DERIVACIÓN NUMÉRICA

Axel Larreteguy 2025

INTRODUCCIÓN

Las fórmulas de derivación numérica se utilizan cuando las soluciones analíticas son imprácticas o imposibles de resolver, o cuando la función a derivar está dada en un número de puntos discretos, como es frecuente en el caso de datos experimentales.

FÓRMULAS DE DIFERENCIAS MÁS USADAS

Fórmulas de diferencias progresivas y regresivas de orden O(h):

$$f'(x_0) \approx \frac{f_1 - f_0}{h} \quad \text{(diferencia progresiva)}$$

$$f'(x_0) \approx \frac{f_0 - f_{-1}}{h} \quad \text{(diferencia regresiva)}$$

Fórmulas de diferencias centradas de orden O(h^2):

$$f'(x_0) \approx \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}$$

$$f''(x_0) \approx \frac{f_{-1} - 2f_0 + f_1}{h^2}$$

FÓRMULAS DE DIFERENCIAS CENTRADAS

Proporcionan un grado de precisión razonable para valores de h no demasiado pequeños.

TEOREMA 1 (Fórmula Centrada de Orden $O(h^2)$)

Supongamos que $f \in C^3[a,b]$ y que x-h, x, x+h $\in [a,b]$. Entonces:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

$\exists$ $c = c(x) \in [a,b]$ tal que

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + E_{trunc}$$

$$E_{trunc}(f,h) = -\frac{h^2 f^{(3)}(c)}{6} = O(h^2)$$

FÓRMULAS DE DIFERENCIAS CENTRADAS

Demostración: realizamos el desarrollo de Taylor de orden 2 de f alrededor de x, para f(x+h) y f(x-h):

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f^{(2)}(x)h^2}{2!} + \frac{f^{(3)}(c_1)h^3}{3!}$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{f^{(2)}(x)h^2}{2!} - \frac{f^{(3)}(c_2)h^3}{3!}$$

Restando se obtiene:

$$f(x+h) - f(x-h) = 2f'(x)h + \frac{\left(f^{(3)}(c_1) + f^{(3)}(c_2)\right)h^3}{3!}$$

Como $f^{(3)}(x)$ es continua, por el teorema del valor medio, existe c tal que

$$f^{(3)}(c) = \frac{f^{(3)}(c_1) + f^{(3)}(c_2)}{2}$$

Por lo que resulta:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f^{(3)}(c)h^2}{3!}$$

FÓRMULAS DE DIFERENCIAS CENTRADAS

TEOREMA 2 (Fórmula Centrada de Orden O(h^4))

Supongamos que f∈C^5[a,b] y que x-2h, x-h, x, x+h, x+2h ∈[a,b]. Entonces:

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

∃ c=c(x) ∈[a,b] tal que

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

$$E_{trunc}(f,h) = \frac{h^4 f^{(5)}(c)}{30} = O(h^4)$$

DIFERENCIAS PARA DERIVADAS DE ORDEN SUPERIOR

Se deducen a partir del Teorema de Taylor. Las más habituales son las de orden $O(h^2)$ y $O(h^4)$.

EJEMPLO. Deducción de la fórmula de orden $O(h^2)$ para f”(x).

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2 f''(x)}{2!} + \frac{h^3 f^{(3)}(x)}{3!} + \frac{h^4 f^{(4)}(x)}{4!} + \ldots$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2 f''(x)}{2!} - \frac{h^3 f^{(3)}(x)}{3!} + \frac{h^4 f^{(4)}(x)}{4!} - \ldots$$

Sumando se eliminan los términos con derivadas impares:

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + \frac{2h^2 f''(x)}{2!} + \frac{2h^4 f^{(4)}(x)}{4!} + \ldots$$

Despejando f”(x) y truncando en la derivada cuarta resulta:

$$f''(x_0) = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} - \frac{h^2 f^{(4)}(c)}{12}$$

DIFERENCIAS PARA DERIVADAS DE ORDEN SUPERIOR

Fórmulas de diferencias centradas de orden O(h^2)

$$f''(x_0) \approx \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2}$$

$$f^{(3)}(x_0) \approx \frac{f_2 - f_1 + 2f_{-1} - f_{-2}}{2h^3}$$

$$f^{(4)}(x_0) \approx \frac{f_2 - 4f_1 + 6f_0 - 4f_{-1} - f_{-2}}{h^4}$$

ERRORES AL DERIVAR NUMÉRICAMENTE

En general, cuando se calcula una derivada, se consigue una precisión que suele ser aproximadamente la mitad de la precisión de la computadora. Es habitual tener una pérdida importante de cifras significativas.

Las dificultades se agudizan si se trabaja con datos experimentales, ya que los valores de las funciones se han redondeado y sólo tienen unas pocas cifras significativas. En estos casos suele ser conveniente la realización de un ajuste de cuadrados mínimos y derivar la fórmula obtenida para dicha curva.

ERRORES AL DERIVAR NUMÉRICAMENTE

Error y h óptimo: f'(x) aprox. centrada

Incluimos los errores de redondeo:

$$f(x_0 - h) = y_{-1} + e_{-1} \quad f(x_0 + h) = y_1 + e_1$$

$$f'(x_0) \approx \frac{y_1 - y_{-1}}{2h} \qquad f'(x_0) = \frac{y_1 - y_{-1}}{2h} + E(f,h)$$

$$E(f,h) = E_{red} + E_{trunc} = \frac{e_1 - e_{-1}}{2h} - \frac{h^2 f^{(3)}(c)}{6}$$

$|e_{-1}| \le \varepsilon \quad y \quad |e_1| \le \varepsilon$ (calculo en una computadora)

$$M = máx\{(|f^{(3)}(x)|) : a \le x \le b\}$$

Resulta: $|E(f,h)| \le \dfrac{\varepsilon}{h} + \dfrac{Mh^2}{6}$

$h = \left(\dfrac{3\varepsilon}{M}\right)^{1/3}$ minimiza la parte derecha de la desigualdad

ERRORES AL DERIVAR NUMÉRICAMENTE

Error y h óptimo: f''(x) aprox. centrada

$$f''(x_0) = \frac{y_1 - 2y_0 + y_{-1}}{h^2} + E(f,h)$$

$$E(f,h) = \frac{e_1 - 2e_0 + e_{-1}}{h^2} - \frac{h^2 f^{(4)}(c)}{12}$$

$$\left|E(f,h)\right| \leq \frac{4\varepsilon}{h^2} + \frac{Mh^2}{12}$$

$$h = \left(\frac{48\varepsilon}{M}\right)^{1/4}$$

minimiza la parte derecha de la desigualdad