Apuntestema2DN.pdf

ppicky

Métodos Numéricos Ii

3º Grado en Matemáticas

Facultad de Ciencias
Universidad de Granada

Tema 2. Derivación e integración numérica.

1. Introducción.

Sea $L:\mathbb{F}\to\mathbb{R}$ un funcional real sobre un conjunto de funciones y sean $L_i:\mathbb{F}\to\mathbb{R}\quad i=0,1,\ldots,n$ funcionales dados conocidos.

Definición 2.1 (Fórmula general).

*Llamamos **Fórmula Numérica** para aproximar el valor $L(f)$ a una expresión del tipo:*

$$\sum_{i=0}^{n}\alpha_i L_i(f)\quad con\ \ \alpha_i\in\mathbb{R} \tag{2.1}$$

De modo que, $L(f)=\sum_{i=0}^{n}\alpha_i L_i(f)+R(f)$ donde $R(f)$ representa el error de la fórmula.

Como casos particulares de nuestro interés están las fórmulas de **Derivación e Integración Numéricas** (D.N. e I.N.).

1.1. Casos particulares: D.N. e I.N.

Una fórmula de D.N. para calcular la derivada primera en un punto "a" de $f(x)$ conocidos los valores de ésta en puntos $x_0,x_1,\ldots,x_n$ es del tipo:

$$f'(a)\approx\sum_{i=0}^{n}\alpha_i f(x_i)$$

Aquí, $L(f)=f'(a)$ y los funcionales $L_i(f)=f(x_i)\quad i=0,1,\ldots,n$.

De forma similar al caso de D.N. si se conocen los valores de $f(x)$ en $x_0,x_1,\ldots,x_n$, entonces una fórmula de I.N. clásica tiene la forma:

$$\int_a^b f(x)\,dx\approx\sum_{i=0}^{n}\alpha_i f(x_i)$$

(ahora, el funcional es $L(f)=\int_a^b f(x)\,dx$ y $L_i(f)=f(x_i)\quad i=0,1,\ldots,n$).

Otro caso habitual de I.N. es cuando usamos valores de la función y su derivada en nodos dados; a saber,

$$\int_a^b f(x)\,dx\approx\sum_{i=0}^{n}\left(\alpha_i f(x_i)+\beta_i f'(x_i)\right)$$

1.2. Fórmulas numéricas de tipo interpolatorio.

¿Cómo se obtienen fórmulas particulares que tengan propiedades de interés?

Una respuesta es utilizar criterios de interpolación, exactitud en cierto espacio de funciones elementales, etc. Así, respecto del primer criterio, se tiene:

Definición 2.1 (tipo interpolatorio)

Sea $\mathbf{V} \subset \mathbb{F}$ un espacio vectorial real con $\dim(\mathbf{V}) = n+1$ y $p \in \mathbf{V}$ el interpolante único de $f \in \mathbb{F}$; es decir, $L_i(p) = L_i(f)$ $i = 0,1,\ldots,n$. Entonces,

- *La fórmula (2.1) es de tipo interpolatorio si, y sólo si, $\sum_{i=0}^{n} \alpha_i L_i(f) \equiv L(p)$; es decir,*

$$L(f) \approx L(p) \quad o \quad L(f) = L(p) + R(f) \tag{2.2}$$

- *Además, si $\mathbf{V} = \mathbb{P}_n$ diremos que la fórmula (2.2) es de tipo interpolatorio clásico.*

Además, usando la fórmula de interpolación de Lagrange, los escalares α_i de la fórmula se pueden obtener como:

$$\alpha_i = L(\phi_i) \quad i = 0,1,\ldots,n$$

donde ϕ_i $i = 0,1,\ldots,n$ forman la base de Lagrange asociada a los funcionales lineales $\left\{L_j\right\}_{j=0}^{n}$; es decir, se cumple:

$$L_j(\phi_i) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & si\ j = i \\ 0 & si\ j \neq i \end{cases}$$

En particular, si $\mathbf{V} = \mathbb{P}_n$, usaremos la notación clásica $\phi_i = l_i(x)$ (polinomios de Lagrange).

1.3. Exactitud y precisión de fórmulas numéricas.

Definición 2.2

Diremos que la fórmula (2.1):

- *es **exacta** para $\varphi \in \mathbb{F}$ si, y sólo si, $R(\varphi) = 0$.*
- *tiene **grado de exactitud/precisión m** si, y sólo si, es exacta para $\{1,x,\ldots,x^m\}$ y $R(x^{m+1}) \neq 0$.*

Teorema 2.3 (Caracterización)

*Una fórmula (2.1) es de tipo interpolatorio clásico si, y sólo si, tiene grado de exactitud al menos **n** (la fórmula es exacta en $\mathbb{P}_n$)*

En (2.2) es sencillo obtener una expresión de $R(f)$ a partir del error de interpolación.

Así, si $E_I(f) = f - p$ es el error de interpolación, entonces:

$$R(f) = L(f) - L(p) \underset{\substack{\uparrow \\ \text{por la linealidad}}}{=} L(f-p) = L\left(E_I(f)\right)$$

es decir, obtener el error de la fórmula equivale a calcular el valor del operador L aplicado al error de interpolación ($R(f) = L\left(E_I(f)\right)$).

2. Derivación numérica. Error.

Supongamos que deseamos obtener una fórmula de D.N. de tipo interpolatorio clásico para $L(f) = f'(a)$; entonces, ésta será de la forma:

$$\boxed{f'(a) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i) + R(f)} \tag{2.3}$$

donde los coeficientes de la fórmula se pueden obtener como sigue:

Métodos de obtención.

1. Si $l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}$ son polinomios de Lagrange para los nodos $\{x_i\}$; entonces:

$$\boxed{\alpha_i = l_i'(a)}$$

2. Mediante exactitud para $\{1,x,\ldots,x^n\}$; entonces, los coeficientes α_i son la solución del sistema lineal $(n+1)\times(n+1)$:

$$\boxed{\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ na^{n-1} \end{pmatrix}}$$

cuya solución existe y es única si los nodos usados son distintos.

3. Usando desarrollos de Taylor; a saber, en cada nodo la función se puede escribir como:

$$f(x_i) = f(a) + f'(a)h_i + \cdots + f^{k)}(a)\frac{h_i^k}{k!} + \cdots + f^{m)}(\mu_i)\frac{h_i^m}{m!}$$

donde $h_i = x_i - a$. Así, para conseguir los coeficientes de la fórmula basta obtener la suma indicada en (2.3) e imponer que sean cero los términos que corresponden a derivadas sucesivas salvo la de primer orden que se iguala a 1 (hasta conseguir un sistema lineal de orden $(n+1)\times(n+1)$).

Ejercicio.- Si deseamos una fórmula de derivación numérica para $f^{k)}(a)$, ¿cómo se puede hacer?

2.1. Error de la fórmula mediante Newton.

Si $p_n(x)$ es el interpolante de $f(x)$ en $\{x_0,x_1,\ldots,x_n\}$ entonces:

$$E_I(f,x) = f(x) - p_n(x) = f[x_0,x_1,\ldots,x_n,x]\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$$

Por lo tanto, para funciones suficientemente derivables, se puede obtener la expresión de error, para la fórmula (2.3), siguiente:

$$\boxed{R(f)=E_l'(f)_{|x=a}=\frac{f^{n+2)}(\mu_1)}{(n+2)!}\Pi(a)+\frac{f^{n+1)}(\mu_2)}{(n+1)!}\Pi'(a)} \qquad (2.4)$$

donde $\Pi(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$ y $\min\{x_0,\dots,x_n,a\}\le\mu_i\le\max\{x_0,\dots,x_n,a\}$.

2.2. Algunas fórmulas habituales.

Fórmulas con dos nodos (x_0, x_1):

$$\boxed{f'(a)\approx f[x_0,x_1]=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}=-\frac{1}{x_1-x_0}f(x_0)+\frac{1}{x_1-x_0}f(x_1)}$$

con error $R(f)=\frac{f^{3)}(\mu_1)}{3!}(a-x_0)(a-x_1)+\frac{f^{2)}(\mu_2)}{2}(2a-x_0-x_1)$.

Como casos particulares de interés se tienen las fórmulas con término de error siguientes:

- **Fórmula de diferencia progresiva ($a, a+h$):**

$$f'(a)=\frac{f(a+h)-f(a)}{h}+R(f) \quad \text{con } R(f)=-\frac{f''(\mu)}{2}h$$

- **Fórmula de diferencia regresiva ($a, a-h$):**

$$f'(a)=\frac{f(a)-f(a-h)}{h}+R(f) \quad \text{con } R(f)=\frac{f''(\mu)}{2}h$$

- **Fórmula de diferencia centrada ($a+h, a-h$):**

$$f'(a)=\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}+R(f) \quad \text{con } R(f)=-\frac{f'''(\mu)}{6}h^2$$

- **Fórmula centrada para $f''(a)$ con tres nodos ($a-h, a, a+h$):**

$$f''(a)=\frac{f(a-h)-2f(a)+f(a+h)}{h^2}+R(f) \quad \text{donde } R(f)=-\frac{f^{iv)}(\mu)}{12}h^2$$

2.3. Errores y condicionamiento en la derivación numérica.

Si bien, en las fórmulas descritas anteriormente, $R(f)\xrightarrow{h\to 0}0$, ¿qué puede ocurrir, en la práctica?

Por ejemplo, para la fórmula centrada de dos nodos,

$$\boxed{f'(a)=\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}-\frac{f'''(\mu)}{6}h^2} \qquad (2.5)$$

Supongamos que en cada evaluación de $f(x)$ se comete un error de redondeo acotado, en valor absoluto, por la cantidad fija ε; es decir, si notamos al valor calculado por $f_c(x)$:

$$f_c(a+h)=f(a+h)+\delta_h;\ f_c(a-h)=f(a-h)+\delta_{-h} \quad \text{con } |\delta_h|,|\delta_{-h}|\le\varepsilon$$

entonces, al evaluar la fórmula (2.5) para un $h>0$ tendremos:

$$\left|f'(a)-\frac{f_c(a+h)-f_c(a-h)}{2h}\right|\le\left|\frac{f'''(\mu)}{6}h^2\right|+\frac{\varepsilon}{h}\underset{si\ |f'''(x)|\le M}{\le}\frac{M}{6}h^2+\frac{\varepsilon}{h}$$

Así, en la práctica, el término de error de la fórmula puede verse afectado de forma significativa cuando h es próximo a cero debido al término ε/h.

Para precisar este comentario, hagamos la función $g(h)=\frac{M}{6}h^2+\frac{\varepsilon}{h}$ mínima. El valor mínimo se consigue para $h_*=\sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{M}}$ dando un valor mínimo para la cota: $g(h)=\frac{1}{2}\sqrt[3]{9\varepsilon^2 M}$.

Este cálculo nos dice que no es conveniente una elección de h mucho menor que el obtenido.

Por ejemplo, si tomamos $M=10$, $\varepsilon=0.01$, la gráfica de $g(h)$ es:

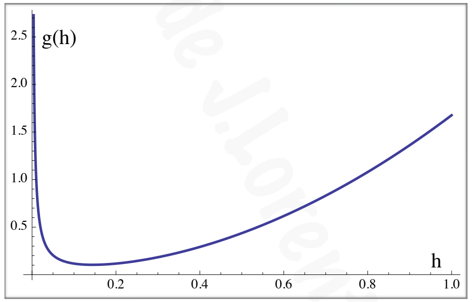

Figura 1: relación h frente a cota de error $g(h)$.

En esta gráfica podemos observar que a medida que nos acercamos con h a cero, por la izquierda del valor $h_*=0.1442$, la cota se hace más y más grande por lo que puede suceder que la fórmula no proporcione el resultado esperado. Así, lo aconsejable es no tomar valores de h por debajo de ese valor crítico h_*.