Tema 2: Derivación e integración numérica
Primera parte: derivación numérica

Métodos Numéricos II

Departamento de Matemática Aplicada
Universidad de Granada

Curso 2024/25

1. Derivación numérica
   - Error en una fórmula de derivación de tipo interpolatorio clásico
   - Algunas fórmulas habituales
   - Error total en la derivación numérica

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

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

o, para derivadas de orden superior,

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

Derivación numérica: 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 $x_0, x_1, \dots, x_n$, entonces $\alpha_i = \ell_i'(a)$, $i = 0, \dots, n$.

Ejemplo: $f'(0) = \alpha_0 f(0) + \alpha_1 f(2) + R(f)$
los polinomios de Lagrange para los nodos $x_0 = 0$, $x_1 = 2$ 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

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

Derivación numérica: Métodos de obtención de los coeficientes

2. **Imponiendo exactitud para** $\{1, x, \ldots, x^n\}$: Para la fórmula:

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

los coeficientes α_i son la solución del sistema de ecuaciones lineales $(n+1) \times (n+1)$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ x_0^2 & x_1^2 & \cdots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2a \\ \vdots \\ na^{n-1} \end{pmatrix}$$

cuya matriz de coeficientes es de Vandermonde.
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:**

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

donde $h_i = x_i - a$ y $m > n$.

Se plantea la suma $\sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i)$ y se impone que se anulen todos los términos de la derecha excepto el de la derivada objetivo y el del error, formando un SEL

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

Error en una fórmula de derivación de tipo interp. 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 $\Pi(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$.

Si f es suficientemente derivable, se puede obtener una expresión del error

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

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

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 $\frac{f^{(m)}(\mu)}{m!}$.

Error en una fórmula de derivación de tipo interp. clásico

En frecuentes ocasiones esta expresión

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

se puede simplificar.

Por ejemplo si a es uno de los nodos, entonces desaparece el primero de los dos sumandos.

Si los nodos son simétricos respecto de a, entonces son de la forma

$$x_0, \dots, x_{k-1}, x_k, \dots, x_{2k-1}, \qquad x_{2k-i-1} = 2a - x_i$$

Entonces,

$$\Pi(x) = \prod_{j=0}^{2k-1}(x - x_j) = \prod_{j=0}^{k-1}(x-x_j)(x-x_{2k-j-1}) = \prod_{j=0}^{k-1}(x-x_j)(x-2a+x_j)$$

La derivada de $(x - x_j)(x - 2a + x_j)$ es $(x - x_j) + (x - 2a + x_j)$ y en $x = a$ resulta $(a - x_j) + (-a + x_j) = 0$ y por tanto $\Pi'(a) = 0$.

Por tanto desaparece el segundo de los sumandos, con lo que la fórmula gana un grado de exactitud adicional

Error en una fórmula de derivación de tipo interp. clásico

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. Busca un caso de

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

en el que desaparezca el segundo sumando sin que los nodos sean simétricos respecto de a.

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

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

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

Algunas fórmulas habituales

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

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} - \frac{f'''(\mu)}{6} h^2 \qquad (1)$$

- 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.

Limitación del grado de exactitud

Teorema (Limitación del grado de exactitud)

Ninguna fórmula

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

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 $\Pi(x)$.

Como consecuencia, una fórmula como la anterior sólo puede aumentar k grados adicionales de exactitud. En particular una fórmula

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

sólo puede aumentar un grado de exactitud.

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

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

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 anterior 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 $\dfrac{\varepsilon}{h}$.

Error total en la derivación numérica

Nota: 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 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.