DERIVACIÓN NUMÉRICA

1. ¿Por qué derivar numéricamente?

En muchos problemas se necesita estimar la derivada de una magnitud cuando la función no se conoce de forma analítica, cuando su expresión es difícil de derivar o cuando sólo se dispone de valores obtenidos experimentalmente. La derivación numérica reemplaza la pendiente instantánea por pendientes calculadas a partir de valores cercanos de la función.

Sea una malla uniforme $x_i = x_0 + i \cdot h$, donde h es la separación entre nodos, y sea $f_i = f(x_i)$. Las fórmulas de diferencias finitas permiten aproximar $f'(x_i)$ combinando valores de f en nodos vecinos.

Idea geométrica. La derivada es la pendiente de la recta tangente. Las diferencias finitas usan la pendiente de una recta secante; al acercar los nodos, la secante puede aproximarse a la tangente.

2. Fórmulas básicas para la primera derivada

2.1. Diferencia hacia adelante o progresiva

$$f'(x_i) \approx [\, f(x_i+h) - f(x_i) \,] \,/\, h \;=\; (f_{i+1} - f_i)/h$$

Se utiliza especialmente cuando x_i está en el extremo izquierdo de los datos y se dispone de un punto a su derecha. Su error de truncamiento es de orden O(h).

2.2. Diferencia hacia atrás o regresiva

$$f'(x_i) \approx [\, f(x_i) - f(x_i-h) \,] \,/\, h \;=\; (f_i - f_{i-1})/h$$

Es apropiada en el extremo derecho de los datos, cuando se dispone de un punto a la izquierda. También posee error de truncamiento O(h).

2.3. Diferencia central

$$f'(x_i) \approx [\, f(x_i+h) - f(x_i-h) \,] \,/\, (2h) \;=\; (f_{i+1} - f_{i-1})/(2h)$$

Se usa en puntos interiores cuando existen datos a ambos lados de x_i. Por simetría se cancelan términos del desarrollo de Taylor y el error de truncamiento es $O(h^2)$.

Consecuencia. Con el mismo tamaño de paso y una función suficientemente suave, la fórmula central suele ser más precisa que las fórmulas básicas hacia adelante y hacia atrás.

3. Obtención mediante el desarrollo de Taylor

Para analizar la precisión de las fórmulas anteriores desarrollamos f alrededor de x_i:

$$f(x_i+h) = f_i + h\, f'_i + (h^2/2)\, f''_i + (h^3/6)\, f'''_i + O(h^4)$$

$$f(x_i-h) = f_i - h\, f'_i + (h^2/2)\, f''_i - (h^3/6)\, f'''_i + O(h^4)$$

3.1. Error de la fórmula progresiva

Despejando f'_i de la primera expansión:

$$f'_i = (f_{i+1} - f_i)/h - (h/2)f''_i - (h^2/6)f'''_i - \dots$$

Por lo tanto, el término dominante del error de truncamiento es proporcional a h:

$$E_t = f'(x_i) - D_+f(x_i) = -(h/2)\, f''(\xi), \quad E_t = O(h)$$

donde ξ pertenece al intervalo entre x_i y x_i+h.

3.2. Error de la fórmula regresiva

$$f'_i = (f_i - f_{i-1})/h + (h/2)f''_i - (h^2/6)f'''_i + \dots$$

$$E_t = f'(x_i) - D_-f(x_i) = +(h/2)\, f''(\xi), \quad E_t = O(h)$$

3.3. Error de la fórmula central

Restando las dos expansiones de Taylor se cancelan automáticamente los términos pares:

$$f(x_i+h) - f(x_i-h) = 2h\, f'_i + (h^3/3)f'''_i + O(h^5)$$

$$f'_i = (f_{i+1} - f_{i-1})/(2h) - (h^2/6)f'''_i + O(h^4)$$

$$E_t = f'(x_i) - D_0f(x_i) = -(h^2/6)\, f'''(\xi), \quad E_t = O(h^2)$$

Punto importante. La mayor precisión de la diferencia central no se debe simplemente a “usar más términos de Taylor”, sino a la simetría de la fórmula, que cancela el término asociado a f″ y hace que el primer término de error sea proporcional a h².

4. ¿Conviene hacer h cada vez más pequeño?

En aritmética exacta, reducir h disminuye el error de truncamiento. En una computadora, sin embargo, los valores $f(x_i+h)$ y $f(x_i)$ pueden ser muy próximos. Su resta produce cancelación de cifras significativas y el cociente posterior por un h muy pequeño amplifica el efecto del redondeo.

Conclusión. Reducir h mejora inicialmente la aproximación, pero no indefinidamente. Existe un compromiso entre error de truncamiento y error de redondeo.

4.1. Ejemplo con una función conocida

Consideremos $f(x)=x\cdot e^x$. Su derivada analítica es:

$$f'(x) = (x+1)e^x$$

En x=1:

$$f'(1) = 2e = 5{,}43656365691809$$

H	Diferencia progresiva	Error absoluto
0,1	5,8630079788	4,264e-01

0,01	5,4775196708	4,096e-02
0,001	5,4406428924	4,079e-03
0,0001	5,4369714173	4,078e-04

La tabla muestra la tendencia inicial: al reducir h disminuye el error de truncamiento. Si se continúa reduciendo h hasta valores extremadamente pequeños, el redondeo de punto flotante termina limitando la precisión.

5. Fórmulas de tres puntos

Cuando se dispone de más nodos, pueden combinarse expansiones de Taylor para eliminar términos de error y obtener aproximaciones de mayor orden.

5.1. Primera derivada — progresiva de tres puntos

$$f'(x_i) \approx [\, -3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2} \,] / (2h), \quad \text{error } O(h^2)$$

5.2. Primera derivada — regresiva de tres puntos

$$f'(x_i) \approx [\, 3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2} \,] / (2h), \quad \text{error } O(h^2)$$

5.3. Primera derivada — central de tres puntos

$$f'(x_i) \approx [\, f_{i+1} - f_{i-1} \,] / (2h), \quad \text{error } O(h^2)$$

Obsérvese que la fórmula central básica ya utiliza tres nodos si se cuenta el nodo x_i en el esquema, aunque el valor f_i no aparezca en el numerador. Por eso es más claro hablar de una plantilla (stencil) de tres nodos.

6. Aproximación de la segunda derivada

Sumando los desarrollos de Taylor de $f(x_i+h)$ y $f(x_i-h)$ se obtiene:

$$f''(x_i) \approx [\, f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1} \,] / h^2, \quad \text{error } O(h^2)$$

Esta fórmula central es una de las aproximaciones más utilizadas para la segunda derivada.

7. Fórmulas de mayor exactitud

Con más puntos pueden construirse fórmulas de orden superior. Algunos casos frecuentes para una malla uniforme son:

Derivada	Esquema	Fórmula	Orden
f'	Central, 5 puntos	$(f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2})/(12h)$	$O(h^4)$
f''	Central, 3 puntos	$(f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})/h^2$	$O(h^2)$
f''	Central, 5 puntos	$(-f_{i+2} + 16f_{i+1} - 30f_i + 16f_{i-1} - f_{i-2})/(12h^2)$	$O(h^4)$

8. Ejemplo con datos tabulados

Supongamos que sólo se dispone de los siguientes valores, correspondientes a una malla uniforme con h=0,1:

i	x_i	$f(x_i)$
0	1,0	2,7182818
1	1,1	3,3045826
2	1,2	3,9841403
3	1,3	4,7700857

8.1. Derivada en x=1,1 mediante diferencia progresiva

$$f'(1{,}1) \approx [f(1{,}2) - f(1{,}1)]/0{,}1$$

$$f'(1{,}1) \approx (3{,}9841403 - 3{,}3045826)/0{,}1 = 6{,}795577$$

8.2. Derivada en x=1,1 mediante diferencia central

$$f'(1{,}1) \approx [f(1{,}2) - f(1{,}0)]/0{,}2$$

$$f'(1{,}1) \approx (3{,}9841403 - 2{,}7182818)/0{,}2 = 6{,}3292925$$

Si, sólo para verificar el ejemplo, reconocemos que los datos provienen de $f(x)=x\cdot e^x$, entonces:

$$f'(1{,}1) = 2{,}1e^{1{,}1} = 6{,}308748650$$

Método	Aproximación	Error absoluto
Progresiva O(h)	6,7955770	0,4868283
Central $O(h^2)$	6,3292925	0,0205438

En este caso la diferencia central produce una aproximación claramente mejor, coherente con su error de truncamiento de segundo orden.

9. Tabla de diferencias y derivada del polinomio interpolador de Newton

Cuando los datos están igualmente espaciados también puede construirse el polinomio interpolador de Newton a partir de diferencias hacia adelante. Derivar ese polinomio proporciona fórmulas de derivación que incorporan sucesivas diferencias.

i	x_i	f_i	Δf_i	$\Delta^2 f_i$	$\Delta^3 f_i$
0	1,0	2,7182818	0,5863008	0,0932569	0,0131308
1	1,1	3,3045826	0,6795577	0,1063877	—
2	1,2	3,9841403	0,7859454	—	—
3	1,3	4,7700857	—	—	—

En el nodo inicial x_0, la derivada del polinomio de Newton hacia adelante puede escribirse, usando las diferencias disponibles, como:

$$f'(x_0) \approx (1/h)\,[\,\Delta f_0 - (1/2)\Delta^2 f_0 + (1/3)\Delta^3 f_0 - \ldots\,]$$

Esta expresión muestra la relación directa entre interpolación y derivación numérica: se interpola la información discreta y luego se deriva el polinomio aproximante.

10. Implementación básica en Scilab

Ejemplo para comparar las tres aproximaciones de la primera derivada:

```
deff('y=f(x)','y=x*exp(x)');
x = 1.1;
h = 0.1;

d_adelante = (f(x+h)-f(x))/h;
d_atras    = (f(x)-f(x-h))/h;
d_central  = (f(x+h)-f(x-h))/(2*h);

mprintf("Adelante: %f\n", d_adelante);
mprintf("Atras:    %f\n", d_atras);
mprintf("Central:  %f\n", d_central);
```

11. Síntesis

Situación	Fórmula aconsejada	Orden
Extremo Izquierdo	Progresiva de 2 puntos	O(h)
Extremo derecho	Regresiva de 2 puntos	O(h)
Punto interior	Central de 3 puntos	O(h²)
Extremo con 3 datos disponibles	Progresiva/regresiva de 3 puntos	O(h²)
Mayor precisión y datos suficientes	Central de 5 puntos	O(h⁴)

El orden de una fórmula describe cómo decrece su error de truncamiento cuando h disminuye. No debe confundirse con la cantidad de puntos utilizados ni con el orden de la derivada que se está calculando.

Criterio final. La elección de una fórmula depende de la posición del punto, de los datos disponibles, del espaciamiento h y del equilibrio entre error de truncamiento y error de redondeo.