Diferenciación numérica

Sea $f \in C^\infty(\mathbb{R})$. Partiendo de la definición de derivada en un punto,

$$f'(x) = \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h)-f(x)}{h},$$

podemos obtener aproximaciones a $f'(x)$ fijando un $h \neq 0$ pequeño, es decir

$$\boxed{f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h}} \tag{1}$$

con lo que el error (absoluto) de aproximación sería

$$E(x) = f'(x) - \frac{f(x+h)-f(x)}{h}.$$

Utilizando el desarrollo de Taylor de primer orden de f en x sabemos que

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(\xi)$$

para algún $\xi \in [x, x+h]$ con $h > 0$. Por tanto reordenando términos podemos estimar el error absoluto usando la segunda derivada de f:

$$\boxed{\left| f'(x) - \frac{f(x+h)-f(x)}{h} \right| = \frac{h}{2}\left|f''(\xi)\right| \leq \frac{h}{2} \max_{[x,x+h]} \left|f''\right|}$$

La aproximación (1) es la aproximación de primer orden de la derivada. Es posible obtener mejores aproximaciones usando derivadas de orden superior.

Ejemplo 1 (Aproximación de orden 2 a $f'(x)$)**.** Sean $f \in C^3([a,b])$ y $h > 0$. Si $[x-h, x+h] \subset [a,b]$, entonces existen $\xi \in [x, x+h]$ y $\eta \in [x-h, x]$ tales que

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi),$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(\eta),$$

y restando estas expresiones se obtiene

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + \frac{h^3}{6}\left(f'''(\xi) + f'''(\eta)\right).$$

Reordenando términos:

$$\boxed{\left| f'(x) - \frac{f(x+h)+f(x-h)}{2h} \right| = \frac{h^2}{6} \left| f'''(\xi) + f'''(\eta) \right| \leq \frac{h^2}{3} \max_{[a,b]} |f'''|}$$

Por tanto, la aproximación de segundo orden de $f'(x)$ es

$$\boxed{f'(x) \approx \frac{f(x+h)+f(x-h)}{2h}}$$

con $h > 0$ pequeño.

De forma similar, se pueden obtener derivadas de cualquier orden combinando desarrollos de Taylor de f de orden suficientemente alto en puntos de la forma $x \pm h$, $x \pm 2h$, $x \pm 3h$... Es decir, si $f \in C^{N+1}$ podemos usar los desarrollos

$$f(x+mh) = f(x) + mhf'(x) + \frac{m^2h^2}{2} f''(x) + \ldots + \frac{m^k h^k}{k!} f^{k)}(x) + \frac{m^{k+1}h^{k+1}}{(k+1)!} f^{k+1)}(\xi)$$

para algún ξ entre x y $x + mh$, donde $k \geq N$ y $m \in \mathbb{Z}$.

Ejemplo 2 (Aproximación de orden 2 a $f''(x)$)**.** Sean $f \in C^4([a,b])$ y $h > 0$. Si $[x-h, x+h] \subset [a,b]$, entonces existen $\xi \in [x, x+h]$ y $\eta \in [x-h, x]$ tales que

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f'''(x) + \frac{h^4}{24} f^{4)}(\xi),$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{6} f'''(x) + \frac{h^4}{24} f^{4)}(\eta).$$

Sumando y reordenando términos se obtiene

$$\boxed{\left| f''(x) - \frac{f(x+h)+f(x-h)-2f(x)}{h^2} \right| = \frac{h^2}{24} \left| f^{4)}(\xi) + f^{4)}(\eta) \right| \leq \frac{h^2}{12} \max_{[a,b]} |f^{4)}|}$$

Por tanto, la aproximación de segundo orden de $f''(x)$ es

$$\boxed{f''(x) \approx \frac{f(x+h)+f(x-h)-2f(x)}{h^2}}$$

con $h > 0$ pequeño.

Diferenciación numérica usando el polinomio interpolador

Si $f:[a,b]\to\mathbb{R}$, dados $x_0,\dots,x_n\in[a,b]$ con $x_i\neq x_j$ para todo $i\neq j$, sabemos que existe un único polinomio interpolador $P\in\mathscr{P}_n$ tal que $P(x_i)=f(x_i)$ para todo $i=0,\dots,n$. Veamos bajo qué condiciones la aproximación

$$f'(x)\approx P'(x)$$

es válida.

Teorema 3. *Sea $f\in C^{n+2}(\Omega)$. Supongamos que $x_0,\dots,x_n\in[a,b]$ con $x_i\neq x_j$ para todo $i\neq j$. Sea $P\in\mathscr{P}_n$ el polinomio interpolador de f en $x_0,\dots,x_n$. Si $E(x)=f(x)-P(x)$ denota el error absoluto de interpolación, entonces*

$$f'(x)-P'(x)=E'(x)=\frac{f^{n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\Pi_n'(x)+\frac{f^{n+2)}(\eta_x)}{(n+2)!}\Pi_n(x),$$

donde $\Pi_n(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)$.

Corolario 4. *El error de aproximación no es necesariamente cero en los puntos $x_0,\dots,x_n$:*

$$\left|f'(x_i)-P'(x_i)\right|\leq\frac{\text{máx}_{[a,b]}\left|f^{n+1)}\right|}{(n+1)!}\prod_{k\neq i}|x-x_k|.$$

Interpolación numérica

El objetivo es aproximar de forma numérica la integral de una función continua f en un intervalo $[a,b]$,

$$\int_a^b f(x)\,dx.$$

Como la integral es un operador lineal, dados $x_0,\dots,x_1\in[a,b]$ con $x_i\neq x_j$ para todo $i\neq j$, la idea es proporcionar coeficientes c_i de forma que

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

Para ello, usamos $P\in\mathscr{P}_n$ el polinomio que interpola f en los puntos $x_0,\dots,x_n$, que expresado como combinación de los polinomios básicos de Lagrange es

$$P(x)=\sum_{i=0}^{n}f(x_i)L_i(x),$$

donde

$$\boxed{L_i(x) = \prod_{k\neq i} \frac{x-x_k}{x_i-x_k}, \qquad i=0,\dots,n}$$

son los polinomios básicos de Lagrange. De esta forma,

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

y por tanto

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^n c_i f(x_i) \qquad \text{con} \qquad c_i = \int_a^b L(x_i)\,dx, \quad i=0,\dots,n}$$

Para ver que la aproximación propuesta es suficientemente buena, tenemos que estimar el error, que en este caso viene dado por

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - \sum_{i=0}^n c_i f(x_i) \right|.$$

Las formas de obtener los coeficientes c_i de forma que las aproximaciones sean suficientemente buenas pueden clasificarse en dos categorías:

- **Fórmulas de Newton-Côtes:** $x_0,\dots,x_n \in [a,b]$ fijos, se calculan los c_i. Por ejemplo:
  - Si $n=1$ (2 puntos) $\longrightarrow$ Fórmulas del trapecio.
  - Si $n=2$ (3 puntos) $\longrightarrow$ Fórmulas de Simpson.

  Así mismo, se distingue entre fórmulas *cerradas* ($x_0=a$ y $x_n=b$) y fórmulas *abiertas* ($x_0>a$ y $x_n<b$).

- **Fórmulas de cuadratura de Gauss:** se calculan tanto los puntos $x_0,\dots,x_n$ como los coeficientes c_i.

En lo que sigue será útil la siguiente generalización del Teorema del Valor Medio.

Teorema 5 (Teorema del Valor Medio Generalizado (TVMG))**.** *Sean $f,g \in C([a,b])$ con $g>0$ en $[a,b]$. Existe $\vartheta \in (a,b)$ tal que*

$$\int_a^b f(x)g(x)\,dx = f(\vartheta)\int_a^b g(x)\,dx.$$

Corolario 6 (Teorema del Valor Medio (TVM))**.** *Sea $f \in C([a,b])$. Existe $\vartheta \in (a,b)$ tal que*

$$\int_a^b f(x)\,dx = f(\vartheta)(b-a).$$

Fórmulas del trapecio (Newton-Côtes con $n = 1$)

Consideremos el caso más simple $n = 1$ en el que tenemos dos puntos $x_0, x_1 \in [a, b]$. Además, para construir la fórmula del trapecio cerrada debemos asumir $x_0 = a$ y $x_1 = b$. El polinomio de interpolación de f en los puntos a y b es

$$P(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b-a}(x-a).$$

Integrando $P(x)$ en $[a, b]$ se obtiene la siguiente aproximación:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P(x)\,dx = \frac{f(a) + f(b)}{2}(b-a)$$

Veamos que la aproximación es suficientemente buena,

$$\int_a^b f(x)\,dx - \int_a^b P(x)\,dx = \int_a^b \big(f(x) - P(x)\big)\,dx = \int_a^b f[a,b,x]\Pi_1(x)\,dx$$

$$= [\text{TVMG}] = \underbrace{f[a,b,\vartheta]}_{\frac{f''(\xi_\vartheta)}{2}} \underbrace{\int_a^b (x-a)(x-b)\,dx}_{-\frac{(b-a)^3}{6}} = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi_\vartheta).$$

Por tanto,

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a) \right| = \frac{(b-a)^3}{12}\left|f''(\xi_\vartheta)\right| \le \frac{(b-a)^3}{12} \max_{[a,b]} |f''|,$$

y en consecuencia la aproximación a la integral dada por esta fórmula es buena si el error es pequeño, es decir, si $b-a$ es suficientemente pequeño.

Por simplicidad, reescribimos la fórmula con $b = a + h$:

Fórmula del trapecio cerrada ($a = x_0 < x_1 = a + h$): existe $\vartheta \in [a, b]$ tal que

$$\boxed{\int_a^{a+h} f(x)\,dx = \frac{h}{2}\big(f(a) + f(a+h)\big) - \frac{h^3}{12} f''(\vartheta)}$$

De la misma forma puede obtenerse la versión "abierta" de la fórmula del trapecio.

Fórmula del trapecio abierta ($a < x_0 = a + h < x_1 = a + 2h < b = a + 3h$): existe $\vartheta \in [a, b]$ tal que

$$\boxed{\int_a^{a+3h} f(x)\,dx = \frac{3h}{2}\big(f(a+h) + f(a+2h)\big) - \frac{3h^3}{4} f''(\vartheta)}$$

Fórmulas de Simpson (Newton-Côtes con $n = 2$)

De forma similar al caso $n = 1$, es posible obtener las siguientes aproximaciones.

Fórmula de Simpson cerrada ($a = x_0 < x_1 = a + h < x_2 = b = a + 2h$):

$$\boxed{\int_a^{a+2h} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\big(f(a) + 4f(a+h) + f(a+2h)\big) - \frac{h^5}{90} f^{4)}(\vartheta)}$$

Fórmula de Simpson abierta ($a < x_i = a + (i+1)h < b = a + 4h,\ \ i = 0, 1, 2$):

$$\boxed{\int_a^{a+4h} f(x)\,dx = \frac{4h}{3}\big(2f(a+h) - 4f(a+2h) + 2f(a+3h)\big) - \frac{14h^5}{45} f^{4)}(\vartheta)}$$

Fórmula de Simpson 3/8:

$$\boxed{\int_a^{a+3h} f(x)\,dx = \frac{3h}{8}\big(f(a) + 3f(a+h) + 3f(a+2h) + f(a+3h)\big) - \frac{3h^5}{80} f^{4)}(\vartheta)}$$

Fórmulas de Newton-Côtes con $n \in \mathbb{N}$

Dados $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ tales que $x_i \neq x_j$ para $i \neq j$, sabemos por la unicidad del polinomio interpolador de Lagrange que en el caso particular en que f sea un polinomio de grado $k \leq n$, es decir, si $f \in \mathscr{P}_n$, entonces f es exactamente igual a su polinomio interpolador en los puntos $x_0, \ldots, x_n$, con lo que la aproximación de su integral es exacta:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b P(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} c_i f(x_i).$$

Podemos usar este hecho para calcular los coeficientes $c_0, \ldots, c_n$ testeando la igualdad anterior para distintos polinomios de la forma $f(x) = x^k$ con $k = 0, \ldots, n$.

Consideremos $f(x) = x^k$. Entonces

$$\sum_{i=0}^{n} c_i x_i^k = \int_a^b x^k\,dx = \frac{b^{k+1} - a^{k+1}}{k+1}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Estas igualdades plantean un sistema de $n+1$ ecuaciones lineales con incógnitas $c_0, \ldots, c_n$ que puede expresarse en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & \cdots & x_n \\ \vdots & & \vdots \\ x_0^n & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b-a \\ \frac{b-a}{2} \\ \vdots \\ \frac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1} \end{pmatrix}.$$

La matriz de coeficientes tiene determinante de Vandermonde, por tanto el sistema tiene solución única.

La resolución de estos sistemas proporcionan los coeficientes necesarios para las fórmulas de Newton-Côtes (y en particular, las fórmulas del trapecio y de Simpson). Además, la construcción de los coeficientes de la matriz dependerá del tipo de fórmula:

- Fórmulas cerradas de n puntos:

$$a = x_0 < x_i = a + ih < b = x_n = a + nh, \quad \text{con} \quad i = 1, \ldots, n-1.$$

- Fórmulas abiertas de n puntos:

$$a < x_i = a + (i+1)h < b = a + (n+2)h, \quad \text{con} \quad i = 0, \ldots, n.$$

En el siguiente resultado estudiamos el error de aproximación.

Teorema 7. *Sea $h > 0$ y $f \in C^{n+1}([a, a+h])$. Sean $z_0, \ldots, z_n \in [0,1]$ tales que $z_i \neq z_j$ para $i \neq j$. Sean $x_i = a + z_i h \in [a, a+h]$ y $P \in \mathscr{P}_n$ el polinomio interpolador de f en $x_0, \ldots, x_n$. Existe $\vartheta \in [a, a+h]$ tal que*

$$\int_a^{a+h} f(x)\, dx = \int_a^{a+h} P(x)\, dx + \frac{Ch^{n+2}}{(n+1)!} f^{n+1)}(\vartheta),$$

donde $C = \displaystyle\int_0^1 \prod_{k=0}^{n} (z - z_k)\, dz.$

Fórmulas de integración compuesta

Como hemos visto, las fórmulas de Newton-Côtes proporcionan buenas aproximaciones a la integral de una función f sobre un intervalo $[a, a+h]$ cuando la longitud del intervalo de integración $h > 0$ es suficientemente pequeña. Sin embargo, para intervalos grandes $[a, b]$ las fórmulas pueden proporcionar aproximaciones incorrectas. Para evitarlo, la idea es descomponer el intervalo grande en varios subintervalos de forma que la longitud de cada uno de ellos sea lo suficientemente pequeña como para obtener buenas aproximaciones.

Es decir, si $b - a$ es grande, escogemos $h = \frac{b-a}{m}$ con $m \in \mathbb{N}$ suficientemente grande de forma que la aproximación es buena en cada subintervalo $[a + (j-1)h, a + jh] \subset [a, b]$:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{j=1}^{m} \left\{ \int_{a+(j-1)h}^{a+jh} f(x)\,dx \right\} \approx \sum_{j=1}^{m} \left\{ \int_{a+(j-1)h}^{a+jh} P^{(j)}(x)\,dx \right\},$$

donde $P^{(j)} \in \mathscr{P}_n$ es el polinomio interpolador de f en una partición de puntos $x_0^{(j)}, \ldots, x_n^{(j)} \in [a + (j-1)h, a + jh]$, para cada $j = 1, \ldots, m$.

Algunos ejemplos:

Fórmula del trapecio compuesta: Sean $f \in C^2([a, b])$ y $h = \frac{b-a}{m}$ con $m \in \mathbb{N}$ suficientemente grande. Existe $\vartheta \in [a, b]$ tal que

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left(f(a) + 2\sum_{j=1}^{m-1} f(a + jh) + f(b) \right) - \frac{h^2}{12}(b-a) f''(\vartheta)}$$

Fórmula de Simpson compuesta: Sean $f \in C^4([a, b])$ y $h = \frac{b-a}{2m}$ con $m \in \mathbb{N}$ suficientemente grande. Existe $\vartheta \in [a, b]$ tal que

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4\sum_{j=1}^{m} f(a + (2j-1)h) + 2\sum_{j=1}^{m-1} f(a + 2jh) + f(b) \right) - \frac{h^2}{180}(b-a) f^{4)}(\vartheta)}$$