La derivación numérica es una técnica para aproximar derivadas de una función, sin embargo, no siempre se sabe qué función se va a derivar y sólo se tiene un conjunto de puntos, o la función que se quiere derivar es muy compleja. Así, existen diferentes métodos para ello y en este trabajo se compararán los resultados y tiempos de ejecución de la primera, segunda y tercera derivada con el método clásico de derivación numérica y derivación utilizando polinomios interpoladores. El método clásico consiste en calcular las derivadas utilizando su definición y aproximación por series de Taylor, estas fórmulas se conocen como diferencias hacia adelante, diferencias hacia atrás, y diferencias centradas para la primer derivada. Sin embargo, para este método es necesario conocer la función que se va a derivar. Las fórmulas para calcular las derivadas son las siguientes:

$$\begin{aligned}
&f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h}, f'(x) \approx \frac{f(x)-f(x-h)}{h}, f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h},\\
&f''(x) \approx \frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2},\\
&f'''(x) = \frac{f(x+2h)-2f(x+h)+2f(x-h)-f(x-2h)}{2h^3}.
\end{aligned}$$

En el caso donde se tengan conjuntos de puntos y no se conozcan las funciones que los generan, se puede derivar utilizando métodos de interpolación. Se construyen polinomios para estos datos y se deriva el polinomio en el punto que nos interesa conocer la derivada. Si se interpola utilizando los polinomios de Lagrange,

$$\begin{aligned}
L(x) &= \sum_{j=0}^{n} y_j L_j(x),\\
L_j(x) &= \prod_{i\neq j} \frac{x-x_i}{x_j-x_i},
\end{aligned}$$

se encuentra para su primer derivada:

$$\begin{aligned}
L_j'(x) &= L_j(x)\left(\sum_{i\neq j}\frac{1}{x-x_i}\right),\\
&= \prod_{i\neq j}\frac{x-x_i}{x_j-x_i}\left(\sum_{i\neq j}\frac{1}{x-x_i}\right).
\end{aligned}$$

Para la segunda y tercer derivada:

$$\begin{aligned}
L_j''(x) &= L_j(x)\left[\left(\sum_{i\neq j}\frac{1}{x-x_i}\right)^2 - \sum_{i\neq j}\frac{1}{(x-x_i)^2}\right],\\
L_j'''(x) &= L_j(x)\left[\left(\sum_{i\neq j}\frac{1}{x-x_i}\right)^3 - 3\left(\sum_{i\neq j}\frac{1}{x-x_i}\right)\left(\sum_{i\neq j}\frac{1}{(x-x_i)^2}\right) + 2\left(\sum_{i\neq j}\frac{1}{(x-x_i)^3}\right)\right].
\end{aligned}$$

Así, se utilizó la función $sin(x)$ para calcular sus derivadas y compararlas con las derivadas analíticas, ya que sus derivadas son: $f'(x) = cos(x)$, $f''(x) = -sin(x)$, y $f'''(x) = -cos(x)$, y se encontraron los resultados:

	$\|\|f'_{aprox}(x) - f'(x)\|\|$	$\|\|f''_{aprox}(x) - f''(x)\|\|$	$\|\|f'''_{aprox}(x) - f'''(x)\|\|$
Derivación numérica	-4.19E-05	6.99E-09	-2.31E-07
Derivación Lagrange	-8.41E-06	8.38E-05	7.86E-06

Cuadro 1: Errores promedio

donde se muestra buenos resultados con ambos métodos, sin embargo, ambos dependen de parámetros que podrían mejorar o empeorar los resultados. Por ejemplo, en el caso de las derivadas con series de Taylor, estas dependen fuertemente del valor de h escogido, mientras más pequeño sea h mejor será su resultado, en este caso, se escogió h = 0.001, y también depende de conocer la función que mapea los puntos, que no siempre es posible.

En el caso de derivación utilizando los polinomios de Lagrange, la derivada se calculó en un punto cercado al buscado, ya que al calcular la derivada en un punto que construye el polinomio, se indeterminan todas las derivadas por la división entre cero. Sin embargo, si se obtienen pares de puntos de algún experimento, los resultados de su derivada con la construcción de interpoladores tiene muy buenos resultados y no se necesita conocer la función, que es una ventaja muy grande. Además, los tiempos de ejecución de ambos métodos fueron muy parecidos 0.000258 y 0.000239 para el método clásico y con los interpoladores.