) = \frac{x-(x+1)}{x^2} = \frac{-1}{x^2}$

$f''(x) = 2x^{-3} = \frac{2}{x^3}$

$\mathcal{E} \le \left|\frac{f''(\varepsilon)}{2}\right| |h| \to {}^{v}\mathcal{E} \le \frac{\left|\frac{2}{\varepsilon^3}\right|}{2} 0,1 = \frac{0,1}{\varepsilon^3}$

$^{v}\varepsilon \to \varepsilon(1, 1+h) = (1, 1,1) \to 1 < \varepsilon < 1,1 \to \frac{1}{1,1} < \frac{1}{\varepsilon} < 1$

$\frac{1}{1,1^3} < \frac{1}{\varepsilon^3} < 1 \longrightarrow \frac{0,1}{\varepsilon^3} < 1 \cdot 0,1 = 0,1$ Diferencia progresiva $\mathcal{E} \le 0,1$

$^{n}\varepsilon \to \varepsilon(1-h, 1) = (0,9, 1) \to 0,9 < \varepsilon < 1 \to 1 < \frac{1}{\varepsilon} < \frac{1}{0,9}$

$1 < \frac{1}{\varepsilon^3} < \frac{1}{0,9^3} \longrightarrow \frac{0,1}{\varepsilon^3} < \frac{1}{0,9^3} 0,1 \approx 0,1371$ Diferencia regresiva $\mathcal{E} \le 0,13$

3. $^{v}\mathcal{E} = |f'(1) - \overset{v}{f}{}'(1)| = |-1-(-0,9090)| \approx 0,09 \le 0,1$

$^{n}\mathcal{E} = |f'(1) - \hat{f}'(1)| = |-1-(-1,1)| = 0'\hat{1} \le 0,13$