INICIACIÓN A LA INVESTIGACIÓN
REVISTA ELECTRÓNICA
UNIVERSIDAD DE JAÉN

Ini Inv, 5: a4 (2010)

Derivada generalizada de Lanczos en una discontinuidad finita

J. López-Bonilla[1], A. Rangel-Merino[1] and A. Zúñiga-Segundo[2]

[1]*ESIME-Zacatenco, Instituto Politécnico Nacional, Anexo Edif. 3, Col. Lindavista, CP 07738, México DF.*
[2]*Depto. Física-ESFM, Instituto Politécnico Nacional, Edif. 9, Col. Lindavista, CP 07738, México DF.*
jlopezb@ipn.mx

Resumen

Lanczos introdujo una expresión integral para calcular la derivada de una función, siendo ésta continua en el punto *x* bajo análisis. Aquí extendemos dicha expresión al caso de una discontinuidad finita en *x*.

Palabras clave: Derivada de Lanczos; Método de mínimos cuadrados.

AMS Subject Classification: 26A24; 33F05; 65D05.

INTRODUCCIÓN

C. Lanczos (1956, *Applied Analysis*, Dover New Jersey, Cap.5), utilizó el Método de Mínimos Cuadrados (MMC) de Gauss-Legendre para deducir una expresión integral que da la derivada de la función, es decir, derivación vía integración (Lanczos, 1956; *Applied Analysis* Dover NJ; Groetsch, 1998; *Am Math Monthly* 105:320-326; Shen, 1999; *Am Math Monthly* 106:766-768; Hicks et al., 2000; *Applied Maths and Compt* 112:63-73; Burch et al., 2005; *Mathematics Magazine* 78:368-378; Washburn, 2006; http://www.whitman.edu/mathematics/SeniorProjectArchive/2006/):

$$\mathrm{f}'_L\left(x,\varepsilon\right)=\frac{3}{2\varepsilon^3}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} t\,\mathrm{f}\left(x+t\right)dt, \tag{1}$$

para un valor de ε positivo suficientemente pequeño, y cuando éste tiende a cero entonces (1) se aproxima a la derivada ordinaria:

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\mathrm{f}'_L\left(x,\varepsilon\right)=\mathrm{f}'\left(x\right). \tag{2}$$

La relación (1) es válida cuando f(*x*) es continua en *x*, lo cual se muestra en la Sec. 2.

En la literatura no hemos encontrado, en forma explícita, la correspondiente generalización de (1) cuando f(*x*) tiene una discontinuidad finita; en la Sec. 3 se obtiene dicha generalización y (2) se reemplaza por (Groetsch, 1998; *Am Math Monthly* 105:320-326):

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\mathrm{f}'_L\left(x,\varepsilon\right)=\tfrac{1}{2}\left[\mathrm{f}'_+\left(x\right)+\mathrm{f}'_-\left(x\right)\right].$$

en donde $\mathrm{f}'_+\left(x\right)$ & $\mathrm{f}'_-\left(x\right)$ son las derivadas por la derecha y por la izquierda de $\mathrm{f}\left(x\right)$, respectivamente. Hacemos notar que (3) también es aplicable cuando en *x* no existe una discontinuidad de la función pero $f'_{+}(x) \neq f'_{-}(x)$, lo cual significa que $f(x)$ no es derivable en el sentido usual. La relación (3) nos recuerda una propiedad semejante de la serie de Fourier en un punto de discontinuidad finita (Lanczos, 1956; *Applied Analysis* Dover NJ, Cap.4):

$$\lim_{n\to\infty} f_n(x) = \tfrac{1}{2}\left[f_{+}(x) + f_{-}(x)\right]. \tag{4}$$

DERIVADA DE LANCZOS

Aquí indicaremos los principales aspectos de la construcción de (1), de utilidad en la Sec. 3 para su generalización a una función con discontinuidad finita en el punto bajo estudio.

Antes de probar (1) chequemos la validez de (2). Si f es C^3 en una vecindad de *x*, entonces la serie de Taylor aporta la expresión:

$$f(x+t) = f(x) + f'(x)t + \tfrac{1}{2}f''(x)t^2 + \frac{1}{6}f'''(x)t^3, \tag{5}$$

que al sustituir en (1) implica:

$$f'_L(x,\varepsilon) = f'(x) + \tfrac{\varepsilon^2}{10}f'''(x) = f'(x) + O(\varepsilon^2), \tag{6}$$

y así (2) es inmediata. En (6) observamos que conforme $\varepsilon\to 0$ entonces es más cercana la igualdad entre los dos tipos de derivadas.

Demos tres ejemplos para ilustrar la aplicación de (1), tomando $\varepsilon=10^{-4}$:

a) $f(x) = \tan x$, entonces $f'(1) = \sec^2 1 = 3.42551882$, (7)

y la derivada de Lanczos nos queda:

$$f'_L(1,10^{-4}) = \tfrac{3}{2}10^{12}\int_{-10^{-4}}^{10^{-4}} t\cdot\tan(1+t)\,dt = 3.42551887$$

bastante cercano a (7).

b) $f(x) = |x|$, por lo tanto $f'_{-}(0) = -1$ & $f'_{+}(0) = 1$, (8)

y de (1):

$$f'_L(0,10^{-4}) = \tfrac{3}{2}10^{12}\int_{-10^{-4}}^{10^{-4}} t\cdot|t|\,dt = 0 \overset{(8)}{=} \tfrac{1}{2}\left[f'_{+}(0) + f'_{-}(0)\right],$$

en acuerdo con (3).

c) $f(x) = \ln x$, así $f'(0.25) = 4$, (9)

tal que:

$$f(0.25,10^{-4}) = \tfrac{3}{2}10^{12}\int_{-10^{-4}}^{10^{-4}} t\cdot\ln(0.25+t)\,dt = 4.00000012,$$

comparable a (9), etc.

INICIACIÓN A LA INVESTIGACIÓN
REVISTA ELECTRÓNICA
UNIVERSIDAD DE JAÉN

Ini Inv, 5: a4 (2010)

Ahora mostremos cómo Lanczos (1956; *Applied Analysis* Dover NJ, Cap. 5), dedujo (1) mediante el celebrado MMC de Gauss-Legendre. Cornelius Lanczos deseaba calcular, por ejemplo en $x=0$, la derivada de una función empírica tabulada en datos equidistantes, entonces consideró que con 5 puntos, que supondremos próximos a una parábola, se podría ajustar a través de ellos, la curva:

$$y = a + bx + cx^2 , \qquad (10)$$

cuyos coeficientes debían obtenerse vía el MMC, y al realizar esto basta con *b* porque es claro que:

$$y'(0) = b . \qquad (11)$$

En otras palabras, $\mathrm{f}_L'(0,\varepsilon)$ es la derivada de ésta parábola cuando el número *n* de datos tiende a infinito y la separación *h* entre ellos tiende a cero, ocurriendo todo esto en la vecindad [-ε,ε], ε<<1, alrededor de $x=0$, y la función empírica se acerca a una función continua.

Al aplicar la técnica de MMC buscamos a, b, c que hagan mínimo al error cuadrático promedio $\sum_{k=-n}^{n}\left(a + bx_k + cx_k^2 - y_k\right)^2$, y así una de las ecuaciones resultantes da:

$$a\sum_{k=-n}^{n} x_k + b\sum_{k=-n}^{n} x_k^2 + c\sum_{k=-n}^{n} x_k^3 = \sum_{k=-n}^{n} x_k y_k , \qquad (12)$$

pero los x_k están distribuidos simétricamente con respecto al origen, entonces es evidente que $\sum_{k=-n}^{n} x_k = \sum_{k=-n}^{n} x_k^3 = 0$ anulando los coeficientes de *a* & *c* en (12), y al pedir que $n \to \infty$ & $h \to 0$, la relación (12) implica:

$$b\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} t^2 dt = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} t\,\mathrm{f}(t)\,dt \quad \therefore \quad b = \frac{3}{2\varepsilon^3}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} t\,\mathrm{f}(0+t)\,dt , \qquad (13)$$

y si en lugar de $\mathrm{f}_L'(0,\varepsilon)$ nos hubiéramos interesado en $\mathrm{f}_L'(x,\varepsilon)$ entonces hubiera resultado (1), q.e.d. Es importante notar la relevancia del MMC en la deducción de la fórmula de Lanczos.

DERIVADA DE LANCZOS PARA UNA FUNCIÓN DISCONTINUA

Ahora es natural preguntar cuál será la expresión para $\mathrm{f}_L'(x,\varepsilon)$ en un punto donde la función tiene una discontinuidad finita. Primero consideremos el lado izquierdo de $x=0$, en donde los datos equidistantes se ajustarán a la parábola $a_1+b_1x+c_1x^2$ vía el MMC, obteniéndose ecuaciones tipo (12):

$$
\begin{aligned}
na_1 + b_1 \sum_{k=-n}^{n} x_k + c_1 \sum_{k=-n}^{n} x_k^2 &= \sum_{k=-n}^{n} y_k, \\
a_1 \sum_{k=-n}^{n} x_k + b_1 \sum_{k=-n}^{n} x_k^2 + c_1 \sum_{k=-n}^{n} x_k^3 &= \sum_{k=-n}^{n} x_k y_k, \\
a_1 \sum_{k=-n}^{n} x_k^2 + b_1 \sum_{k=-n}^{n} x_k^3 + c_1 \sum_{k=-n}^{n} x_k^4 &= \sum_{k=-n}^{n} x_k^2 y_k,
\end{aligned}
\tag{14}
$$

recordando que la derivada de Lanczos por la izquierda está dada por:

$$ {}_{-}\mathrm{f}'_L(0,\varepsilon) = b_1, \tag{15} $$

tal que:

$$ \lim_{\varepsilon \to 0} {}_{-}\mathrm{f}'_L(0,\varepsilon) = \mathrm{f}'_{-}(0). \tag{16} $$

Cuando $n \to \infty$ y $h \to 0$ en (14) las Σ se convierten en integrales y dicho sistema adopta la forma:

$$
\begin{aligned}
a_1 - \tfrac{\varepsilon}{2} b_1 + \tfrac{\varepsilon^2}{3} c_1 &= \tfrac{1}{\varepsilon} \int_{-\varepsilon}^{0} \mathrm{f}(t)\,dt, \\
-\tfrac{1}{2} a_1 + \tfrac{\varepsilon}{3} b_1 - \tfrac{\varepsilon^2}{4} c_1 &= \tfrac{1}{\varepsilon^2} \int_{-\varepsilon}^{0} t\,\mathrm{f}(t)\,dt,. \\
\tfrac{1}{3} a_1 - \tfrac{\varepsilon}{4} b_1 + \tfrac{\varepsilon^2}{5} c_1 &= \tfrac{1}{\varepsilon^3} \int_{-\varepsilon}^{0} t^2\,\mathrm{f}(t)\,dt,
\end{aligned}
\tag{17}
$$

en donde podemos despejar b_1, que en unión de (15) implica:

$$ {}_{-}\mathrm{f}'_L(0,\varepsilon) = \tfrac{12}{\varepsilon^2} \int_{-\varepsilon}^{0} \left(3 + \tfrac{16}{\varepsilon} t + \tfrac{15}{\varepsilon^2} t^2\right) \mathrm{f}(t)\,dt, \tag{18} $$

la cual, en base a (16), se acerca a $\mathrm{f}'_{-}(0)$ cuando $\varepsilon \to 0$. Así (18) permite calcular, mediante un proceso de integración, la derivada de f(x) por la izquierda en x=0.

Similarmente, el sistema para el lado derecho de la discontinuidad en x=0 nos queda (ajustando a la parábola $a_2+b_2x+c_2x^2$):

$$
\begin{aligned}
a_2 + \tfrac{\varepsilon}{2} b_2 + \tfrac{\varepsilon^2}{3} c_2 &= \tfrac{1}{\varepsilon} \int_{0}^{\varepsilon} \mathrm{f}(t)\,dt, \\
\tfrac{1}{2} a_2 + \tfrac{\varepsilon}{3} b_2 + \tfrac{\varepsilon^2}{4} c_2 &= \tfrac{1}{\varepsilon^2} \int_{0}^{\varepsilon} t\,\mathrm{f}(t)\,dt, \\
\tfrac{1}{3} a_2 + \tfrac{\varepsilon}{4} b_2 + \tfrac{\varepsilon^2}{5} c_2 &= \tfrac{1}{\varepsilon^3} \int_{0}^{\varepsilon} t^2\,\mathrm{f}(t)\,dt,
\end{aligned}
\tag{19}
$$

obteniéndose b_2 que es la derivada de Lanczos por la derecha:

$$ {}_{+}\mathrm{f}'_L(0,\varepsilon) = \tfrac{12}{\varepsilon^2} \int_{0}^{\varepsilon} \left(-3 + \tfrac{16}{\varepsilon} t - \tfrac{15}{\varepsilon^2} t^2\right) \mathrm{f}(t)\,dt, \tag{20} $$

con la propiedad:

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\ {}_{+}\mathrm{f}'_L\left(0,\varepsilon\right)=\mathrm{f}'_+\left(0\right). \tag{21}$$

Las relaciones (18) y (20) pueden agruparse en la forma:

$${}_{\gamma}\,\mathrm{f}'_L\left(0,\varepsilon\right)=-\gamma\,\tfrac{12}{\varepsilon^2}\int_0^{\varepsilon}\left(3-\tfrac{16}{\varepsilon}u+\tfrac{15}{\varepsilon^2}u^2\right)\mathrm{f}\left(\gamma u\right)du,\quad \gamma=\pm, \tag{22}$$

y es inmediata su extensión para x arbitraria:

$${}_{\gamma}\,\mathrm{f}'_L\left(x,\varepsilon\right)=-\gamma\,\tfrac{12}{\varepsilon^2}\int_0^{\varepsilon}\left(3-\tfrac{16}{\varepsilon}u+\tfrac{15}{\varepsilon^2}u^2\right)\mathrm{f}\left(x+\gamma u\right)du,\quad \gamma=\pm, \tag{23}$$

Finalmente, de acuerdo a (3) y en analogía a la serie de Fourier, la derivada de Lanczos en x queda definida como:

$$\mathrm{f}'_L\left(x,\varepsilon\right)=\tfrac{1}{2}\left[{}_{-}\mathrm{f}'_L\left(x,\varepsilon\right)+{}_{+}\mathrm{f}'_L\left(x,\varepsilon\right)\right], \tag{24}$$

$$=\tfrac{6}{\varepsilon^2}\int_0^{\varepsilon}\left(3-\tfrac{16}{\varepsilon}u+\tfrac{15}{\varepsilon^2}u^2\right)\left[\mathrm{f}\left(x-u\right)-\mathrm{f}\left(x+u\right)\right]du, \tag{25}$$

verificándose (3).

Como ejemplo de (23-25) consideremos la función:

$$\mathrm{f}\left(x\right)=\begin{cases}\tan x, & x\le 1,\\ 2x^2, & x>1,\end{cases} \tag{26}$$

entonces, $\mathrm{f}_-\left(1\right)=1.5574\neq \mathrm{f}_+\left(1\right)=2$, además:

$$\begin{gathered}\mathrm{f}'_-\left(1\right)=\sec^2 1=3.42551882,\quad \mathrm{f}'_+\left(1\right)=4,\\ \tfrac{1}{2}\left[\mathrm{f}'_-\left(1\right)+\mathrm{f}'_+\left(1\right)\right]=3.71275941.\end{gathered} \tag{27}$$

Si elegimos $\varepsilon=10^{-4}$, de (23-26) se obtiene que:

$$\begin{gathered}{}_{-}\mathrm{f}'_L(1,\varepsilon)=3.42550001,\quad {}_{+}\mathrm{f}'_L\left(1,\varepsilon\right)=4.0010,\\ \mathrm{f}'_L\left(1,\varepsilon\right)=3.71325000.\end{gathered} \tag{28}$$

y conforme ε sea más pequeño entonces los valores (28) se acercarán más a (27).

Las relaciones (23) y (25), que no hemos localizado explícitamente en la literatura, dan las derivadas de Lanczos para una función con una discontinuidad finita. Así (1) y (2) son casos particulares de (25) y (3), respectivamente. Enfatizándose que en todas estas expresiones las derivadas son calculadas mediante el proceso de integración. Las relaciones (16) y (21) no son tan inmediatas, por ejemplo, para la función f(x) = 1, 2 & -1 para x mayor, igual y menor que cero, respectivamente, no existen $f'_-(0)$ y $f'_+(0)$, sin embargo, los miembros izquierdos de las mencionadas relaciones valen cero; situación que no se presenta en (27).