Derivació i integració numèrica

Suposarem f prou derivable.

Derivació

Donada $f(x)$, $a \in \mathbb{R}$ volem $f'(a)$. Numèricament farem 2 passos:

1. Construïm el polinomi interpolador $P_n(x)$ en els punts $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$ on $x_0, \dots, x_n$ prop d'a.
2. Fem l'aproximació $f'(a) \simeq P_n'(a)$

Exemples

- Si $n=1$, $x_0 = a$, $x_1 = a+h \Rightarrow P_1(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0)$

$$P_1'(x) = f[x_0, x_1]$$

$$\boxed{f'(a) \simeq P_1'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h}}$$ Diferència finita endavant

Veiem l'error comès:

$$f(a+h) = f(a) + f'(a)h + \frac{f''(\xi)}{2!}h^2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} - \underbrace{\frac{f''(\xi)}{2!}h}_{\text{error}}}$$

- Si $n=1$, $x_0 = a-h$, $x_1 = a$

$$\boxed{f'(a) = \frac{f(a) - f(a-h)}{h} + \frac{f''(\sigma)}{2!}h}$$

$$\left[f'(a) \approx \frac{f(a)-f(a-h)}{h} \right]$$ Diferència finita enrera

Observem que les dues aproximacions tenen un error $O(h)$.

Millorem-ho:

- Si $n=2$, $x_0 = a-h$, $x_2 = a$, $x_1 = a+h$

$$P_2(x) = f[x_0] + f[x_0,x_1](x-x_0) + f[x_0,x_1,x_2]\underbrace{(x-x_0)(x-x_1)}_{x^2-(x_0+x_1)x+x_0x_1}$$

$$P_2'(x) = f[x_0,x_1] + 2f[x_0,x_1,x_2]\left(x - \frac{x_0+x_1}{2}\right)$$

$$P_2'(a) = P'(x_2) = f[x_0,x_1]$$

Prenem $$\left[f'(a) \approx P_2'(a) = \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h} \right]$$ Diferència centrada finita

Error?

$$f(a+h) = f(a) + f'(a)h + \frac{f''(a)h^2}{2!} + \frac{f'''(\xi_1)}{3!}h^3$$

$$f(a-h) = f(a) - f'(a)h + \frac{f''(a)h^2}{2!} - \frac{f'''(\xi_2)}{3!}h^3$$

on ξ_1 entre a i $a+h$, ξ_2 entre $a-h$ i a.

$$\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h} = f'(a) + \frac{1}{2\cdot 3!}h^2\left(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)\right)$$

Ara apliquem el següent lema:

Lema

$F: I = [a,b] \longrightarrow \mathbb{R}$ contínua, $\xi_k \in I$, $\alpha_k > 0$, $k = 1 \div n$. Llavors existeix $\xi \in \tilde{I} = \langle \xi_1, \dots, \xi_n \rangle$ tal que

$$\sum_{k=1}^{n} \alpha_k F(\xi_k) = F(\xi) \sum_{k=1}^{n} \alpha_k$$

<u>Prova</u>: $m \leq F(x) \leq M \quad \forall x \in \tilde{I}$ interval tancat. on

$$m = \min_{x \in \tilde{I}} F(x), \qquad M = \max_{x \in \tilde{I}} F(x)$$

Llavors

$$m \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \leq \sum_{k=1}^{n} \alpha_k F(\xi_k) \leq M \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad m \leq \frac{\sum_{k=1}^{n} \alpha_k F(\xi_k)}{\sum_{k=1}^{n} \alpha_k} \leq M$$

$\Rightarrow$ Existeix $\xi \in \tilde{I}$ tq $\quad F(\xi) = \dfrac{\sum_{k=1}^{n} \alpha_k F(\xi_k)}{\sum_{k=1}^{n} \alpha_k}$

Pel lema amb $F = f'''$, $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ s'té

$$\left[\frac{f(a+h) - f(a-h)}{2} = f'(a) + \frac{h^2}{6} f'''(\xi) \right]$$ amb ξ entre $a-h$ i $a+h$

o també direm que l'aproximació

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$ té un error d'ordre $O(h^2)$.

NOTA. Si suposem que coneixem la f en $n+1$ nodes equiespaiats $x_i = x_0 + ih$, $i=0,\dots,n$, amb $h>0$, podem calcular $f'(x_i)$ prenent una de les fórmules prèvies amb $a = x_i$. La més usual és la diferència centrada.

Atenció. Aquesta diferència centrada no la podem prendre en els extrems x_0, x_n. En aquests nodes prenem

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{2h}\left[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)\right]$$

que s'obté a partir del polinomi interpolador de grau 2 amb x_0, $x_1 = x_0+h$, $x_2 = x_0+2h$. i també té un error d'ordre $O(h^2)$

Exercici. Comproveu-ho.

Anàlogament per a x_n:

$$f'(x_n) \approx \frac{1}{2h}\left[3f(x_n) - 4f(x_{n-1}) + f(x_{n-2})\right].$$

Exemple $f(x) = \ln x$ Calculem $f'(2)$ prenent la diferència endavant $L(h)$ i la centrada $C(h)$

- Aproximacions amb $L(h)$ i $C(h)$ per a $f'(2)$ a on $f(x) = \ln x$:

h	$L(h)$	$C(h)$
10^{-1}	0.4879016410	0.5004172925
10^{-2}	0.4987541500	0.5000041700
10^{-3}	0.4998750000	0.5000000500
10^{-4}	0.4999870000	0.5000000000
10^{-5}	0.4999900000	0.5000000000

NOTA:- Atenció amb prendre h molt petit que en $L(h)$ hi ha pèrdua de dígits al fer la diferència en el numerador.

Per exemple si treballem amb 8 dígits.

$$f'(7) \simeq \frac{\ln(7+h) - \ln(7)}{h}$$ valor exacte $\frac{1}{7} = 0{,}14285714$

- si $h = 0{,}005$: $\dfrac{1{,}9466242 - 1{,}9459101}{0{,}005} = \dfrac{0{,}0007141}{0{,}005} = 0{,}1428$

perdem 3 dígits

- si $h = 0{,}000001$: $\dfrac{1{,}9459103 - 1{,}9459101}{0{,}000001} = \dfrac{0{,}0000002}{0{,}000001} = 0{,}2$

perdem 6 dígits

Exemple $f(x) = \ln x$ Calculem $f'(2)$ prenent la diferència endavant $L(h)$ i la centrada $C(h)$

- Aproximacions amb $L(h)$ i $C(h)$ per a $f'(2)$ a on $f(x) = \ln x$:

h	$L(h)$	$C(h)$
10^{-1}	0.4879016410	0.5004172925
10^{-2}	0.4987541500	0.5000041700
10^{-3}	0.4998750000	0.5000000500
10^{-4}	0.4999870000	0.5000000000
10^{-5}	0.4999900000	0.5000000000

NOTA.— Atenció amb prendre h molt petit que en $L(h)$ hi ha pèrdua de dígits al fer la diferència en el numerador.

Per exemple si treballem amb 8 dígits.

$$f'(7) \simeq \frac{\ln(7+h) - \ln(7)}{h}$$ valor exacte $\frac{1}{7} = 0,14285714$

– Si $h = 0,005$: $\dfrac{1,9466242 - 1,9459101}{0,005} = \dfrac{0,0007141}{0,005} = 0,1428$

perdem 3 dígits

– Si $h = 0,000001$: $\dfrac{1,9459103 - 1,9459101}{0,000001} = \dfrac{0,0000002}{0,000001} = 0,2$

perdem 6 dígits

- Calculem ara una aproximació de la derivada segona $f''(a)$: procediment igual.

Prenem $n=2$, polinomi interpolador per $x_0=a-h$, $x_1=a$, $x_2=a+h$

$$P_2''(x) = 2f[x_0,x_1,x_2] = 2\frac{\frac{f(x_2)-f(x_1)}{h}-\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}}{2h} =$$

$$= \frac{f(x_2)-2f(x_1)+f(x_0)}{h^2}$$

Llavors $\left[f''(a) \approx \frac{f(a+h)-2f(a)+f(a-h)}{h^2} \right]$

Error?

$$f(a+h)=f(a)+f'(a)h+\frac{f''(a)h^2}{2!}+\frac{f'''(a)h^3}{3!}+\frac{f^{(iv)}(\xi_1)}{4!}h^4$$

$$f(a-h)=f(a)-f'(a)h+\frac{f''(a)h^2}{2!}-\frac{f'''(a)h^3}{3!}+\frac{f^{(iv)}(\xi_2)}{4!}h^4$$

amb ξ_1 entre a i $a+h$ i ξ_2 entre $a-h$ i a

Llavors

$$\frac{f(a+h)-2f(a)+f(a-h)}{h^2}=f''(a)+\frac{1}{4!}h^2\Big(\underbrace{f^{(4)}(\xi_1)+f^{(4)}(\xi_2)}_{\text{= lema } 2f^{(4)}(\xi)}\Big)$$

amb ξ entre $a-h$ i $a+h$, i és a dir

$$\left[f''(a)=\frac{f(a+h)-2f(a)+f(a-h)}{h^2}-\frac{1}{12}f^{(4)}(\xi)\,h^2 \right]$$