Tema 2: Derivación e integración numérica

Métodos Numéricos II

Departamento de Matemática Aplicada
Universidad de Granada

Curso 2024/25

1. Introducción
   - Fórmulas numéricas de tipo interpolatorio
   - Exactitud y precisión de fórmulas numéricas

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.

Introducción

Estos dos problemas no siempre se pueden resolver en la forma tradicional. Algunas razones para buscar vías alternativas de cálculo de $f'(a)$ o de $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$:

- No se conoce la expresión analítica de $f(x)$, sino tan solo unos cuantos datos y propiedades.
- 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.
  Además, existen muchas funciones (ej. e^{x^2}) integrables, pero cuya primitiva no es expresable en términos analíticos.

Formas lineales

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

Definición (Funcional o forma lineal)

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

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

Formas lineales

Ejemplos de funcionales lineales

¿Cuáles de los siguientes funcionales son lineales?

- $L_1(f) = \int_0^1 f(x)\,dx$
- $L_2(f) = f(7)$ $\qquad L_3(f) = \sqrt{f(7)}$ No
- $L_4(f) = f'(-2)$ $\qquad L_5(f) = f(2)f'(-2)$ No
- $L_6(f) = \int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1+x^2}}\,dx$
- $L_7(f) = \int_{-2}^2 |x| f(x)\,dx$
- $L_8(f) = 3f'''(0)$
- $L_9(f) = \int_1^3 (f(x^2) + 2f''(x))\,dx$
- $L_{10}(f) = f(4) - 2f'(4) + 3f''(2) + \pi \int_{-1}^1 f(x)\,dx$
- $L_{11}(f) = \int_0^1 f^2(x)\,dx$ No
- $L_{12}(f) = \int_1^3 (f(x^2) + 2f''(x))^2\,dx$ No
- $L_{13}(f) = f(4) - 2f'(4) + 3f''(2) + \pi \int_{-1}^1 f(x)\,dx + 2$ No.

Fórmula numérica

El problema es el de obtener un valor aproximado de un funcional lineal de f que llamaremos objetivo a partir de los datos disponibles.

Sea $L : \mathbb{F} \to \mathbb{R}$ un funcional lineal real (objetivo) definido sobre $\mathbb{F}$.

Definición: Fórmula numérica

Dados los funcionales lineales $L_i : \mathbb{F} \to \mathbb{R}$, $i = 0, \ldots, n$, una fórmula numérica para aproximar el valor $L(f)$ es

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

donde $R(f)$ representa el 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 pesos de la fórmula.

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 $L_i(f) = f(x_i),\ i = 0, \ldots, n$.
A los puntos x_i se les denomina 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 $L_i(f) = f(x_i),\ i = 0, \ldots, n$.

Un ejemplo: calcular aproximadamente $\displaystyle\int_0^2 e^{x^2}\,dx$ evaluando la función integrando en $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$.

Casos particulares

- 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
$$f'''(5) \approx \alpha_0 f(-1) + \alpha_1 f'(5) + \alpha_2 \int_1^4 f(x)\,dx + \alpha_3 f''(0).$$

La vía más empleada de resolver el problema de derivación e integración numérica es por medio de interpolación, es decir, si p interpola a f en unos determinados datos:

$$L(f) \approx L(p)$$

Recordamos:
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).

Problema general de interpolación

Dada $f \in \mathbb{F}$ y dadas las formas lineales $L_i : \mathbb{F} \to \mathbb{R}$, $i = 0, \ldots, n$, encontrar el interpolante $p \in V$ que verifique $L_i(p) = L_i(f)$, $i = 0, \ldots, n$.

En caso de existir solución p, el error de interpolación es la función $E(x) = f(x) - p(x)$.

Fórmulas numéricas de tipo interpolatorio

Definición

Diremos que la fórmula

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

es 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 tipo interpolatorio clásico.

Exactitud y precisión de fórmulas numéricas

Definición

Diremos que la fórmula

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

es exacta para $f \in \mathbb{F}$ cuando $R(f) = 0$.

En espacios de polinomios, diremos que tiene grado m de exactitud si y solo si es exacta para $\{1, x, \dots, x^m\}$ y $R(x^{m+1}) \neq 0$.

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

Teorema (Caracterización)

La fórmula

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

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 la fórmula 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 es exacta en $\mathbb{P}_n$ lo será para p y por tanto

$$L(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i L_i(f) + R(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i L_i(p) + R(f) = L(p) + R(f).$$