Diferenciación e integración numérica

- Ya hemos visto interpolación: dado una curva definida por una serie de puntos, encontrar una función (un polinomio) que pase por esos puntos.
- Ahora veremos como evaluar la *derivada* de una función, si se conocen los valores en una serie de puntos.
- En forma similar, como evaluar la *integral* definida de una función, si se conocen los valores en una serie de puntos.

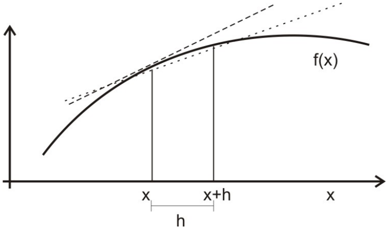
Diferenciación numérica

- Del concepto de derivada:

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

- Esto sugiere una aproximación a la derivada:

$$f'(x) \simeq \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$



Fórmula de 2 puntos

- Desarrollando en Series de Taylor:

$$f(x+h) = f(x) + h\,f'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \dots$$

- Si se trunca la serie en el término lineal el error es $\frac{h^2}{2}f''(\xi)$ donde ξ es un punto interior al intervalo $(x, x+h)$
- De allí:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \; - \frac{h}{2}f''(\xi)$$

- Así la estimación a la derivada es:

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

y el error de truncamiento: $\frac{h}{2}f''(\xi)$

- Esta fórmula se conoce como *fórmula de 2 puntos*
- Se tomaron los puntos en x y $x+h$ por este motivo se denomina también *fórmula en diferencias finitas hacia adelante* o *fórmula en diferencias finitas progresivas*
- Se podría haber calculado también la derivada en x tomando los puntos $x-h$ y x. En este caso la fórmula se conoce como *fórmula en diferencias finitas hacia atrás* o *fórmula en diferencias finitas regresivas*
- En cualquiera de estos casos el error de de *primer* orden, ya que depende de h
- Una fórmula mejor puede obtenerse involucrando $x-h$ y $x+h$

Fórmula de 3 puntos

- Escribiendo el desarrollo en serie de Taylor:

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

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

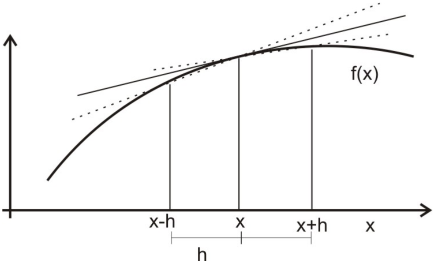
- Restando:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2))$$

- El estimador de la derivada:

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

  se conoce como *fórmula en diferencias centradas, de tres puntos*, y el error es $\frac{h^2}{6}f'''(\xi)$



- Gráficamente puede verse también que la formula en diferencias centradas da una mejor aproximación a la derivada.
- El error es de segundo orden (depende de h^2).

Otras fórmulas

- Análogamente puede escribirse una *fórmula de 5 puntos*:

$$\tilde{f}'(x) = \frac{1}{12h}[f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)]$$

  que tiene un error $\frac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi)$
- Escribiendo el desarrollo en series de Taylor para $x-h$, $x+h$, $x-2h$, $x+2h$, $x-3h$, $x+3h$, etc., y buscando combinaciones lineales que vayan anulando las derivadas más bajas, pueden obtenerse fórmulas para distintos ordenes de derivación y con distintos errores.

Errores en diferenciación numérica

- Al evaluar numericamente la derivada se introducen 2 tipos de errores:
  - Error de truncamiento
    Es debido al método numérico. Por ejemplo el error introducido al retener algunos términos de la Serie de Taylor, y descartar el resto.

  - Error de redondeo
    Debido a la aritmética finita de la computadora (aquí entrar los errores por *poda* -hacia abajo- o por *redondeo* -hacia arriba-)

- Por ej. usando fórmula de 3 puntos, si se designa con $\tilde{f}(x)$ a la representación en punto flotante:

$$f(x+h) = \tilde{f}(x+h) + e_1$$

$$f(x-h) = \tilde{f}(x-h) + e_2$$

  donde e_1 y e_2 son errores de redondeo.

- El error en la aproximación de la derivada:

$$f'(x) - \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x-h)}{2h} = \frac{e_1 - e_2}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi)$$

  donde el primer término es el error de redondeo y el segundo el de truncamiento.

- Cuando $h \to 0$: el error de redondeo (1er término) crece; y el error de truncamiento (2do término), disminuye.

Extrapolación de Richardson

- Hay un procedimiento muy original que permite reducir el error de truncamiento: la Extrapolación de Richardson.
- Hemos visto:

$$f(x+h) = f(x) + h\,f'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) + \ldots$$

$$f(x-h) = f(x) - h\,f'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) - \ldots$$

- Restando

$$f(x+h) - f(x-h) = 2h\,f'(x) + 2\frac{h^3}{3!}f'''(x) + 2\frac{h^5}{5!}f^{(5)}(x) + \ldots$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \left[\frac{h^2}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{5\,!}f^{(5)}(x) + \ldots\right]$$

$$f'(x) = \phi(h) - \left[a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \ldots\right] \tag{1}$$

donde $\phi(h)$ estamos llamando a la estimación de la derivada (como función de h). Y el corchete es el término de error de truncamiento.

- El error está gobernado por el término $a_2 h^2$. Trataremos de eliminar ese término.
- Si tomamos un paso $\frac{h}{2}$:

$$f'(x) = \frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})}{2\ \frac{h}{2}} - \left[a_2 \frac{h^2}{4} + a_4 \frac{h^4}{16} + a_6 \frac{h^6}{64} + \dots\right]$$

$$f'(x) = \phi(\frac{h}{2}) - \left[a_2 \frac{h^2}{4} + a_4 \frac{h^4}{16} + a_6 \frac{h^6}{64} + \dots\right] \qquad (2)$$

- Multiplicando (1) por -1 y (2) por 4 y sumando:

$$3f'(x) = 4\ \phi(\frac{h}{2}) - \phi(h) - \frac{3}{4} a_4 h^4 - \frac{15}{16} a_6 h^6 - \dots$$

$$f'(x) = \frac{4}{3}\ \phi(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3}\ \phi(h) - \left[\frac{1}{4} a_4 h^4 + \frac{5}{16} a_6 h^6 + \dots\right]$$

- Es decir que tomando como estimación de la derivada en x:

$$\frac{4}{3}\ \phi(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3}\ \phi(h)$$

  donde $\phi(x)$ es la fórmula de 3 puntos, el error esta gobernado por el término $a_4 h^4$. Es mucho menor que antes.
- La extrapolación de Richardson permite, combinando la estimacion correspondiente a dos pasos h y $h/2$, reducir mucho el error de truncamiento.
- Este proceso podria repetirse: si llamamos $\psi(h) = \frac{4}{3}\phi(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3}\phi(h)$, podemos hacer una combinación lineal entre $\psi(h)$ y $\psi(\frac{h}{2})$ para eliminar el término en h^4, y así sucesivamente.

Derivadas de orden superior

- Si en vez de restar las expresiones para $f(x+h)$ y $f(x-h)$ se suman, se obtiene:

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2\,f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi)$$

  El primer término es una estimación de la derivada segunda, con un error de segundo orden.

- Análogamente, involucrando 5 puntos puede escribirse:

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

  como estimación de la derivada tercera, también con un error de orden h^2