TEMA 2

Derivación e integración numérica.

Versión 24/3/2021

Índice

1. Introducción

La derivada $f'(a)$ de una función en un punto es un valor límite, si existe, de un cociente incremental. Una vía usual para conseguir $f'(a)$ consiste en obtener la expresión de la función derivada $f'(x)$ mediante las bien conocidas *reglas de derivación* y después evaluarla en el punto a.

Para calcular el valor de la integral definida $\int_a^b f(x)\,dx$ de una función en un intervalo se suele utilizar la *regla de Barrow*, consistente en hallar en primer lugar la expresión de una *primitiva* de f, esto es, una función cuya derivada sea f, y después evaluarla en los extremos del intervalo. La integral será la diferencia de ambos resultados.

Estos dos problemas son de gran importancia práctica, pero no siempre se pueden resolver en la forma tradicional descrita. Existen múltiples razones para buscar vías alternativas de cálculo de $f'(a)$ o de $\int_a^b f(x)\,dx$. Se citan algunas.

- No se conoce la expresión analítica de $f(x)$, sino tan solo unos cuantos datos y propiedades. En suma, puede ser que se sepa por el contexto del problema que $f(x)$ existe y es derivable o integrable, se conozca su dominio, y se conozca su valor u otros datos en ciertos puntos, o incluso sea posible evaluarla donde se desee, pero a modo de "caja negra", sin posibilidad de tener la fórmula que la define.

- Aún cuando se conozca la expresión de $f(x)$, si sólo se desea calcular $f'(a)$ o $\int_a^b f(x)\,dx$ puede ser un esfuerzo desproporcionado obtener la función derivada o la primitiva para simplemente evaluarla en uno o dos puntos nada más. Piénsese en lo que supone derivar una función cuya expresión es complicada, conteniendo raíces, fracciones y productos, todos ellos elementos que crecen en complejidad al aplicar reglas de derivación. O también el esfuerzo que, en general, supone hallar la integral indefinida, esto es, la primitiva de una función. Además, el problema de la integración analítica es inverso al de la derivación y no siempre es viable. Existen muchas funciones (ej. e^{x^2}) perfectamente integrables, pero cuya primitiva no es expresable en términos analíticos. Dicho en otras palabras, fallan todas las técnicas clásicas para la obtención de primitiva. En la vida real, en la investigación, en la ingeniería, en la industria, en el laboratorio, es lo que suele pasar.

En este tema se abordan ambos problemas de forma unificada como un solo problema, dado que tanto $f'(a)$ como $\int_a^b f(x)\,dx$ son, como veremos, *funcionales o formas lineales.* El objetivo es calcular una aproximación numérica lo más precisa posible, utilizando para ello los datos o información disponible acerca de f, usualmente una tabla de valores sueltos, aunque no necesariamente.

Sea $\mathbb{F}$ un espacio de funciones reales de variable real $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

Definición 1 (*Funcional o forma lineal*)

Un funcional o forma lineal *L sobre $\mathbb{F}$ es una aplicación $L : \mathbb{F} \to \mathbb{R}$ verificando*

$$L(\alpha f + \beta g) = \alpha L(f) + \beta L(g) \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R} \quad \forall f, g \in \mathbb{F}.$$

Ejemplos de formas lineales (Compruébense todas)

- Algunas de uso común pueden ser

$$\begin{aligned} L_1(f) &= \int_0^1 f(x)\,dx \\ L_2(f) &= f(7) \\ L_3(f) &= f'(-2) \end{aligned}$$

- En las integrales puede insertarse una *función peso* no negativa, que se puede anular en un conjunto de puntos finito o a lo sumo de medida nula dentro del intervalo de integración

$$\begin{aligned} L_4(f) &= \int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1+x^2}}\,dx \\ L_5(f) &= \int_{-2}^2 |x| f(x)\,dx \end{aligned}$$

- Pero también pueden darse formas lineales poco usuales

$$
\begin{aligned}
L_6(f) &= 3f'''(0) \\
L_7(f) &= \int_1^3 (f(x^2) + 2f''(x))\, dx \\
L_8(f) &= f(4) - 2f'(4) + 3f''(2) + \pi \int_{-1}^1 f(x)\, dx
\end{aligned}
$$

Ejemplos de funcionales que NO son formas lineales. Los funcionales de esta lista no son formas lineales. Compruébese.

$$
\begin{aligned}
L_1(f) &= \int_0^1 f^2(x)\, dx; \\
L_2(f) &= \sqrt{f(7)}; \\
L_3(f) &= f(2)f'(-2); \\
L_4(f) &= \int_1^3 (f(x^2) + 2f''(x))^2\, dx; \\
L_5(f) &= f(4) - 2f'(4) + 3f''(2) + \pi \int_{-1}^1 f(x)\, dx + 2.
\end{aligned}
$$

Tal como se ha dicho anteriormente, el problema es el de obtener un valor aproximado de una forma lineal de f que llamaremos *objetivo* (su derivada en un punto o su integral definida en un intervalo) a partir de los datos disponibles, que también son formas lineales (típicamente valor de f en puntos). Conviene formalizar este aspecto.

Sea $L : \mathbb{F} \to \mathbb{R}$ una forma lineal real (objetivo) definida sobre $\mathbb{F}$.

Definición 2 (*Fórmula numérica*)

Dadas las formas lineales $L_i : \mathbb{F} \to \mathbb{R}$, $i = 0, \dots, n$, una $\boxed{\text{fórmula numérica}}$ *para aproximar el valor $L(f)$ es*

$$L(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i L_i(f) + R(f),\ \ \alpha_i \in \mathbb{R},\ \ f : \mathbb{R} \to \mathbb{R} \tag{1}$$

donde $R(f)$ representa el $\boxed{\text{término de error}}$ *de la fórmula. También se puede representar omitiendo el término de error como*

$$L(f) \approx \sum_{i=0}^{n} \alpha_i L_i(f),\ \ \alpha_i \in \mathbb{R},\ \ f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}.$$

Los coeficientes α_i se denominan $\boxed{\text{pesos}}$ *de la fórmula.*

Fórmula numérica						
$L(f)$	$=$	$\sum_{i=0}^{n}$	α_i	$L_i(f)$	$+$	$R(f)$
objetivo			pesos	datos		error

1.1. Casos particulares

- Para calcular aproximadamente la primera derivada de una función en un punto:

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

  en cuyo caso tendríamos $L(f) = f'(a)$ y $L_i(f) = f(x_i),\ i = 0, \dots, n$. A los puntos x_i se les denomina $\boxed{\textit{nodos}}$ de la fórmula. Un ejemplo: calcular $f'(2)$ conociendo $f(0)$, $f(1)$, $f(2)$ y $f(3)$.

- Para calcular aproximadamente la integral definida en un intervalo:

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

  donde ahora sería $L(f) = \displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$ y $L_i(f) = f(x_i),\ i = 0, \dots, n$. Un ejemplo: calcular aproximadamente $\int_0^2 e^{x^2} dx$ evaluando la función integrando en $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$.

- Pero también pueden darse otros casos:
  - Para la derivada segunda
  $$f''(a) \approx \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i),$$
  - Para la integral con datos tipo Hermite clásico
  $$\int_a^b f(x)\, dx \approx \sum_{i=0}^{n} (\alpha_i f(x_i) + \beta_i f'(x_i)),$$
  - Un caso (poco usual) donde el objetivo es una combinación
  $$\int_a^b f(x)\, dx + 3f(c) \approx \sum_{i=0}^{n} (\alpha_i f(x_i) + \beta_i f''(x_i)),$$
  - Y otro caso, aún más inusual pero igualmente factible, con un auténtico *cóctel* datos
  $$f'''(5) \approx \alpha_0 f(-1) + \alpha_1 f'(5) + \alpha_2 \int_1^4 f(x)\, dx + \alpha_3 f''(0).$$

La vía más empleada, y matemáticamente tratable, de resolver el problema de derivación e integración numérica es por medio de una función p que coincida con f en los datos disponibles, en la hipótesis de que p será una aproximación de f, y de este modo la derivada o integral de p también lo será del correspondiente funcional de f. Así, desde el momento en que se menciona que p coincida con f en ciertos datos estamos hablando de *interpolación*. Conviene recordar el problema.

Sea $V \subseteq \mathbb{F}$ un subespacio de dimensión finita $\dim V = n + 1$. Sean $L_i : \mathbb{F} \to \mathbb{R}$, $i = 0, 1, \ldots, n$ formas lineales conocidas. Lo más típico es que las formas lineales L_i correspondan a datos de tipo lagrangiano, $L_i(f) = f(x_i)$, aunque también es frecuente una derivada, $L_i(f) = f'(x_i)$ (datos de tipo Hermite).

Definición 3 (*Problema general de interpolación*)

Dadas las formas lineales $L_i : \mathbb{F} \to \mathbb{R}$, $i = 0, \ldots, n$ y dada $f \in \mathbb{F}$, encontrar el $\boxed{\text{interpolante}}$ *$p \in V$ que verifique $L_i(p) = L_i(f)$, $i = 0, \ldots, n$. En caso de existir solución p, el* $\boxed{\text{error de interpolación}}$ *es la función $E(x) = f(x) - p(x)$.*

Se recomienda repasar el tema de interpolación de la asignatura Métodos Numéricos I, en particular las fórmulas de Lagrange y Newton y el estudio del error de interpolación.

Seguidamente se formula la teoría para fórmulas de derivación e integración numérica obtenidas por la citada vía de interpolación.

1.2. Fórmulas numéricas de tipo interpolatorio

Definición 4 (*Tipo interpolatorio*)

Diremos que la fórmula (1) es $\boxed{\text{de tipo interpolatorio}}$ *si $\sum_{i=0}^{n} \alpha_i L_i(f) = L(p)$, es decir, $L(f) = L(p) + R(f)$ donde p es el interpolante de f para los datos $L_i(f)$. Como consecuencia se tendrá $R(f) = L(E)$. Si además $V = \mathbb{P}_n$, diremos que la fórmula es* $\boxed{\text{de tipo interpolatorio clásico}}$.

Usando la fórmula de Lagrange para el interpolante, los escalares α_i pueden obtenerse como $\alpha_i = L(\ell_i)$, $i = 0, \ldots, n$, donde ℓ_i es el i-ésimo elemento de la base de Lagrange, con la propiedad

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

1.3. Exactitud y precisión de fórmulas numéricas

Definición 5 (*Exactitud*)

Diremos que la fórmula (1) es $\boxed{\text{exacta}}$ *para $f \in \mathbb{F}$ cuando $R(f) = 0$. En espacios de polinomios, diremos que tiene* $\boxed{\text{grado } m \text{ de exactitud}}$ *si y solo si es exacta para $\{1, x, \ldots, x^m\}$ y $R(x^{m+1}) \neq 0$.*

Observación. Ser exacta en una base $\{1, x, \ldots, x^m\}$ de $\mathbb{P}_m$ equivale a serlo en todo el espacio $\mathbb{P}_m$.

Teorema 1 (*Caracterización*)

La fórmula (1) es de tipo interpolatorio clásico $\Leftrightarrow$ tiene grado de exactitud al menos n, es decir, es exacta en $\mathbb{P}_n$.

Demostración.

$\Rightarrow$ Si $f \in \mathbb{P}_n$ entonces su interpolante es ella misma, $f \equiv p$, luego $L(f) = L(p)$ y por tanto $R(f) = 0$ lo que significa que (1) es exacta en $\mathbb{P}_n$.

$\Leftarrow$ Sea p el interpolante de f en $\mathbb{P}_n$. Entonces $p(x_i) = f(x_i)$, es decir, $L_i(p) = L_i(f)$ $i = 0, \ldots, n$. Si la fórmula (1) es exacta en $\mathbb{P}_n$ lo será para p y por tanto $L(f) = \displaystyle\sum_{i=0}^{n} \alpha_i L_i(f) + R(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i L_i(p) + R(f) = L(p) + R(f)$.

$\square$

2. Derivación numérica

Un problema clásico es el de obtener una fórmula de derivación numérica de tipo interpolatorio clásico para $L(f) = f'(a)$, que será de la forma

$$f'(a) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i) + R(f) \tag{2}$$

o, para derivadas de orden superior,

$$f^{(k)}(a) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i) + R(f). \tag{3}$$

Métodos de obtención de los coeficientes

1. Derivando los polinomios fundamentales de Lagrange: si $\ell_i(x) = \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$ son los polinomios de Lagrange para los nodos dados $x_0, x_1, \ldots, x_n$, entonces $\alpha_i = \ell_i'(a)$, $i = 0, \ldots, n$. Ejemplo: para $f'(0) = \alpha_0 f(0) + \alpha_1 f(2) + R(f)$ los polinomios de Lagrange para los nodos $x_0 = 0$, $x_1 = 1$ son

$$\ell_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = 1 - \frac{x}{2}, \quad \ell_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x}{2},$$

luego $\alpha_0 = \ell_0'(0) = -\frac{1}{2}$ y $\alpha_1 = \ell_1'(0) = \frac{1}{2}$ y la fórmula es

$$f'(0) \approx \frac{f(2) - f(0)}{2}.$$

2. Imponiendo exactitud para $\{1, x, \ldots, x^n\}$: los coeficientes α_i son la solución del sistema de ecuaciones lineales $(n+1) \times (n+1)$

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

cuya matriz de coeficientes es de Vandermonde, y por tanto la solución existe y es única $\Leftrightarrow$ los nodos usados son distintos entre sí.

3. Combinando desarrollos de Taylor de f en cada nodo alrededor de a:

$$\begin{array}{rl}
\alpha_0 \times [f(x_0) = f(a) + f'(a)h_0 + \cdots + f^{(k)}(a)\frac{h_0^k}{k!} + \cdots + f^{(m)}(\mu_0)\frac{h_0^m}{m!}] \\
\alpha_1 \times [f(x_1) = f(a) + f'(a)h_1 + \cdots + f^{(k)}(a)\frac{h_1^k}{k!} + \cdots + f^{(m)}(\mu_1)\frac{h_1^m}{m!}] \\
\vdots \\
\alpha_i \times [f(x_i) = f(a) + f'(a)h_i + \cdots + f^{(k)}(a)\frac{h_i^k}{k!} + \cdots + f^{(m)}(\mu_i)\frac{h_i^m}{m!}] \\
\vdots \\
\alpha_n \times [f(x_n) = f(a) + f'(a)h_n + \cdots + f^{(k)}(a)\frac{h_n^k}{k!} + \cdots + f^{(m)}(\mu_n)\frac{h_n^m}{m!}] \\
\hline
\sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) = \quad 0 \quad + \quad 0 \quad + \cdots + \quad f^{(k)}(a) \quad + \cdots - R(f)
\end{array}$$

donde $h_i = x_i - a$ y $m > n$. Para conseguir los coeficientes de la fórmula (2) o (3) se plantea la suma $\displaystyle\sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i)$ y se impone que en dicha suma se anulen todos los términos del miembro derecho excepto el de la derivada objetivo y el del error, formando un sistema $(n+1) \times (n+1)$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ h_0 & h_1 & \cdots & h_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_0^k & h_1^k & \cdots & h_n^k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_0^n & h_1^n & \cdots & h_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ k! \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

2.1. Error en una fórmula de derivación de tipo interpolatorio clásico

Si $p(x)$ es el interpolante de $f(x)$ en $\{x_0, \ldots, x_n\}$ entonces por la fórmula de Newton para el polinomio de interpolación se tiene

$$E(x) = f(x) - p(x) = f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x]\Pi(x)$$

donde $f[\cdots]$ representa la diferencia dividida de f y $\Pi(x) = \displaystyle\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$. Si f es suficientemente derivable, se puede obtener una expresión del error de (2) como

$$R(f) = E'(a) = \frac{f^{(n+2)}(\mu_1)}{(n+2)!}\Pi(a) + \frac{f^{(n+1)}(\mu_2)}{(n+1)!}\Pi'(a)$$

con $\min\{x_0, \ldots, x_n, a\} \leq \mu_i \leq \max\{x_0, \ldots, x_n, a\}$, $i = 1, 2$. Esto se debe a que la derivada de $f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x]$ es $f[x_0, x_1, \ldots, x, x]$ y a que una diferencia dividida de f con $m + 1$ nodos equivale a $\frac{f^{(m)}(\mu)}{m!}$.

En frecuentes ocasiones esta expresión se puede simplificar. Por ejemplo si a es uno de los nodos, entonces desaparece el primero de los dos sumandos. En caso contrario, si la distribución de nodos es simétrica respecto de a, entonces el polinomio $\Pi(x)$ es de grado par y simétrico respecto de a, por lo que desaparece el segundo de los sumandos (¿por qué?), con lo que la fórmula gana un grado de exactitud adicional.

Ejercicio: ¿Por qué no se pueden dar ambas circunstancias a la vez, haciendo que $R(f) = 0$?

Ejercicio: No es necesario que los nodos se distribuyan simétricamente alrededor de a para ganar un grado extra de exactitud. Busque un caso de (2) en el que desaparezca el segundo sumando sin que los nodos sean simétricos respecto de a.

2.2. Algunas fórmulas habituales

- Fórmula general con dos nodos

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

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

- Fórmula de $\boxed{\text{diferencia progresiva}}$ $(a, a + h)$ (exacta en $\mathbb{P}_1$)

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

- Fórmula de $\boxed{\text{diferencia regresiva}}$ $(a, a - h)$ (exacta en $\mathbb{P}_1$)

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

- Fórmula de $\boxed{\text{diferencia centrada}}$ $(a-h, a+h)$ (¡exacta en $\mathbb{P}_2$!)

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} - \frac{f'''(\mu)}{6}h^2 \tag{4}$$

- Fórmula centrada con tres nodos $(a-h, a, a+h)$ (¡la misma de antes!)

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} - \frac{f'''(\mu)}{6}h^2 \tag{5}$$

- Para $f''(a)$ con tres nodos $(a-h, a, a+h)$ (¡exacta en $\mathbb{P}_3$!)

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

Ejercicio: Comprobar todo.

Se observan grados de exactitud extra en los casos de nodos simétricos.

Teorema 2 (*Limitación del grado de exactitud*)

Ninguna fórmula (3) puede ser exacta en $\mathbb{P}_{n+k+1}$.

Demostración. Si lo fuera, lo sería para $\Pi(x), x\Pi(x), \ldots, x^k\Pi(x)$. De aquí se deduce que $\Pi^{(k)}(a) = \Pi^{(k-1)}(a) = \cdots = \Pi(a) = 0$, por lo que a tendría que ser raíz múltiple de $\Pi(x)$. $\square$

Como consecuencia, una fórmula (3) sólo puede aumentar k grados adicionales de exactitud, y en particular una fórmula (2) sólo puede aumentar un grado de exactitud.

2.3. Error total en la derivación numérica

Si bien teóricamente $R(f) \to 0$ cuando $h \to 0$ en las fórmulas anteriores, en la práctica no sucede así. Por ejemplo, en la fórmula centrada (4), supongamos que por efecto del redondeo se comete en cada evaluación de $f(x)$ un error acotado en valor absoluto por una cierta constante ε. En otras palabras, en lugar de trabajar con valores exactos $f(x)$ se trabaja con valores calculados $f_c(x)$ de forma que $|f(x) - f_c(x)| \leq \varepsilon$. Así,

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

Entonces, al evaluar la fórmula (4) y suponiendo $f'''(x) \leq M$, tendremos

$$\left| f'(a) - \frac{f_c(a+h) - f_c(a-h)}{2h} \right| \leq \left| \frac{f'''(\mu)}{6} h^2 \right| + \frac{2\varepsilon}{2h} \leq \frac{M}{6} h^2 + \frac{\varepsilon}{h},$$

con lo que el término de error podría aumentar significativamente cuando $h \to 0$ por causa del segundo sumando $\dfrac{\varepsilon}{h}$.

La Figura 1 ilustra esto con una gráfica de la función cota de error $g(x) = \dfrac{M}{6} h^2 + \dfrac{\varepsilon}{h}$. El valor mínimo se alcanza en $h^* = \sqrt[3]{\dfrac{3\varepsilon}{M}}$ y vale $g(h^*) = \dfrac{1}{2}\sqrt[3]{9\varepsilon^2 M}$.

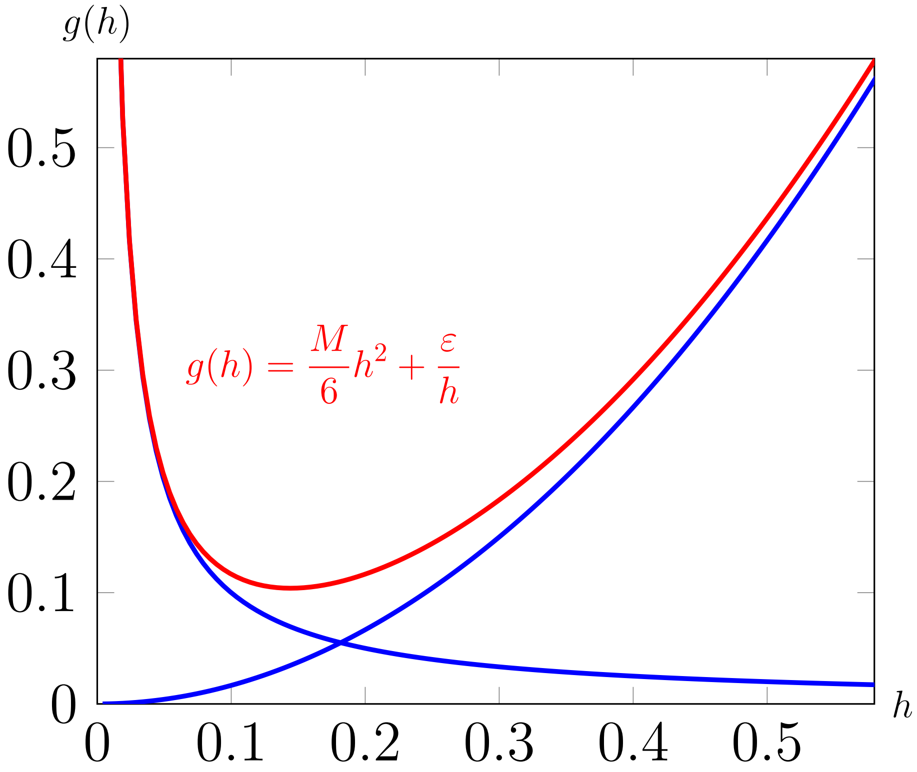

Figura 1: Variación de la cota de error respecto de h, siendo $M = 10$, $\varepsilon = 0.01$. El mínimo se alcanza en $h^* = 0.1442$, por lo que no conviene tomar valores más pequeños.

De lo anterior podría parecernos que si vamos computando aproximaciones de esta derivada con valores cada vez más pequeños de h, el error se irá hacia ∞. Sin embargo no va a ser así, porque este es un caso en el que entra también en juego el error de cancelación que se produce cuando se restan dos cantidades casi idénticas con precisión limitada, y aquí el numerador $f(a+h) - f(a-h)$ produce una cancelación que lleva a convertirlo en cero antes de aplicar la división por h. Con lo cual a partir de ese momento el error cometido con la fórmula es igual al valor de la derivada que se desea aproximar, $R(f) = f'(a)$, sin que tienda a infinito.