Diferenciación e integración numéricas

Diferenciación numérica

• Fórmula de diferencias

De la definición de derivada

$$f'(x_0) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

es obvio que para obtener una aproximación a $f'(x_0)$ basta simplemente evaluar

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

para valores pequeños de h.

Nomenclatura: Esta aproximación se conoce como *fórmula de diferencias hacia adelante* si $h > 0$ y como *fórmula de diferencias hacia atrás* si $h < 0$.

Observación: Según el teorema Taylor, el error de aproximación de esta fórmula está acotado por $M|h|/2$, donde M es una cota de $|f''(x)|$ para los valores de x entre x_0 y $x_0 + h$.

Ejemplo: Aproximar la derivada de $\ln x$ en $x_0 = 1.8$ para $h = 0.1$, $h = 0.05$ y $h = 0.01$, y determinar las cotas del error.

• Fórmulas de $n+1$ puntos

Sean $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$, entonces

$$f(x) \approx \sum_{j=0}^{n} f(x_j) L_j(x)$$

donde L_j son los polinomios de Lagrange. Entonces, en los puntos $x_0, x_1, \ldots, x_n$,

$$f'(x_k) \approx \sum_{j=0}^{n} f(x_j) L_j'(x_k),$$

con un margen de error de

$$\frac{M}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n} (x_k - x_j)$$

donde M es una cota de $|f^{(n+1)}(x)|$ para los valores de x entre x_0 y x_n.

• Fórmulas de 3 puntos

Sean x_0, $x_1 = x_0 + h_1$ y $x_2 = x_0 + h_2$, entonces

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{x^2 - (x_1 + x_2)x + x_1 x_2}{h_1 h_2}$$

con lo cual

$$L_0'(x) = \frac{2x - (x_1 + x_2)}{h_1 h_2} = \frac{2x - 2x_0 - (h_1 + h_2)}{h_1 h_2}$$

y análogamente

$$L_1'(x) = \frac{2x - 2x_0 - h_2}{h_1(h_1 - h_2)} \quad \text{y} \quad L_2'(x) = \frac{2x - 2x_0 - h_1}{h_2(h_2 - h_1)},$$

por lo tanto

$$f'(x_0) = -\frac{f(x_0)(h_1 + h_2)}{h_1 h_2} - \frac{f(x_0 + h_1)h_2}{h_1(h_1 - h_2)} - \frac{f(x_0 + h_2)h_1}{h_2(h_2 - h_1)},$$

con un margen de error de $\frac{M|h_1 h_2|}{6}$ donde M es una cota de $|f'''(x)|$ para los valores de x entre los tres puntos (observe que h_1 o h_2 pueden ser negativos).

Fórmula del punto medio de 3 puntos

Si $h_1 = -h$ y $h_2 = h$ (x_0 es el punto central):

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h},$$

con un error de $\frac{Mh^2}{6}$.

Fórmulas de los puntos extremos de 3 puntos

Si $h_1 = h$ y $h_2 = 2h$ (x_0 es el punto extremo izquierdo):

$$f'(x_0) \approx \frac{-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{2h},$$

y si $h_1 = -h$ y $h_2 = -2h$ (x_0 es punto extremo derecho):

$$f'(x_0) \approx \frac{3f(x_0) - 4f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{2h},$$

ambas con un error de $\frac{Mh^2}{3}$.

Ejemplo: Supongamos que se tienen los valores de la tabla para una función $f(x)$. Aproximar $f'(2)$.

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

Observación: En el ejemplo anterior $f(x) = xe^x$. ¿Qué tan buenas fueron las aproximaciones?

Existen fórmulas populares para derivadas con 5 puntos. A mayor número de puntos se espera mayor precisión, pero la creciente cantidad de operaciones puede acarrear un mayor error de redondeo.

• Aproximación de la segunda derivada

De la definición de derivada

$$f''(x_0) \approx \frac{f'(x_0+h) - f'(x_0)}{h},$$

y si se sustituyen

$$f'(x_0+h) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} \quad \text{y} \quad f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0-h)}{h}$$

se obtiene que

$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - 2f(x_0) + f(x_0-h)}{h^2}$$

el cual tiene un margen de error de $\frac{Mh^2}{12}$ donde M es una cota de $|f^{(4)}(x)|$ para los valores de x entre x_0-h y x_0+h.

Ejemplo: En el ejercicio anterior aproximar $f''(2)$ y estimar su error.

Con la misma idea es posible aproximar derivadas de orden superior, el cálculo será menos preciso.

Integración numérica

Sea f una función integrable en un intervalo $[a,b]$ y sean $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$, con lo cual

$$f(x) \approx \sum_{j=0}^{n} f(x_j) L_j(x)$$

donde L_j son los polinomios de Lagrange. Entonces

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b \left[\sum_{j=0}^{n} f(x_j) L_j(x)\right] dx = \sum_{j=0}^{n} \left[f(x_j) \int_a^b L_j(x)\,dx\right].$$

Los métodos siguientes se basan en esta idea, tomando los puntos x_j equidistantes. Se denominan *fórmulas cerradas de $n+1$ puntos de Newton-Cotes*.

- **Regla del punto medio**

Si aplicamos la idea anterior con $n=0$ y $x_0=\frac{a+b}{2}$ (aproximamos f mediante su valor en el punto medio de a y b), se obtiene:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)f\left(\tfrac{a+b}{2}\right),$$

lo cual tiene un error acotado por $\frac{(b-a)^3}{24}M$, donde M es una cota a $|f''(x)|$ para los valores de $x\in[a,b]$.

- **Regla del trapecio**

Aplicando la idea principal con $n=1$, $x_0=a$ y $x_1=b$ (aproximamos la función mediante una recta) se obtiene:

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

lo cual tiene un error acotado por $\frac{(b-a)^3}{12}M$, donde M es una cota a $|f''(x)|$ para $x\in[a,b]$.

- **Regla de Simpson**

Aplicando la idea principal con $n=2$, $x_0=a$, $x_1=\frac{a+b}{2}$ y $x_2=b$ (aproximamos la función mediante una parábola), con lo cual se obtiene:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\frac{f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)}{6},$$

lo cual tiene un error acotado por $\frac{(b-a)^5}{2880}M$, donde M es una cota a $|f^{(4)}(x)|$ para $x \in [a,b]$.

Observación: Dado que la fórmula de error involucra la cuarta derivada, la regla de Simpson proporciona el valor exacto para polinomios de grado tres o inferior.

Ejercicio: Aproximar la integral de alguna de las siguientes y verificar su error teórico:

1. $f(x) = x^3 - 3x + 2$ en $[-1, 3]$

2. $f(x) = \cos x$ en $[0, \frac{2\pi}{3}]$

3. $f(x) = e^x$ en $[0, 2]$

4. $f(x) = \frac{1}{x+1}$ en $[0, 2]$

• Reglas compuestas

Las fórmulas de error involucran el término $(b - a)$, así qua la precisión es menor en intervalos grandes.

Pero sabemos que

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^m f(x)\,dx + \int_m^b f(x)\,dx$$

y más generalmente

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{a=x_0}^{x_1} f(x)\,dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n\text{-}1}}^{b=x_n} f(x)\,dx$$

por lo que una buena idea consiste en dividir el intervalo de integración en subintervalos más pequeños.

Ejercicio: Aproximar la integral elegida en el ejercicio anterior mediante una regla compuesta.

Observación: El error para una regla compuesta se calcula mediante la suma de los errores de cada subintervalo.

El siguiente algoritmo corresponde a la **regla de Simpson compuesta**:

Algoritmo: Regla de Simpson compuesta

Entrada: Valores a, b, entero positivo n, función $f(x)$ o valores $f(x_i)$ correspondientes.

Salida: Valor I que aproxima a $\int_a^b f(x)dx$.

Paso 1: Hacer $h \leftarrow \frac{b-a}{2n}$;

$I_1 \leftarrow 0$;

$I_2 \leftarrow 0$;

$x \leftarrow a + h$.

Paso 2: Mientras $x < b$ hacer

$I_1 \leftarrow I_1 + f(x)$;

$I_2 \leftarrow I_2 + f(x+h)$;

$x \leftarrow x + 2h$.

Paso 3: Hacer $I \leftarrow h[f(a) + 4I_1 + 2I_2 - f(b)]/3$.

Paso 4: Devolver I y terminar.

Tarea 3: Diferenciación e integración numéricas.