UNIDAD IV

4.0 DERIVACIÓN E INTEGRACIÓN NUMÉRICA

- 4.1 DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA
- 4.2 FÓRMULA DE LOS 3 Y 5 PUNTOS
- 4.3 FÓRMULA PARA N PUNTOS

4.1 DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA

1. INTRODUCCIÓN

Diferenciación numérica es una técnica de análisis numérico para producir una estimación del derivado de la función matemática o función subprograma usando valores de la función y quizás del otro conocimiento sobre la función.

Una valoración simple del dos-punto es computar la cuesta de un próximo línea secante a través de los puntos (x,f(x)) y (x+h,f(x+h)). Elegir un número pequeño h, h representa un cambio pequeño adentro x, y puede ser positivo o negativa. La cuesta de esta línea es

La cuesta de esta línea secante diferencia de la cuesta de la línea de la tangente por una cantidad a la cual sea aproximadamente proporcional h. Como h los acercamientos ponen a cero, la cuesta de la línea secante acercamientos la cuesta de la línea de la tangente. Por lo tanto, el verdad derivado de f en x es el límite del valor del cociente de la diferencia mientras que las líneas secantes consiguen cada vez más cerca de ser una línea de la tangente:

2. OBJETIVO

Conceptualizar los métodos de derivación e integración. Comparar los métodos de derivación numérica, formula de 3 y 5 puntos en base a los criterios de eficiencia, precisión y tolerancia.

3. DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA

Una valoración simple del tres-punto es computar la cuesta de una línea secante próxima a través de los puntos (x-h,f(x-h)) y (x+h,f(x+h)). La cuesta de esta línea es más generalmente, la valoración del tres-punto utiliza la línea secante a través de los puntos $(x-h_1,f(x-h_1))$ y $(x+h_2,f(x+h_2))$.

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR EN LÍNEA FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA **ANALISIS NUMERICO**



La cuesta de estas líneas secantes diferencia de la cuesta de la línea de la tangente por una cantidad a la cual sea aproximadamente proporcional h^2 de modo que la valoración del tres-punto sea una aproximación más exacta a la línea de la tangente que la valoración del dos-punto cuando h es pequeño.

A la ecuación anterior se le conoce con el nombre especial en el análisis numérico, se le llama diferencias divididas finitas.

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + 0(h^2)$$

Se puede representar generalmente como:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} + 0(x_{i+1} - x_i)$$

$$f'(x_i) = \frac{\Delta f_i}{l_i} + o(h)$$

Donde al diferencial se le conoce como la primera diferencia hacia adelante y a h se le llama tamaño del paso, esto es, la longitud del intervalo sobre el cual se hace la aproximación.

Se le llama diferencia "hacia adelante "ya que usa los datos(i) e (i+1) para estimar la derivada.

Al termino completo (o sea, la diferencial entre h) se le conoce como primera diferencia dividida finita.

Esta diferencia dividida hacia adelante no es sino una de tantas que se pueden desarrollar mediante la serie de Taylor para la aproximación de derivadas numéricas.

Por ejemplo, las aproximaciones a primeras derivadas, utilizando las diferencias hacia atrás o las diferencias centrales se pueden desarrollar de una manera similar a la de la ecuación 2.

Las primeras usan a, mientras x con sub-índice i+1 que las segundas usan información igualmente espaciada alrededor del punto donde está estimada la derivada.

Las aproximaciones más exactas de la primera derivada se pueden desarrollar incluyendo en la serie de Taylor términos de orden más alto.

Finalmente, todas las versiones anteriores se pueden desarrollar para derivadas de segundo orden, tercer orden y órdenes superiores. Las siguientes secciones analizan brevemente estos casos, ilustrando como se deriva cada una de ellos. Concretamente tenemos lo siguiente:

Diferenciación Numérica

La derivada de la función f en x_0 es

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

Esta fórmula indica una manera obvia de generar una aproximación de f'(x):

basta calcular $\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$, para valores pequeños de h.

Aunque esto parezca evidente, no es muy útil, debido al error por redondeo. Sin embargo, ciertamente es un punto de partida.

Para aproximar $f'(x_0)$ se supone primero que $x_0 \in [a,b]$, donde $f \in \mathbb{C}^2[a,b]$, y que $x_1 = x_0 + h$ para alguna $h \neq 0$ que es lo bastante pequeña para asegurarnos de que $x_1 \in [a,b]$. Se construye el primer polinomio de Lagrange $P_{0,1}(x)$ para f determinada por x_0 y x_1 con su termino de error:

$$f(x) = P_{0,1}(x) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!} f''(\xi(x))$$

$$= \frac{f(x_0)(x - x_0 - h)}{-h} + \frac{f(x_0 + h)(x - x_0)}{h} + \frac{(x - x_0)(x - x_0 - h)}{2} f''(\xi(x)),$$

para alguna $\xi(x)$ en [a,b]. Al diferenciar se obtiene,

$$f'(x) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - D_x \left[\frac{(x - x_0)(x - x_0 - h)}{2} f''(\xi(x)) \right]$$

$$f'(x) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{2(x - x_0) - h}{2} f''(\xi(x)) + \frac{(x - x_0)(x - x_0 - h)}{2} D_x(f''(\xi(x)))$$

De modo que

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

Un problema de esta fórmula rádica en que se carece de información sobre $D_x f''(\xi(x))$, por lo cual no se puede estimar el error de truncamiento . Pero cuando x es x_0 el coeficiente de $D_x f''(\xi(x))$ será cero y la fórmula se simplifica como sigue

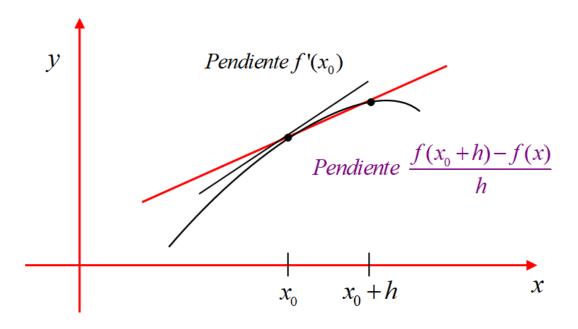
$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2}f''(\xi(x)).$$

Entonces tenemos que:

Para valores pequeños de h, se puede utilizar el cociente de la diferencia $[f(x_0 + h) - f(x_0)]/h$ para aproximar f'(x) con un error acotado por M|h|/2, donde M es una cota en |f''(x)| para $x \in [a,b]$.

A esta fórmula se le llama <u>fórmula de la diferencia progresiva</u> si h > 0 (ver figura) y fórmula de diferencia regresiva si h < 0.

Grafica



EJEMPLO 1. Sean $f(x) = \ln(x)$ y $x_0 = 1.8$. La fórmula de la diferencia progresiva $\frac{f(1.8+h) - f(1.8)}{h},$

sirve para aproximar f'(1.8) con el error

$$\frac{\left|hf''(\xi)\right|}{2} = \frac{\left|h\right|}{2\xi^2} \le \frac{\left|h\right|}{2(1.8)^2}$$
, donde $1.8 < \xi < 1.8 + h$.

Los resultados de la tabla siguiente se producen cuando h = 0.1, 0.01 y 0.001.

h	f(1.8+h)	$\frac{f(1.8+h)-f(1.8)}{h}$	$\frac{ h }{2(1.8)^2}$
0.1	0.64185389	0.5406722	0.0154321
0.01	0.59332685	0.5540180	0.0015432
0.001	0.58834207	0.5554013	0.0001543

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR EN LÍNEA FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA ANALISIS NUMERICO

Según el ejemplo anterior se dice que :

Ya que f(x) = 1/X,

El valor exacto de f'(1.8) es 0.5555

Por lo que se concluye que las cotas del error son las adecuadas para la función del ejemplo anterior.

4.2 – 4.3 FÓRMULA DE LOS 3 Y 5 PUNTOS Y FÓRMULA PARA N PUNTOS

INTRODUCCIÓN.

Consideremos una función f(x) de la cual se conoce un conjunto discreto de valores (x_0,y_0) , $(x_1,y_1),....(x_n,y_n)$. El problema que vamos a abordar es el de calcular la derivada de la función en un punto x que en principio no tiene por qué pertenecer a los datos de que disponemos. La forma más sencilla de resolver el problema de la diferenciación numérica consiste en estimar la derivada utilizando fórmulas obtenidas mediante la aproximación de Taylor, que se denominan fórmulas de diferencias finitas.

Básicamente, en una solución por diferencias finitas, las derivadas son reemplazadas por aproximaciones en diferencias finitas, convirtiendo entonces un problema de ecuaciones diferenciales en un problema algebraico que fácilmente se puede resolver por medios comunes.

Es importante mencionar que los errores que tengan los datos, por ejemplo los cometidos en la adquisición de los mismos o los debidos al redondeo aumentan en el proceso de diferenciación.

OBJETIVO.

En los objetivos para esta clase tenemos: El ccomparar los métodos de derivación numérica, formula de n puntos en base a los criterios de eficiencia, precisión y tolerancia. Analizar una muestra de datos empleando cada uno de los métodos de derivación e integración.

FÓRMULA DE LOS 3 Y 5 PUNTOS Y FÓRMULA PARA N PUNTOS.

Fórmula de n + 1 puntos para aproximar f'(x)

Para obtener fórmulas de aproximación más generales, se supone que $\{x_0, x_1, ..., x_n\}$ son n+1 números distintos en algún intervalo I y que $f \in C^{n+1}(I)$.

Del teorema 3.3 sobre la definición del polinomio de Lagrange se

tiene:
$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L_k(x) + \frac{(x - x_0)...(x - x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x))$$

para alguna $\xi(x)$ en I, donde $L_k(x)$ denota el k-ésimo polinomio de coeficiente de Lagrange para f en $x_0, x_1, ..., x_n$.

Al diferenciar la expresión anterior se obtiene:

$$f'(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L'_k(x) + D_x \left[\frac{(x - x_0)...(x - x_n)}{(n+1)!} \right] f^{(n+1)}(\xi(x))$$

$$+ \frac{(x - x_0)...(x - x_n)}{(n+1)!} D_x \left[f^{(n+1)}(\xi(x)) \right]$$

Una vez más se tiene el problema al estimar el error de truncamiento, a menos que x sea uno de los x_j . En este caso, el término que contiene $D_x \lceil f^{(n+1)}(\xi(x)) \rceil$ es cero, entonces la fórmula queda así:

$$f'(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L'_k(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} (x_j - x_k)$$

Esta ecuación recibe el nombre de **fórmula de** (n+1) **puntos** para aproximar $f'(x_j)$.

Al diferenciar la expresión anterior se obtiene:

$$f'(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L'_k(x) + D_x \left[\frac{(x - x_0)...(x - x_n)}{(n+1)!} \right] f^{(n+1)}(\xi(x))$$

$$(x - x_0)...(x - x_n) = \begin{bmatrix} c^{(n+1)} c(x) \\ c(x) \end{bmatrix}$$

En términos generales, la utilización de más puntos de evaluación en la fórmula de (n+1) puntos, produce una mayor exactitud, aunque esto no conviene dada la cantidad de evaluaciones y el aumento en el error de redondeo.

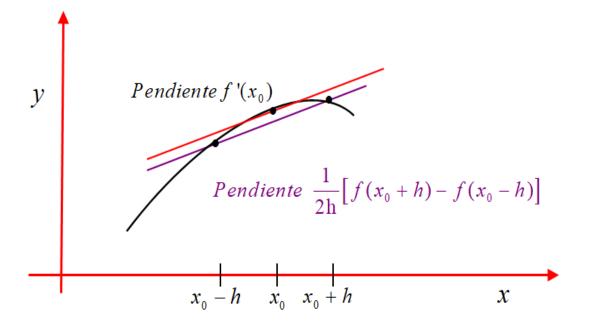
Las fórmulas más comunes son la que utilizan **tres y cinco** puntos de evaluación.

Fórmula de los 3 puntos para puntos no equidistantes

$$f'(x_{j}) = f(x_{0}) \left[\frac{2x_{j} - x_{1} - x_{2}}{(x_{0} - x_{1})(x_{0} - x_{2})} \right] + f(x_{1}) \left[\frac{2x_{j} - x_{0} - x_{2}}{(x_{1} - x_{0})(x_{1} - x_{2})} \right]$$

$$+ f(x_{2}) \left[\frac{2x_{j} - x_{0} - x_{1}}{(x_{2} - x_{0})(x_{2} - x_{1})} \right] + \frac{1}{6} f^{(3)}(\xi_{j}) \prod_{\substack{k=0\\k \neq j}}^{2} (x_{j} - x_{k})$$

para cada j = 0,1,2, donde ξ_j depende de x_j .



En la ecuación 4.4 la aproximación es útil cerca de los extremos del intervalo, ya que posiblemente no se tenga información de f fuera del intervalo.

Fórmulas de 5 puntos

Son las que evalúan la función en 5 puntos (ecuaciones 4.6 y 4.7), y cuyo término del error tiene la forma $O(h^4)$.

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} \left[f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h) \right] + \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi),$$
(4.6)

donde ξ se encuentra entre x_0 - 2h y x_0 + 2h.

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} \begin{bmatrix} -25f(x_0) + 48f(x_0 + h) - 36f(x_0 + 2h) \\ +16f(x_0 + 3h) - 3f(x_0 + 4h) \end{bmatrix} + \frac{h^4}{5} f^{(5)}(\xi),$$
(4.7)

donde ξ se encuentra entre x_0 y $x_0 + 4h$.

Las aproximaciones del extremo izquierdo pueden obtenerse aplicando la fórmula (4.7) con h > 0, y las aproximaciones del extremo derecho, con h < 0.

Por lo tanto, se tiene que

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} \begin{bmatrix} -25f(x_0) + 48f(x_0 + h) - 36f(x_0 + 2h) \\ +16f(x_0 + 3h) - 3f(x_0 + 4h) \end{bmatrix} + \frac{h^4}{5} f^{(5)}(\xi),$$
(4.7)

donde ξ se encuentra entre x_0 y $x_0 + 4h$.

Las aproximaciones del extremo izquierdo pueden obtenerse aplicando la fórmula (4.7) con h > 0, y las aproximaciones del extremo derecho, con h < 0.

EJEMPLO 2.

Los valores de $f(x) = xe^x$, son los siguientes:

X	f(x)
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

Ya que $f'(x) = (x+1)e^x$, se tiene f'(2) = 22.167168.

Al aproximar f'(x) mediante las fórmulas de tres y cinco puntos se obtiene los siguientes resultados:

Fórmulas de tres puntos

Usando (4.4) con h = 0.1:

$$\frac{1}{0.2} \left[-3f(2.0) + 4f(2.1) - f(2.2) \right] = \underline{22.032310}$$

Usando (4.4) con h = -0.1:

$$\frac{1}{-0.2} \left[-3f(2.0) + 4f(1.9) - f(1.8) \right] = \underline{22.054525}$$

Usando (4.5) con
$$h = 0.1$$
: $\frac{1}{0.2} [f(2.1) - f(1.9)] = \underline{22.228790}$

Usando (4.5) con
$$h = 0.2$$
: $\frac{1}{0.4} [f(2.2) - f(1.8)] = \underline{22.414163}$

Los errores en las fórmulas son aproximadamente

$$1.35 \times 10^{-1}$$
, 1.13×10^{-1} , -6.16×10^{-2} , y -2.47×10^{-1} respectivamente.

Fórmula de 5 puntos

Al utilizar (4.6) con h = 0.1 (la única fórmula de cinco puntos aplicable):

$$f'(2.0) = \frac{1}{1.2} [f(1.8) - 8f(1.9) + 8f(2.1) - f(2.2)] = 22.166996.$$

El error de esta fórmula es aproximadamente 1.69×10^{-4} .

La fórmula de cinco puntos da el mejor resultado. Además,

- el error de la ecuación (4.5) con h = 0.1 es: (-6.16×10⁻²) tiene aproximadamente la mitad de la magnitud de:
- el error de la ecuación (4.4) con $h = 0.1 (1.35 \times 10^{-1})$
- el error de la ecuación (4.4) con $h = -0.1 (1.13 \times 10^{-1})$.

Método de aproximación a la segunda derivada

Se basa en el desarrollo de una función f en un tercer polinomio de Taylor alrededor de un punto x_0 y se evalua en $x_0 + h$ y $x_0 - h$.

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2} \left[f(x_0 - h) - 2f(x_0) + f(x_0 + h) \right] - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi),$$
 (4.9) para alguna ξ , donde $x_0 - h < \xi < x_0 + h$.

EJEMPLO 3.

Con los datos del ejemplo 2, para $f(x) = xe^x$ se puede usar la ecuación (4.9) para aproximar f "(2.0).

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR EN LÍNEA FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA ANALISIS NUMERICO

Ya que $f''(x) = (x+2)e^x$ el valor exacto será f''(2.0) = 29.556224.

Al emplear (4.9) con h = 0.1 se obtiene:

$$f''(2.0) = \frac{1}{0.01} [f(1.9) - 2f(2.0) + f(2.1)] = \underline{29.593200}.$$

Al emplear (4.9) con h = 0.2 se obtiene:

$$f''(2.0) = \frac{1}{0.04} [f(1.8) - 2f(2.0) + f(2.2)] = \underline{29.704275}.$$

Los errores son aproximadamente -3.70 \times 10⁻² y -1.48 \times 10⁻¹, respectivamente.

Ejemplo 4:

Utilizar la siguiente tabla para aproximar f'(0.9) donde f(x)=sen(x), el valor verdadero es cos 0.9 = 0.62161.

X	Sen x	X	Sen x
0.800	0.71736	0.901	0.78395
0.850	0.75128	0.902	0.78457
0.880	0.77074	0.905	0.78643
0.890	0.77707	0.910	0.78950
0.895	0.78021	0.920	0.79560
0.898	0.78208	0.950	0.81342
0.899	0.78270	1.000	0.84147

Al aplicar la fórmula: f(0.9) = (f(0.9+h) - f(0.9-h))/2h

Con diferentes valores de h, obtenemos las aproximaciones de la siguiente tabla:

h	Aprox a f'(0.9)	Error
0.001	0.62500	0.00339
0.002	0.62550	0.00089
0.005	0.62200	0.00039
0.010	0.62150	-0.00011
0.020	0.62150	-0.00011
0.050	0.62140	-0.00021
0.100	0.62055	-0.00106

La elección optima de h, se encuentra entre 0.0005 y 0.5

Conclusiones:

- Este método de aproximación, la diferenciación numérica es <u>inestable</u>, porque los valores pequeños de h, necesarios para disminuir el error de truncamiento también hacen crecer el error de redondeo.
- Aunque solo se ha analizado los problemas del error de redondeo en la fórmula de tres puntos, también presentes en el resto de fórmulas, debido a la necesidad de dividir una potencia de h.

4. ENLACES SUGERIDOS

https://es.wikipedia.org/wiki/Derivaci%C3%B3n num%C3%A9rica

https://metodosnumericosisc.wikispaces.com/UNIDAD+4.-

+Diferenciaci%C3%B3n+e+integraci%C3%B3n+num%C3%A9ricas.

5. BIBLIOGRAFÍA

- Análisis Numérico, Richard L. Burden/J. Douglas Faires, Editorial Thomson Learning Inc.
- Métodos Numéricos Con SCILAB, Héctor Manuel Mora Escobar, Abril 2010

6. GLOSARIO

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR EN LÍNEA FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA ANALISIS NUMERICO

7. PREGUNTAS DE AUTOEVALUACIÓN

- 1. ¿Qué es la Diferenciación numérica?
- 2. ¿Cuál es su fórmula?
- 3. Enumere a quien corresponden las siguientes formulas:
- 4. ¿Qué otro criterio se debe tomar en cuenta para las formulas anteriores?