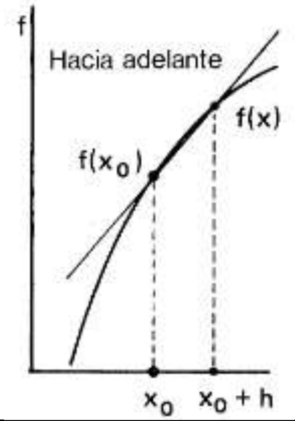
DERIVACION NUMERICA

Existen casos en los cuales es necesario obtener la derivada en un punto de una función que puede ser desconocida o de una alta complejidad (respecto del proceso de derivación). En tales casos si se posee una serie de datos generalmente obtenidos de formas experimental se puede aproximar la derivada. La aproximación de una derivada de $f(x)$ en $x = x_0$ se puede obtener mediante el gradiente de la interpolación lineal si se conocen los valores de f en $x_0 - h, x_0$ y $x_0 + h$, donde h es el tamaño del intervalo entre dos puntos consecutivos en el eje x. Este tipo de aproximaciones se denominan Aproximación por Diferencias Finitas, existiendo tres tipos de formas de aplicación.

1. Aproximación por Diferencias Finitas hacia adelante o progresiva

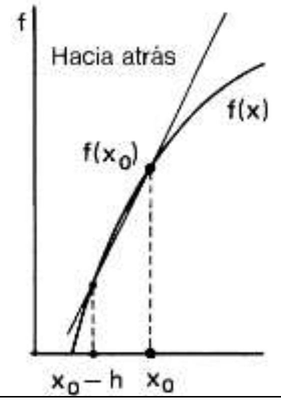


La fórmula es la siguiente

$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \quad (1)$$

La cual se recomienda para hallar la derivada cuando $(x_0, f(x_0))$ es el punto inicial de la curva.

2. Aproximación por Diferencias Finitas hacia atrás o regresiva

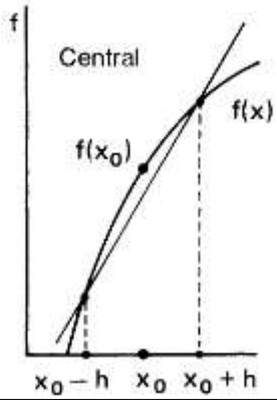


La fórmula es la siguiente

$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} \quad (2)$$

La cual se recomienda para hallar la derivada cuando $(x_0, f(x_0))$ es el punto final de la curva

3. Aproximación por Diferencias Finitas centrales



La fórmula es la siguiente

$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \quad (3)$$

La cual se recomienda para hallar la derivada cuando $(x_0, f(x_0))$ es un punto central de la curva

Enfoque por Desarrollo de Taylor

Formulas con dos nodos de un polinomio de Interpolación

Las aproximaciones por diferencias finitas expresadas en el apartado anterior no acotan el error cometido. Cuando una función se representa numéricamente en puntos discretos, ésta se aproxima mediante la interpolación. Así, se pueden obtener fórmulas de diferenciación numérica al diferenciar las fórmulas de interpolación.
Comenzaremos obteniendo fórmulas mediante el desarrollo de Taylor, ya que es equivalente a la diferenciación de una interpolación y conduce exactamente a los mismos resultados. Esto es, mediante artificios algebraicos sobre la serie de Taylor se pueden obtener fórmulas para aproximar algunas derivadas.
Si definimos la siguiente nomenclatura

$$f(x_i) = f_i$$
$$f(x_{i+1}) = f_{i+1}$$
$$f'(x_i) = f'_i$$

Entonces el desarrollo de Taylor de f_{i+1} alrededor de x_i es

$$f_{i+1} = f_i + hf'_i + \frac{h^2}{2!}f''_i + \frac{h^3}{3!}f'''_i + \cdots$$

Despejando f'_i

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} - \frac{1}{2!}hf''_i - \frac{1}{3!}hf'''_i - \cdots$$

Si se trunca después del primer término en este desarrollo se obtendrá **la aproximación por diferencias finitas hacia adelante** (1) en conjunto con su error de truncamiento. Esto se puede expresar como

$$\boxed{f'_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + O(h)}$$

Donde

$$O(h) = -\frac{1}{2}hf''_i$$

Que indica que el error es proporcional al intervalo h de la retícula, y la derivada segunda f''_i

De manera similar se puede obtener la **fórmula de diferencias finitas hacia atrás** (2); con el desarrollo de Taylor de f_{i-1} alrededor de x_i se tiene que

$$f_{i-1} = f_i - hf'_i + \frac{h^2}{2!}f''_i - \frac{h^3}{3!}f'''_i + \cdots$$

Despejando f'_i

$$\boxed{f'_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + O(h)}$$

Donde

$$O(h) = \frac{1}{2}hf''_i$$

Las aproximaciones por diferencias finitas hacia adelante y atrás de la primera derivada que se obtienen usando tres términos de la serie de Taylor se denominan fórmulas de Primer Orden pues el error de truncamiento es O(h)

Mientras que la aproximación por **diferencias finitas centrales** (3) usando f_{i+1} y f_{i-1} se puede obtener restando a

$$f_{i+1} = f_i + hf'_i + \frac{h^2}{2!}f''_i + \frac{h^3}{3!}f'''_i + \cdots$$

la serie

$$f_{i-1} = f_i - hf'_i + \frac{h^2}{2!}f''_i - \frac{h^3}{3!}f'''_i + \cdots$$

obteniéndose

$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2hf'_i + \frac{1}{3} h^3 f'''_i + \cdots$$

Donde el término f''_i se elimina de forma automática. Entonces despejando f'_i

$$\boxed{f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + O(h^2)}$$

Donde

$$O(h^2) = -\frac{1}{6} h^2 f'''_i$$

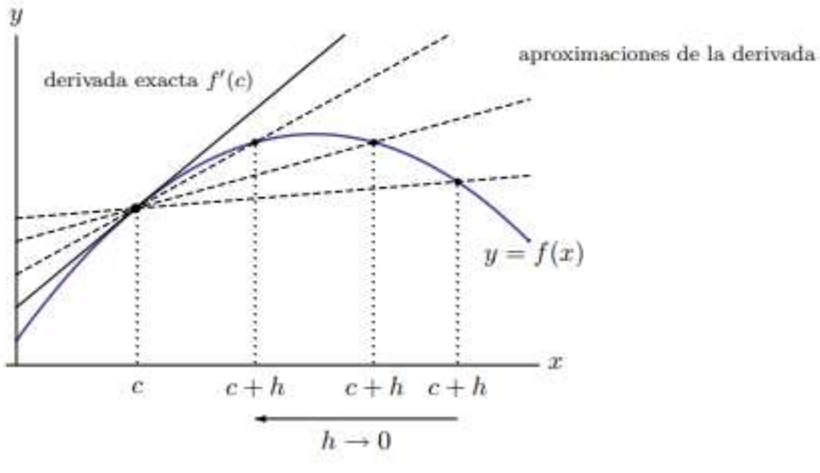
Es importante observar que, debido a la cancelación del término f'', el error de la aproximación por diferencias finitas centrales es proporcional a h^2 en vez de h. Al decrecer h, el error decrece más rápido que en las otras dos aproximaciones.

La razón por la cual esta fórmula genera un error menor radica en que usa 4 términos de la Serie de Taylor y se denomina Fórmula de Segundo Orden para hallar la derivada primera porque su error de truncamiento es $O(h^2)$

Pregunta: ¿Reducir el valor de h reducirá el error de la aproximación?

Planteo de la respuesta:

Si c es el punto del que se quiere obtener la derivada primera de una función f que se supone derivable y pudiéramos hacer que h sea cada vez más pequeño se esperaría el siguiente comportamiento:



El cual indica que si se aplica la diferencia finita progresiva con h tendiendo a cero se obtendría una mejor aproximación a la derivada exacta. Similar planteo se podría realizar para la las diferencias finitas regresiva y centrales.

Para demostrar esta suposición la función real a utilizar será $y = x\, e^x$ y se calculará $f'(1)$ el cual obtenida de manera analítica es 5,4356365918091.
Además cada vez que se actualice un nuevo valor de h esté se dividirá por 10.

El programa en Scilab que calcula el valor de la derivada usando la fórmula de diferencias finitas progresiva es el siguiente:

```
// Demostración del comportamiento del Error cunado h disminuye
//---- El siguiente programa calcula la derivada de f(x) = x*exp(x)----
//---- cuando x=1. Inicialmente lo calcula para un h=0,1 y luego se
//---- vuelve ca calcular 15 veces más disminuyendo el valor de h
//---- se busca responder si al disminuir h la aproximación es más exacta
//--- notas: 
//--- valorExacto representa el valor exacto de aplicar f'(1) se lo usará para
// -- obtener el error cometido en cada aproxiamción
//---

h=0.1;
valorExacto=5.4356365918091;
mprintf('h\t\t\t\tValorAproximado\t\tError\n');
deff('y=f(x)','y=x*exp(x)');
for i=1:15
    derivadaAproximada = (f(1+h)-f(1))/h;
    Error = abs((valorExacto - derivadaAproximada)/valorExacto)*100;
    mprintf('%12.15f\t\t%12.10f\t\t%12.10f%%\n',h,derivadaAproximada,Error);
    h=h/10;
end
```

El cual produce la siguiente salida

```
h                         ValorAproximado       Error
0.100000000000000         5.8630079788          7.8623980797%
0.010000000000000         5.4775196708          0.7705275783%
0.001000000000000         5.4406428924          0.0921014590%
0.000100000000000         5.4369714173          0.0245569307%
0.000010000000000         5.4366044314          0.0178054506%
0.000001000000000         5.4365677338          0.0171303204%
0.000000100000000         5.4365640700          0.0170629183%
0.000000010000000         5.4365636437          0.0170550751%
0.000000001000000         5.4365640878          0.0170632451%
0.000000000100000         5.4365667523          0.0171122648%
0.000000000010000         5.4365845159          0.0174390631%
0.000000000001000         5.4374282854          0.0329619827%
0.000000000000100         5.4356519286          0.0002821520%
0.000000000000010         5.4178883602          0.3265161557%
0.000000000000001         6.2172489379          14.3794076902%

-->
```

Observe que inicialmente al reducir el valor de *h* se genera una aproximación mejor, esto es coincidente con la definición de Derivada. Sin embargo en un momento dado el error empieza a incrementarse.

Disminuir el valor de *h* provoca una reducción en el error de truncamiento, pero propaga el error de redondeo, el cual depende de la máquina, por lo tanto no es posible evitarlo. El error de redondeo se genera por la imprecisión en los cálculos aritméticos o a la limitada capacidad de representación de los dispositivos de memoria para almacenamiento de números reales y por lo tanto puede crecer ilimitadamente anulando la precisión que se obtiene al reducir el error de truncamiento.

Formulas con tres nodos de un polinomio de Interpolación

Las aproximaciones por diferencias finitas obtenidas hasta ahora utilizan dos nodos del polinomio de interpolación. Para mejorar su exactitud se intentó disminuir h lo cual no asegura una mejora debido al error de redondeo. Por otro lado disminuir h no siempre es posible. Recuerde que en la mayoría de los casos usted no dispondrá de la función real sino de un conjunto de puntos.
En estos casos evidentemente es preferible usar los datos disponibles, tomando mayores términos de la Serie de Taylor y generando de esta manera fórmulas de mayor precisión.

- **Aproximación por Diferencias Finitas hacia adelante con 3 Puntos**:
  Sean $f_{i+1}\ y\ f_{i+2}$ dos funciones que se desean expresar en términos de $f_i\ \ y\ h$:
  Para f_{i+1} tenemos la formula antes expresada

$$f_{i+1} = f_i + hf'_i + \frac{h^2}{2!}f''_i + \frac{h^3}{3!}f'''_i + \cdots (4)$$

  Mientras que para f_{i+2}

$$f_{i+2} = f_i + 2hf'_i + \frac{(2h)^2}{2!}f''_i + \frac{(3h)^3}{3!}f'''_i + \cdots$$
$$f_{i+2} = f_i + 2hf'_i + 4\frac{h^2}{2!}f''_i + 8\frac{h^3}{3!}f'''_i + \cdots (5)$$

  Si multiplicamos (4) por 4 y luego al resultado le restamos (5) se eliminarán los términos de la segunda derivada

$$4f_{i+1} - f_{i+2} = 3f_i + 2hf'_i - \frac{2}{3}h^3f'''_i + \cdots$$

  De la cual se puede despejar la derivada primera

$$\boxed{f'_i = \frac{-f_{i+2} + 4f_{i-1} - 3f_i}{2h} + O(h^2)}$$

  Donde

$$O(h^2) = \frac{1}{3}h^2f'''_i$$

  Observe que el error es del mismo orden que el de la aproximación por diferencias finitas centrales para 2 términos.
- **Aproximación por Diferencias Finitas hacia atrás con 3 Puntos**:
  De forma análoga al procedimiento anteriormente descripto se puede obtener

$$\boxed{f'_i = \frac{3f_i - 4f_{i+1} + f_{i+2}}{2h} + O(h^2)}$$

  Donde

$$O(h^2) = \frac{1}{3}h^2f'''_i$$

- **Aproximación por Diferencias Finitas centrales con 3 Puntos**:
  De forma análoga al procedimiento anteriormente descripto se puede verificar que coincide con la anteriormente obtenida

$$\boxed{f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + O(h^2)}$$

  Donde

$$O(h^2) = -\frac{1}{6}h^2f'''_i$$

Fórmulas de Diferenciación con Alta exactitud

Tomando términos adicionales en la expansión de la Serie de Taylor se pueden obtener diversas fórmulas para obtener la n-sima derivada usando las diferencias finitas. Las siguientes imágenes extraídas del libro "Métodos Numéricos con Software" del Autor Shoichiro Nakamura permiten resumir varias de ellas:

Primera derivada

a) Aproximaciones por diferencias hacia adelante:

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + O(h), \qquad O(h) = -\frac{1}{2}hf''_i$$

$$f'_i = \frac{-f_{i+2} + 4f_{i+1} - 3f_i}{2h} + O(h^2), \qquad O(h^2) = \frac{1}{3}h^2 f'''_i$$

$$f'_i = \frac{2f_{i+3} - 9f_{i+2} + 18f_{i+1} - 11f_i}{6h} + O(h^3), \qquad O(h^3) = -\frac{1}{4}h^3 f''''_i$$

b) Aproximaciones por diferencias hacia atrás:

$$f'_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + O(h), \qquad O(h) = \frac{1}{2}hf''_i$$

$$f'_i = \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2h} + O(h^2), \qquad O(h^2) = \frac{1}{3}h^2 f'''_i$$

$$f'_i = \frac{11f_i - 18f_{i-1} + 9f_{i-2} - 2f_{i-3}}{6h} + O(h^3), \qquad O(h^3) = \frac{1}{4}h^3 f''''_i$$

c) Aproximación por diferencias centrales:

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + O(h^2), \qquad O(h^2) = -\frac{1}{6}h^2 f'''_i$$

$$f'_i = \frac{-f_{i+2} + 8f_{i+1} - 8f_{i-1} + f_{i-2}}{12h} + O(h^4), \qquad O(h^4) = \frac{1}{30}h^4 f^{(v)}_i$$

Segunda derivada

d) Aproximaciones por diferencias hacia adelante:

$$f''_i = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i}{h^2} + O(h), \qquad O(h) = -hf'''_i$$

$$f''_i = \frac{-f_{i+3} + 4f_{i+2} - 5f_{i+1} + 2f_i}{h^2} + O(h^2), \qquad O(h^2) = \frac{11}{12}h^2 f''''_i$$

e) Aproximaciones por diferencias hacia atrás:

$$f''_i = \frac{f_i - 2f_{i-1} + f_{i-2}}{h^2} + O(h), \qquad O(h) = hf'''_i$$

$$f''_i = \frac{2f_i - 5f_{i-1} + 4f_{i-2} - f_{i-3}}{h^2} + O(h^2), \qquad O(h^2) = \frac{11}{12}h^2 f''''_i$$

f) Aproximaciones por diferencias centrales:

$$f''_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + O(h^2), \qquad O(h^2) = -\frac{1}{12}h^2 f''''_i$$

$$f''_i = \frac{-f_{i+2} + 16f_{i+1} - 30f_i + 16f_{i-1} - f_{i-2}}{h^2} + O(h^4), \qquad O(h^4) = \frac{1}{90}h^4 f^{(vi)}_i$$

Tercera derivada

g) Aproximaciones por diferencia hacia adelante.

$$f_i''' = \frac{f_{i+3} - 3f_{i+2} + 3f_{i+1} - f_i}{h^3} + O(h), \quad O(h) = -\frac{3}{2}hf_i''''$$

h) Aproximaciones por diferencias hacia atrás:

$$f_i''' = \frac{f_i - 3f_{i-1} + 3f_{i-2} - f_{i-3}}{h^3} + O(h), \quad O(h) = \frac{3}{2}hf_i''''$$

i) Aproximación por diferencias centrales:

$$f_i''' = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + 2f_{i-1} - f_{i-2}}{2h^3} + O(h^2), \quad O(h^2) = -\frac{1}{4}h^2f_i^{(v)}$$

Ejemplo:
El ejemplo anterior estima el error cometido comparando la derivada exacta con la derivada aproximada. En general no se dispondrá de la función sino de un conjunto de puntos, por lo cual se requerirá estimar el error en los resultados de las formulas mediante las aproximaciones de diferencias finitas. Estime el error cometido al calcular la derivada primera en $x = 1,1$ cuando se posee la siguiente tabla

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

Primero se genera la tabla de diferencias finitas

i	x_i	$f(x_i)$	$\Delta f(x_i)$	$\Delta^2 f(x_i)$	$\Delta^3 f(x_i)$
0	1	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			

Aproximación hacia adelante

$$f'(x_1) \simeq \frac{f(x_1 + h) - f(x_1)}{h} = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{h} = \frac{3,9841403 - 3,3045826}{0,1} = 6,795577$$

$$O(h) = -\frac{1}{2}hf''(x_i)$$

Si recordamos la definición de los operadores de diferencias:

a) Operador de diferencias hacia adelante: Δ

$$\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$$

b) Operador de diferencias hacia atrás: ∇

$$\nabla f_i = f_i - f_{i-1}$$

c) Operador diferencial central: δ

$$\delta f_i = f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}$$

o bien

$$\delta f_{i+\frac{1}{2}} = f_{i+1} - f_i$$

donde

$$f_{i+\frac{1}{2}} = f\left(x_i + \frac{h}{2}\right).$$

Los operadores de diferencias de orden superior se pueden escribir como potencias de los operadores de diferencias anteriores: por ejemplo, Δ^n, ∇^n y δ^n son operadores de diferencias de orden n. Se pueden obtener otros operadores de diferencias de orden n al aplicar ∇ y Δ en la forma $\nabla^{n-m}\Delta^m$ donde $1 \leqslant m \leqslant n$. En el caso $n = 2$, los operadores de diferencias dan como resultado

$$\Delta^2 f_i = \Delta(f_{i+1} - f_i) = f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i$$
$$\nabla^2 f_i = \nabla(f_i - f_{i-1}) = f_i - 2f_{i-1} + f_{i-2}$$
$$\delta^2 f_i = \delta(f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}) = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}$$
$$\Delta\nabla f_i = \Delta(f_i - f_{i-1}) = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}$$
$$\nabla\Delta f_i = \nabla(f_{i+1} - f_i) = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}$$

Conviene observar que en las ecuaciones anteriores las últimas tres diferencias son idénticas. De hecho, podemos escribir la relación de identidad:

$$\delta^2 = \Delta\nabla = \nabla\Delta$$

Operando algebraicamente la definición de diferencia finita para la primera derivada en conjunto con estas definiciones de operadores de diferencias obtendremos que

$$O(h) = -\frac{1}{2}hf''_i = -\frac{1}{2}h\,\frac{\Delta^2 f(x_i)}{h^2} = -\frac{0{,}1063877}{2\,(0{,}1)} = -0{,}5319385$$

Aproximación por diferencias centrales

$$f'(x_1) \simeq \frac{f(x_1+h) - f(x_1-h)}{2h} = \frac{f(x_2) - f(x_0)}{2h} = \frac{3{,}9841403 - 2{,}7182818}{0{,}2}$$
$$= 6{,}3292925$$

Con

$$O(h^2) = -\frac{1}{6}h^2 f'''_i = -\frac{1}{6}h^2\frac{\Delta^3 f(x_i)}{h^3} = -\frac{0{,}0131308}{6(0{,}1)} = 0{,}02188467$$

Podríamos verificar la coherencia de estos datos obtenidos si se conociera la función real que generó la tabla de datos. En este caso es la función del ejemplo anterior, así que realizando algunos cambios en el programa se puede verificar:

Para diferencias hacia adelante

```
h                                ValorAproximado          Error
    0.100000                    6.795577              -0.4868281

-->
```

Observe que el error de primer orden está en el primer decimal

Para diferencias centrales

```
h                                      ValorAproximado          Error
     0.100000                    6.329292                 -0.0205437

-->
```

Observe que el error de segundo orden está en el segundo decimal
Estos errores son coincidentes con los obtenidos.

A continuación se proporciona el código del programa utilizado

```
h=0.1;
valorExacto=6.3087487;
mprintf('h\t\t\t\tValorAproximado\t\tError\n');
deff('y=f(x)','y=x*exp(x)');
for i=1:1
    //derivadaAproximada = (f(1.1+h)-f(1.1))/h;
    derivadaAproximada = (f(1.1+h)-f(1.1-h))/(2*h);
    //Error = abs((valorExacto - derivadaAproximada)/valorExacto)*100;
    Error = valorExacto - derivadaAproximada;
    mprintf('%12.6f\t\t%12.6f\t\t%12.7f\n',h,derivadaAproximada,Error);
    h=h/10;
end
```