Cálculo Numérico I

Derivación Numérica

La definición de la derivada de una función como un límite lleva implícito un método de aproximación numérica:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \equiv D_h f(x);$$

diremos que esta última cantidad es una derivada numérica de f con paso h.

Ejemplo 21.1. Si calculamos la derivada numérica de $f(x) = x^2$ en $x = 1$,

h	$D_h f$	Error
0'1	2'1	0'1
0'05	2'05	0'05
0'025	2'025	0'025

Utilizando la fórmula de Taylor,

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \tfrac{1}{2}h^2 f''(c)$$

así

$$D_h f(x) = f'(x) + \tfrac{1}{2}hf''(c)$$

por lo tanto el error en la derivada numérica es del orden de h. De hecho en nuestro ejemplo $f''(1) = 2$, por tanto el error es exactamente h.

22 Derivada del polinomio interpolador

Si observamos la derivada numérica recién definida, podemos ver que es simplemente la pendiente de la secante por $(x, f(x))$ y $(x + h, f(x+h))$, es decir la derivada del polinomio interpolador de f en los nodos $x, x+h$. Podemos aproximar numéricamente la derivada de una función aproximando esta por medio de un polinomio interpolador y calculando la derivada de este último.

Por ejemplo, sea $\mathbb{P}_2$ el polinomio que interpola a f con nodos en los puntos $x_0 = x - h$, $x_1 = x$, $x_2 = x + h$; se obtiene

$$\mathbb{P}_2(t) = \frac{(t-x_1)(t-x_2)}{2h^2} f(x_0) + \frac{(t-x_0)(t-x_2)}{-h^2} f(x_1) + \frac{(t-x_0)(t-x_1)}{2h^2} f(x_2).$$

Por tanto,

$$\mathbb{P}_2'(t) = \frac{2t-(x_1+x_2)}{2h^2} f(x_0) + \frac{2t-(x_0+x_2)}{-h^2} f(x_1) + \frac{2t-(x_0+x_1)}{2h^2} f(x_2);$$

en particular

$$\mathbb{P}_2'(x_1) = \frac{x_2-x_1}{2h^2} f(x_0) + \frac{(x_1-x_0)+(x_1-x_2)}{-h^2} f(x_1) + \frac{x_1-x_0}{2h^2} f(x_2)$$
$$= \frac{f(x_2)-f(x_1)}{2h}.$$

Es decir,

$$f'(x_1) \approx \frac{f(x_1+h)-f(x_1-h)}{2h}.$$

que representa una especie de media entre la derivada «hacia adelante» ($h > 0$) y la derivada «hacia atrás» ($h < 0$) de la anterior.

¿Cómo estimar el error en $\mathbb{P}_n'(x)$?

Teorema 5. *Sea $f \in C^{n+2}([a,b])$ y sea $\mathbb{P}_n(t)$ el polinomio interpolador de f con nodos $x_0, \dots, x_n \in [a,b]$; $\forall t \in [a,b]$, $\exists \xi_1, \xi_2 \in [a,b]$ tales que*

$$f'(t) - \mathbb{P}_n'(t) = L_n(t)\frac{f^{(n+2)}(\xi_1)}{(n+2)!} + L_n'(t)\frac{f^{(n+1)}(\xi_2)}{(n+1)!}$$

donde $L_n(t) = (t-x_0)(t-x_1)\cdots(t-x_n)$.

Demostración. El error en $\mathbb{P}_n$ viene dado por

$$\mathbb{P}_n(t) - f(t) = -L_n(t) f[x_0, x_1, \dots, x_n, t]$$

por tanto,

$$E(t) = \mathbb{P}_n{}'(t) - f'(t)$$
$$= -L_n'(t) f[x_0, \dots, x_n, t] + L_n(x)\frac{d}{dt} f[x_0, \dots, x_n, t]$$
$$= -L_n'(t) f[x_0, \dots, x_n, t] + L_n(t) f[x_0, \dots, x_n, t, t]$$

dado que $f \in C^{(n+2)}$, $\exists \xi_1, \xi_2 \in [a,b]$ tal que

$$E(x) = -L_n'(x)\frac{f^{(n+1)}(\xi_1)}{(n+1)!} - L_n(x)\frac{f^{(n+2)}(\xi_2)}{(n+2)!}.$$

□

A fin de obtener el orden más alto en la última estimación tratamos de conseguir $L'(x) = 0$. Podemos lograrlo para n impar si distribuimos los nodos simétricamente respecto de x.

Ejemplo 22.1. Para $n = 1$, $x = \frac{1}{2}(x_0 + x_1)$, $x_0 = x - \delta$, $x_1 = x + \delta$:

$$L(x) = (x-x_0)(x-x_1); \qquad L'(x) = (x-x_1)+(x-x_0) = -\delta+\delta = 0$$

Ejemplo 22.2. Para $n = 3$, $x_0 = x - \mu$, $x_1 = x - \delta$, $x_2 = x + \delta$, $x_3 = x + \mu$:

$$L(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)$$

$$\begin{aligned} L'(x) &= \sum_{i,j,k=0;\text{distintos}}^{3} (x - x_i)(x - x_j)(x - x_k) \\ &= \delta(-\delta)(-\mu) + \mu(\delta)(-\mu) + \mu\delta(-\mu) + \mu\delta(-\delta) = 0. \end{aligned}$$

Así:

$$E(x) = P_n'(x) - F'(x) = \delta^2\mu^2 \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}.$$

En el caso general de n impar y nodos igualmente espaciados a distancia δ y distribuidos simétricamente respecto de x

$$\mathbb{P}_n{}'(x) - f'(x) = (-1)^{\frac{n-1}{2}} \cdot 3^2 \cdot 5^2 \cdot \cdots \cdot n^2 (\frac{\delta}{2})^{n+1} \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}.$$

De forma análoga, podemos conseguir que $L(x) = 0$ para n par tomando x como uno de los nodos. Resulta entonces que $L'(x)$ tiene un solo término no nulo y se obtiene un resultado análogo al anterior.

23 Coeficientes indeterminados

El procedimiento descrito produce fórmulas de derivación numérica del tipo:

$$f^{(k)}(x) = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$

donde los x_i son nodos predeterminados y los w_i los «pesos» correspondientes.

No son propiamente pesos ya que $\sum w_i \neq 1$. De hecho $\sum w_i = 0$.

Una vez prefijados los nodos, para determinar los pesos podemos recurrir al método siguiente de coeficientes indeterminados.

Ejemplo 23.1. Supongamos que

$$f'(x) = Af(x - h) + Bf(x) + Cf(x + h);$$

dado que el polinomio de Taylor de f nos da:

$$f(x \pm h) = f(x) \pm f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 \pm \frac{1}{6}f'''(x)h^3 + \frac{1}{24}f^{\mathsf{IV}}(\xi_\pm)h^4 \tag{23.1}$$

Despejando $f'(x)$ obtenemos

$$\begin{aligned} f'(x) &= (A+B+C)f(x) + h(-A+C)f'(x) + \frac{1}{2}h^2(A+C)f''(x) \\ &\quad + \frac{1}{6}h^3(-A+C)f'''(x) + \frac{1}{24}h^4(Af^{\mathsf{IV}}(\xi_-) + Cf^{\mathsf{IV}}(\xi_+)). \end{aligned}$$

Si identificamos coeficientes obtenemos el sistema

$$\begin{aligned} A + B + C &= 0 \\ -A \qquad + C &= \frac{1}{h} \\ A \qquad + C &= 0, \end{aligned}$$

cuya solución es $A = -C = -\frac{1}{2h}$, $B = 0$; por tanto

$$\begin{aligned} f'(x) &\approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = D_h f(x); \\ f'(x) - D_h f(x) &= \frac{h^3}{48}[f^{\mathsf{IV}}(\xi_-) + f^{\mathsf{IV}}(\xi_+)] \end{aligned}$$

Ejemplo 23.2. Queremos deducir una derivada segunda de la forma $D_h^2 f(x) = Af(x-2h) + Bf(x-h) + Cf(x+h) + Df(x+2h)$.
Para ello, junto con (23.1) utilizamos

$$f(t \pm 2h) = f(t) \pm 2hf'(t) + 2h^2 f''(t) \pm \frac{4}{3}h^3 f'''(t) + \frac{2}{3}h^4(f^{\mathsf{IV}}(\zeta_1) + f^{\mathsf{IV}}(\zeta_2)) \tag{23.2}$$

De ellas resulta que

$$\begin{aligned} f''(t) &= (A+B+C+D)f(t) + h(-2A-B+C+2D)f'(t) + \frac{h^2}{2}(4A+B+C+4D)f''(t) \\ &+ \frac{h^3}{6}(-8A-B+C+8D)f'''(t) + \frac{h^4}{24}(16Af^{\mathsf{IV}}(\zeta_-) + Bf^{\mathsf{IV}}(\xi_-) + Cf^{\mathsf{IV}}(\xi_+) + 16Df^{\mathsf{IV}}(\zeta_+)) \end{aligned}$$

lo que da el sistema lineal

$$\begin{aligned} A + B + C + D &= 0 \\ -2A - B + C + 2D &= 0 \\ 4A + B + C + 4D &= \frac{1}{h^2} \\ -8A - B + C + 8D &= 0 \end{aligned}$$

que resuelto proporciona

$$D_h^2 f(x) = \frac{f(x-2h) - f(x-h) - f(x+h) + f(x+2h)}{3h^2}$$

con error

$$-\frac{h^2}{72}\left[16 f^{\mathsf{IV}}(\zeta_-) - f^{\mathsf{IV}}(\xi_-) - f^{\mathsf{IV}}(\xi_+) + 16 f^{\mathsf{IV}}(\zeta_+)\right].$$

24 Estabilidad Numérica

Si observamos todas las reglas de derivación numérica que hemos deducido, veremos que consisten en un cociente de dos números que cuando h (distancia entre nodos) tiende a cero es de la forma $\frac{0}{0}$. De ello resulta que cuando h es muy pequeño vamos a tener una pérdida de significación en el numerador amplificada por la división por h^k. Esto hace que, dada una cierta precisión en los cálculos, habrá un h óptimo que nos dará la precisión máxima en el cálculo de la derivada numérica.

Supongamos que ε es la precisión relativa de nuestros cálculos (digamos $\varepsilon \approx 10^{-16}$, como ocurre con Matlab). Vamos a estudiar qué sucede con la derivada numérica

$$D_h f(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

En su cálculo con la máquina tenemos

$$\tilde{D}_h f(x) = \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x-h)}{2h},$$

donde $\tilde{f}(x-h) = (1+\varepsilon_2) f(x-h)$; $\tilde{f}(x+h) = (1+\varepsilon_1) f(x+h)$; ($|\varepsilon_i| \le \varepsilon, i = 1, 2$), por tanto

$$\tilde{D}_h f(x) - f'(x) = \frac{\varepsilon_1 f(x+h) - \varepsilon_2 f(x-h)}{2h} + D_h f(x) - f'(x);$$

dado que $|D_h f(x) - f'(x)| \le \frac{1}{6} h^2 \sup |f''|$ resulta

$$\left|\tilde{D}_h f(x) - f'(x)\right| \le \sup |f| \frac{\varepsilon}{h} + \sup |f''|$$

es decir

$$E(h) = |\tilde{D}_h f(x) - f'(x)| \le C_1 \frac{\varepsilon}{h} + C_2 h^2$$

para buscar el E mínimo hacemos $E'(h) = 0$, es decir $2C_2 h - C_1 \varepsilon h^{-2} = 0$, que tiene solución $h = \sqrt[3]{\frac{C_1}{2C_2}\varepsilon}$. Como esperamos que tanto C_1 como C_2 tengan un valor «moderado», $h \approx C\sqrt[3]{\varepsilon}$ (si trabajamos con Matlab, $h \approx 10^{-5}$).

Ejemplo 24.1. Calculemos la derivada de la función $f(x) = x^4$ en el punto $x = 2$, cuyo valor sabemos que es 32, por medio de la derivada numérica

$$D_h f(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

para valores de $h = 10^{-k}$, $k = 1, \ldots, 20$. Según el apartado anterior debemos esperar que el mejor resultado se produzca para $k \approx 5$.

Matlab nos da los siguientes resultados, en los cuales hemos incluido la tabla de errores:

h	Df	error
1.00e-001	32.080000000000	0.080000000000
1.00e-002	32.000800000000	0.000800000000
1.00e-003	32.000007999996	0.000007999996
1.00e-004	32.000000080030	0.000000080030
1.00e-005	32.000000001009	0.000000001009
1.00e-006	32.000000000032	0.000000000032
1.00e-007	31.999999992038	0.000000007962
1.00e-008	31.999999894339	0.000000105661
1.00e-009	32.000002647692	0.000002647692
1.00e-010	32.000002647692	0.000002647692
1.00e-011	32.000002647692	0.000002647692
1.00e-012	32.002844818635	0.002844818635
1.00e-013	31.974423109205	0.025576890795
1.00e-014	32.329694477085	0.329694477085
1.00e-015	31.974423109205	0.025576890795
1.00e-016	0.000000000000	32.000000000000
1.00e-017	0.000000000000	32.000000000000
1.00e-018	0.000000000000	32.000000000000
1.00e-019	0.000000000000	32.000000000000
1.00e-020	0.000000000000	32.000000000000

Podemos observar que el menor error se produce para $k = 6$ ($h = 10^{-6}$), para el que este error es $3{\cdot}10^{-11}$, es decir, del orden de

$$C_1 \frac{10^{-16}}{10^{-6}} + C_2 (10^{-6})^2 \approx C{\cdot}10^{-10}.$$