Diferenciación e integración numérica

Existen 2 caminos para diferenciar e integrar funciones en una computadora:

* Utilizar métodos numéricos aproximados
* Utilizar métodos simbólicos exactos

Nos enfocaremos en el primero de estos caminos por dos motivos. El primero, porque los métodos simbólicos funcionan cuando se tiene un conjunto de reglas definidas para operar sobre las funciones. Estas reglas están, casi siempre, especificadas cuando los resultados pueden expresarse en términos de funciones elementales. En otras palabras, se puede encontrar ~~fun ciones analíticas con relativa~~ soluciones de manera analítica con relativa facilidad.

El segundo motivo es que muchas veces no se cuenta con la función per-se, sino con puntos provenientes de una simulación numérica o medidos por un experimento real. En este caso no es posible aplicar directamente las reglas del cálculo para encontrar el resultado.

Diferenciación numérica

La derivada de una función f en el punto x es

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

que no es posible de implementar en una computadora. Sin embargo, el teorema de Taylor nos permite escribir algunas aproximaciones

Tema: Fecha: / /

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

donde c está entre x y $x+h$. De esta relación podemos escribir

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

y, en la práctica, tendremos que

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

De (+) podemos ver que mientras h sea más pequeño el error será más pequeño. Esta fórmula se conoce como la fórmula de diferencias hacia adelante con dos puntos.

Ejemplo Utilice la fórmula de diferencias hacia adelante con dos puntos para aproximar la derivada de $f(x) = 1/x$ en $x=2$ con $h=0,1$.

Podemos calcular una fórmula de segundo orden:

$$f(x+h) = f(x) + h f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f'''(c_1)$$

$$* - \quad f(x-h) = f(x) - h f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{6} f'''(c_2)$$

restando y reordenando

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

para $x-h < c < h+x$. Esta fórmula se conoce como la fórmula de diferencias centrales con tres puntos.

Para esta última relación usamos el teorema generalizado del valor medio:

Si f es una función continua en el intervalo $[a,b]$, $x_1, x_2, \dots, x_n$ puntos en ese intervalo y $d_1, \dots, d_n > 0$ entonces existe un c en $[a,b]$

$$(d_1+\dots+d_n)\, f(c) = d_1 f(x_1) + \dots + d_n f(x_n).$$

Ejemplo Use la fórmula de diferencias centrales con tres puntos para aproximar $f(x) = 1/x$ en $x=2$ y $h = 0,1$.

Usando el teorema de Taylor es posible aproximar derivadas de mayor grado:

$$f(x+h) = f(x) + h f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f'''(x) + \frac{h^4}{24} f^{(IV)}(c_1)$$

$$+ \quad f(x-h) = f(x) - h f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{6} f'''(x) + \frac{h^4}{24} f^{(IV)}(c_2)$$

sumando se obtiene

$$f''(x) = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{IV}(c)$$

para algún c entre $x-h$ y $x+h$.

Error de redondeo

No es difícil notar que la aproximación numérica de la derivada va en contra del precepto de no restar números de magnitudes similares. Sin embargo, en este caso es inevitable por la definición de derivada.

Por esto, el error en la aproximación es un juego entre dos efectos. El primero, relacionado con el truncamiento de la serie Taylor, disminuye a medida que h disminuye. El segundo, debido a la cancelación de bits significativos, aumenta a medida que h disminuye.

Extrapolación

Asumamos que tenemos una función aproximada por una fórmula de orden n:

$$Q \approx F(h) + K h^n$$

Es posible aumentar el orden de la aproximación con algunas manipulaciones. No es difícil ver que

$$Q - F(h/2) \approx \frac{1}{2^n}(Q - F(h))$$

que nos permite escribir

$$Q \approx \frac{1}{2^n - 1}\left[2^n F(h/2) - F(h)\right]$$

que se conoce como la fórmula de extrapolación de Richardson.

Ejemplo Aplique la extrapolación de Richardson a la fórmula de diferencias centrales con tres puntos

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

Además muestre que el orden del resultado es 4.

R. $$f'(x) \approx \frac{f(x-h) - 8f(x-h/2) + 8f(x+h/2) - f(x+h)}{6h}$$

Integración numérica

La integración numérica de integrales definidas puede atacarse usando algunos de los métodos que ya hemos visto. Concretamente, la interpolación y el método de los mínimos cuadrados ~~est~~ son útiles en este contexto.

La regla del trapezoide

Sea $f(x)$ una función con segunda derivada en el intervalo $[x_0, x_1]$. Además, definimos $y_0 = f(x_0)$ y $y_1 = f(x_1)$. Si interpolamos un polinomio de grado 1 entre (x_0, y_0) y (x_1, y_1) tendremos

$$f(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2!} f''(c_x) = P(x) + E(x)$$

e integrando

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_1} P(x)\,dx + \int_{x_0}^{x_1} E(x)\,dx$$

Haciendo cada una de las integrales tenemos que

$$\int_{x_0}^{x_1} P(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_1}\left[y_0\frac{x-x_1}{x_0-x_1}dx + y_1\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right]dx = h\,\frac{y_0+y_1}{2}$$

donde $h = x_1 - x_0$.

$$\int_{x_0}^{x_1} E(x)\,dx = \frac{1}{2!}\int_{x_0}^{x_1}(x-x_0)(x-x_1)f''(c_x)\,dx = \frac{f''(c)}{2}\int_{x_0}^{x_1}(x-x_0)(x-x_1)\,dx$$

$$= -\frac{h^3}{12}f''(c)$$

donde hemos usado el teorema del valor medio para integrales. Sea f una función continua en $[a,b]$ y sea g una función integrable que no cambia de signo en $[a,b]$. Entonces existe un c tal que

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

con $a \le c \le b$.

Combinando estos resultados obtenemos la regla del trapezoide

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx = \frac{h}{2}(y_0+y_1) - \frac{h^3}{12}f''(c)$$

donde $h = x_1 - x_0$ y $x_0 \le c \le x_1$.

Ejemplo Aplique la regla del trapezoide para aproximar $\int_1^2 \ln x\,dx$ y encuentre un límite superior para el error. R.- $0{,}3466 \pm 0{,}0834$.

La regla de Simpson

La regla de Simpson es muy similar a la del trapezoide. La diferencia está en que se utiliza un polinomio de segundo grado en lugar de uno de primero. La interpolación con su error serían

$$f(x) = y_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + y_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + y_2 \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{3!} f'''(c_x).$$

La integración de esta relación produce

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_2} \left[y_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + \dots \right] dx + \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{3!} f'''(c_x)\,dx$$

$$= y_0 \frac{h}{3} + y_1 \frac{4}{3} h + y_2 \frac{h}{3} - \frac{h^5}{90} f^{(IV)}(c)$$

de donde la regla de Simpson es

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) - \frac{h^5}{90} f^{(IV)}(c)$$

con $h = x_2 - x_1 = x_1 - x_0$ y $x_0 \leq c \leq x_2$.

Ejemplo Aplique la regla de Simpson para aproximar $\int_1^2 \ln x\,dx$ y encuentre un límite superior para el error. R.- $0{,}3858 \pm 0{,}0021$.

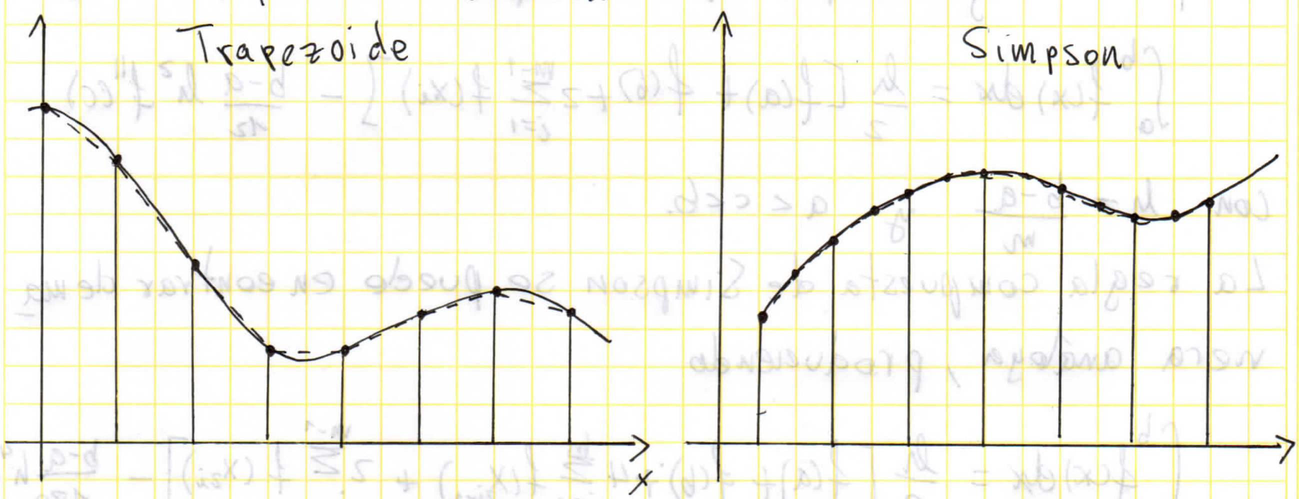
Grado de precisión

El grado de precisión de una integración numérica es el número entero k para el cual todos los polinomios de grado k o menos se integran de manera exacta por el método.

En el caso del trapezoide, ya sea mirando el error $-\frac{h^3}{12} f''(c)$, o sea pensando geométricamente, queda claro que el grado es 1, pues cualquier polinomio de grado 1 o menos será integrado exactamente. Por otra parte, el grado de la regla de Simpson es tres, pues el error es $-\frac{h^5}{90} f^{(IV)}(c)$. La interpretación geométrica es un poco más delicada, pero se debe al hecho de que la integral de una parábola que intersecta una cúbica en tres puntos igualmente separados es la misma que la integral de la cúbica en el mismo intervalo.

Reglas compuestas

Los métodos presentados hasta ahora operan en un solo intervalo. Gracias a que las integrales definidas son aditivas a lo largo de subintervalos, podemos dividir un intervalo en varios subintervalos del mismo ancho, produciendo así las versiones compuestas de los métodos analizados.



La idea es dividir en casillas del mismo ancho el intervalo $[a,b]$:

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{m-1} < x_m = b$$

de manera que $h = x_{i+1} - x_i$ para $i = 0, \dots, m-1$. Para aproximar

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

consideramos

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left(f(x_i) + f(x_{i+1})\right) - \frac{h^3}{12} f''(c_i)$$

para luego sumar ~~en~~ sobre todos los subintervalos:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_i)\right] - \sum_{i=0}^{m-1}\frac{h^3}{12} f''(c_i)$$

De acuerdo al teorema generalizado del valor medio (visto en la sección de diferenciación) podemos escribir que

$$\frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{m-1} f''(c_i) = \frac{h^3}{12} m f''(c)$$

para algún $a < c < b$. Ya que $mh = b-a$ el error queda como

$$\frac{b-a}{12} h^2 f''(c)$$

así que la regla compuesta del trapezoide es

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_i)\right] - \frac{b-a}{12} h^2 f''(c)$$

con $h = \frac{b-a}{m}$ y $a < c < b$.

La regla compuesta de Simpson se puede encontrar de manera análoga, produciendo

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left[f(a)+f(b)+4\sum_{i=1}^{m} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_{2i})\right] - \frac{b-a}{180} h^4 f^{(iv)}(c)$$

con $h = \frac{b-a}{2m}$ y $a < c < b$.

<u>Ejemplo</u> Aproxime $\int_1^2 \ln x\,dx$ usando 4 casillas con el método del trapezoide y el método de Simpson compuestos. R.- $0{,}3837 \pm 0{,}0052$ y $0{,}386292 \pm 0{,}000008$.

<u>Ejemplo</u> Determine el número de casillas para que la regla de Simpson compuesta produzca seis decimales correctos al ~~a~~ aproximar

$$\int_0^\pi \operatorname{sen}^2 x\,dx$$

R.- 37. Ayuda $(\operatorname{sen}^2 x)^{(iv)} = -8\cos 2x$.

Métodos abiertos

La regla del trapezoide y la de Simpson requieren valores al principio y al final del intervalo. Además, es necesario evaluar la función en ambos. Un método alternativo es la llamada regla del punto medio

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx = h\, f(x_0+\tfrac{h}{2}) + \frac{h^3}{24} f''(c)$$

donde $h = x_1 - x_0$ y $x_0 < c < x_1$. Este método requiere una sola evaluación de la función y tiene el error igual a la mitad del error de la regla del trapezoide.

La versión compuesta es

$$\int_a^b f(x)\,dx = h \sum_{i=1}^{m} f(x_i + h/2) + \frac{b-a}{24} h^2 f''(c)$$

donde $h = \frac{b-a}{m}$ y $a < c < b$.

Ejemplo Aproxime $\int_0^1 \frac{\operatorname{sen} x}{x}\,dx$ usando la versión compuesta de la regla del punto medio con $m = 10$. R.- 0,94620858.

Integración de Romberg

La integración de Romberg resulta de aplicar la extrapolación de Richardson al método del trapezoide.

La extrapolación implica utilizar pasos cada vez más pequeños. Concretamente, podemos definir

$$h_1 = b-a$$

$$h_2 = \frac{1}{2}(b-a)$$

$$\vdots$$

$$h_j = \frac{1}{2^{j-1}}(b-a).$$

Sin olvidar que lo que queremos aproximar es $\int_a^b f(x)dx$, podemos definir

$$R_{j1} = \frac{1}{2} R_{j-1,1} + h_j \sum_{i=1}^{2^{j-2}} f(a + (2i-1) h_j) \quad , j=2,3,\ldots$$

con

$$R_{11} = \frac{h_1}{2} (f(a) + f(b))$$

de esta forma, R_{j1} es $R_{j-1,1}$ usando la mitad del tamaño del paso. Si además añadimos la extrapolación de una columna a la siguiente obtenemos que

$$R_{jk} = \frac{4^{k-1} R_{j,k-1} - R_{j-1,k-1}}{4^{k-1} - 1}.$$

Por ejemplo, la segunda columna de la segunda fila sería

$$R_{22} = \frac{2^2 R_{21} - R_{11}}{3},$$

la segunda columna de la tercera fila

$$R_{32} = \frac{2^2 R_{31} - R_{21}}{3}$$

y la tercera columna de la tercera fila

$$R_{33} = \frac{4^2 R_{32} - R_{22}}{4^2 - 1}$$

Queda claro que esto produciría una matriz triangular inferior, donde la mejor estima está dada por el elemento inferior más a la derecha.

El algoritmo sería

$$R_{11} = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$$

for $j = 2, \ldots$

$$h_j = \frac{b-a}{2^{j-1}}$$

$$R_{j1} = \frac{1}{2} R_{j-1,1} + h_j \sum_{i=1}^{2^{j-2}} f(a + (2i-1) h_j)$$

for $k = 2, \ldots, j$

$$R_{jk} = \frac{4^{k-1} R_{j,k-1} - R_{j-1,k-1}}{4^{k-1} - 1}$$

Cuadratura adaptativa

Las fórmulas para integración que vimos hasta este punto presentan algunas limitaciones. Dado que el tamaño del paso de integración es fijo se puede perder exactitud al evaluar integrales de funciones muy cambiantes o, por otro lado, se emplearían demasiados pasos para funciones menos cambiantes. Claramente, si una función es muy cambiante en una región y casi constante en otra no hay manera de atacar ambos problemas al mismo tiempo.

Se puede salvar esta situación usando un método conocido como la cuadratura adaptativa. De acuerdo a la regla del trapezoide tenemos que

$$\int_a^b f(x)\,dx = S_{[a,b]} - \frac{h^3}{12} f''(c_0)$$

para $a < c_0 < b$ y $h = b - a$. Si fijamos $c = \frac{a+b}{2}$ y aplicamos la regla del trapezoide a ambos lados tenemos que

$$\int_a^b f(x)\,dx = S_{[a,c]} - \frac{h^3}{8} \frac{f''(c_1)}{12} + S_{[c,b]} - \frac{h^3}{8} \frac{f''(c_2)}{12}$$

$$= S_{[a,c]} + S_{[c,b]} - \frac{h^3}{4} \frac{f''(c_3)}{12}$$

Si restamos estas dos últimas relaciones tendremos que

$$S[a,b] - S[a,c] - S[c,b] = -\frac{h^3}{4}\frac{f''(c_3)}{12} + h^3\frac{f''(c_0)}{12} \approx \frac{3}{4}h^3\frac{f''(c_3)}{12}$$

De esta relación podemos ver que

$$S[a,b] - (S[a,c] + S[c,b])$$

es aproximadamente tres veces el tamaño del error de

$$S[a,c] + S[c,b]$$

Por tanto, podemos diseñar un algoritmo que verifique que

$$S[a,b] - (S[a,c] + S[c,b])$$

sea menor que un valor de tolerancia. En caso de que no lo sea, subdividimos nuevamente y repetimos el proceso.

El algoritmo para aproximar $\int_a^b f(x)dx$ dentro de una tolerancia TOL es

$c = \frac{a+b}{2}$

$S[a,b] = \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b))$

if $|S[a,b] - S[a,c] - S[c,b]| < 3 \cdot TOL \cdot \frac{b-a}{b_0 - a_0}$

aceptar $S[a,c] + S[c,b]$

else

repetir recursivamente para $[a,c]$ y $[c,b]$.