TEMA 6: DERIVACION NUMERICA

1 INTRODUCCION

En este tema nos ocupamos de aproximar las derivadas de orden arbitrario ν en un punto cualquier α de una función f de la cual sólo conocemos sus valores en los $(n+1)$ nodos distintos $x_0, x_1, \ldots, x_n$.

Para ello, buscaremos *fórmulas de derivación* del tipo:

$$f^{(\nu}(\alpha) \simeq \sum_{i=0}^{n} A_i\, f(x_i).$$

Nos restringiremos al estudio de las fórmulas *de tipo interpolatorio polinómico*, esto es, se aproxima f por el polinomio de interpolación de Lagrange, se deriva y se evalúa en el punto:

$$f(x) \simeq \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, l_i(x) \Rightarrow$$

$$f^{(\nu}(x) \simeq \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, l_i^{(\nu}(x) \Rightarrow$$

$$f^{(\nu}(\alpha) \simeq \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, l_i^{(\nu}(\alpha).$$

Por tanto, los coeficientes de la fórmula son:

$$A_i = l_i^{(\nu}(\alpha), \quad i = 0, \ldots, n.$$

Teorema 1 .- *Una fórmula de derivación:*

$$f^{(\nu}(\alpha) \simeq \sum_{i=0}^{n} A_i\, f(x_i)$$

es de tipo interpolatorio polinómico si y sólo si es exacta en $\mathcal{P}_n(R)$.

Entonces, para el cálculo de los coeficientes A_i impondremos la exactitud de la fórmula sobre los polinomios $x^k,\ 0 \leq k \leq n,$ de la base de $\mathcal{P}_n(R)$:

$$\sum_{i=0}^{n} A_i\, x_i^k = \frac{d^\nu}{dx^\nu}(x^k)_{|x=\alpha}, \quad 0 \leq k \leq n,$$

o equivalentemente:

$$\sum_{i=0}^{n} A_i\, x_i^k = 0, \quad 0 \leq k \leq \nu - 1,$$

$$\sum_{i=0}^{n} A_i\, x_i^k = k(k-1)\ldots(k-\nu+1)\alpha^{k-\nu}, \quad \nu \leq k \leq n.$$

Este S.E.L. de $(n+1)$ ecuaciones y $(n+1)$ incógnitas con matriz de Vandermonde (por tanto, inversible) tiene solución única.

Resolviendo el sistema se obtienen los valores de los coeficientes $A_i,\ i = 0, \ldots, n.$

Ejemplo 1 .- *Partimos de la tabla de valores:*

x_i	1	2	3	4
$f(x_i)$	7	2	0	-1

Entonces, para:

$$x_0 = 1,\ x_1 = 2,\ x_2 = 3,\ x_3 = 4$$

se busca:

$$f''(\alpha) \simeq A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + A_3 f(x_3)$$
$$= 7A_0 + 2A_1 - A_3.$$

Debemos resolver el sistema:

$$\left\{ \begin{array}{lllll} A_0 & +A_1 & +A_2 & +A_3 & = 0 \\ A_0 & +2A_1 & +3A_2 & +4A_3 & = 0 \\ A_0 & +4A_1 & +9A_2 & +16A_3 & = 2 \\ A_0 & +8A_1 & +27A_2 & +64A_3 & = 6\alpha \end{array} \right.$$

Para $\alpha = 5$ *la solución es:*

$$A_0 = -2,\ A_1 = 7,\ A_2 = -8,\ A_3 = 3$$

Por tanto:

$$f''(5) \simeq 7.(-2) + 2.7 - 3 = -3.$$

Teorema 2 .- *(Fórmula para el error de derivación) Si* $f \in C^{n+1}([a,b])$, *donde* $[a,b]$ *es un intervalo que contiene los nodos* $x_0, x_1, \ldots, x_n$, *entonces se tiene que el error cometido para la primera derivada en los nodos verifica la acotación:*

$$|f'(x_i) - P_n'(x_i)| \leq \{\sup_{\zeta \in [a,b]} \frac{|f^{(n+1}(\zeta)|}{(n+1)!}\} |x_i - x_0| \ldots |x_i - x_n|$$

Observación 1 .- *Se pueden obtener también, aunque son mucho más complejas, las fórmulas de error para las derivadas de orden superior y para puntos* α *que no sean nodos.*

2 PROPIEDADES DE LAS FORMULAS DE DERIVACION DE T.I.P.

1. **Invarianza por traslaciones:**

   Si

$$f^{(\nu}(\alpha) \simeq \sum_{i=0}^{n} A_i\, f(x_i)$$

$$f^{(\nu}(\alpha + b) \simeq \sum_{i=0}^{n} B_i\, f(x_i + b)$$

   entonces $B_i = A_i, \ \ \forall i = 0, \ldots, n.$

2. **Modificación por homotecias:**

   Si

$$f^{(\nu}(\alpha) \simeq \sum_{i=0}^{n} A_i\, f(x_i)$$
$$f^{(\nu}(a\alpha) \simeq \sum_{i=0}^{n} B_i\, f(ax_i)$$

   entonces $\quad B_i = \dfrac{A_i}{a^\nu}, \quad \forall i = 0, \ldots, n.$

3. **Simetría:**

   Si los nodos están dispuestos simétricamente respecto del punto α, es decir:

$$\alpha - x_i = x_{n-i} - \alpha, \quad i = 0, \ldots, n,$$

   entonces los coeficientes de la fórmula

$$f^{(\nu}(\alpha) \simeq \sum_{i=0}^{n} A_i\, f(x_i)$$

   verifican $\quad A_i = (-1)^\nu A_{n-i}, \quad \forall i = 0, \ldots, n.$

   (Así, si n es par y ν impar, se tiene $A_{\frac{n}{2}} = 0$.)

3 FORMULAS PROGRESIVAS, REGRESIVAS Y CENTRALES

En el caso en que los nodos son equiespaciados:

$$x_j = x_0 + jh, \quad j = 0, \ldots, n,$$

se puede hablar también de los siguientes tipos de fórmulas:

1. **Progresivas:**

   A partir del desarrollo de Taylor:

   $$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \dots$$

   se deduce:

   $$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2}f''(x) + \dots \\ &= \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h). \end{aligned}$$

   Entonces, para $x = x_j$, se tiene la fórmula:

   $$f'(x_j) \simeq \frac{f(x_{j+1}) - f(x_j)}{h}.$$

2. **Regresivas:**

   A partir del desarrollo de Taylor:

   $$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \dots$$

   se deduce:

   $$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{h}{2}f''(x) + \dots \\ &= \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + O(h). \end{aligned}$$

Entonces, para $x = x_j$, se tiene la fórmula:

$$f'(x_j) \simeq \frac{f(x_j) - f(x_{j-1})}{h}.$$

3. **Centrales:**

Restando los desarrollos de Taylor:

$$f(x+h) = f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)+\frac{h^3}{6}f'''(x)+\dots$$

$$f(x-h) = f(x)-hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)-\frac{h^3}{6}f'''(x)+\dots$$

se deduce:

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}f'''(x) + \dots \\ &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2). \end{aligned}$$

Entonces, para $x = x_j$, se tiene la fórmula:

$$f'(x_j) \simeq \frac{f(x_{j+1}) - f(x_{j-1})}{2h}.$$

4 DERIVADAS DE ORDEN SUPERIOR

A partir de las fórmulas progresivas, regresivas o centrales para la aproximación de las derivadas primeras, y teniendo en cuenta que la derivada de orden ν de f es la derivada primera de la derivada de orden $(\nu - 1)$ de f, se pueden obtener fórmulas para las derivadas de orden superior.

Así, por ejemplo, si consideramos las fórmulas progresivas para la primera derivada se tiene la siguiente fórmula progresiva para la derivada segunda:

$$\begin{aligned} f''(x_j) &\simeq \frac{f'(x_{j+1}) - f'(x_j)}{h} \\ &\simeq \frac{\frac{f(x_{j+2})-f(x_{j+1})}{h} - \frac{f(x_{j+1})-f(x_j)}{h}}{h} \\ &= \frac{f(x_{j+2}) - 2f(x_{j+1}) + f(x_j)}{h^2}. \end{aligned}$$

Razonando de la misma manera se pueden obtener otras fórmulas para la derivada segunda, partiendo de las regresivas o de las centrales, o incluso combinando los distintos tipos.

Por ejemplo, considerando las fórmulas centrales se tiene:

$$\begin{aligned}
f''(x_j) &\simeq \frac{f'(x_{j+1}) - f'(x_{j-1})}{2h} \\
&\simeq \frac{\frac{f(x_{j+2})-f(x_j)}{2h} - \frac{f(x_j)-f(x_{j-2})}{2h}}{2h} \\
&= \frac{f(x_{j+2}) - 2f(x_j) + f(x_{j-2})}{4h^2}.
\end{aligned}$$

Combinando las fórmulas centrales, las progresivas y las regresivas se tiene:

$$\begin{aligned}
f''(x_j) &\simeq \frac{f'(x_{j+1}) - f'(x_{j-1})}{2h} \\
&\simeq \frac{\frac{f(x_{j+2})-f(x_{j+1})}{h} - \frac{f(x_{j-1})-f(x_{j-2})}{h}}{2h} \\
&= \frac{f(x_{j+2}) - f(x_{j+1}) - f(x_{j-1}) + f(x_{j-2})}{2h^2}.
\end{aligned}$$

Mediante este mismo proceso se pueden obtener fórmulas para las derivadas de orden tercero, cuarto, etc.