DERIVACIÓN E INTEGRACIÓN NUMÉRICA.

Introducción.

Con frecuencia es necesario derivar o integrar una función, sin embargo, puede ocurrir que la función en términos de x no se conozca y solo se tenga una tabulación de valores que definan la función. En el caso de la integración de una función, aun cuando se conoce la función, no es fácil programar a las computadoras para obtener dicha integral de manera analítica. Para esto se utilizan métodos numéricos de derivación e integración.

Derivación numérica.

Una gran cantidad de fenómenos físicos y de problemas de ingeniería están descritos mediante ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales, de ahí la importancia de la derivación numérica.

Derivadas de datos.

En general se pueden obtener aproximaciones numéricas de la derivada de una función en un punto derivando alguno de los polinomios interpolantes, por ejemplo el de Lagrange, esto cuando solo se conoce una tabla de datos de dicha función.

Algoritmo.

Suponiendo que $x_0, x_1, \ldots, x_n$ son $n+1$ puntos en un intervalo I , y que $f(x) \in C^{n+1}(I)$, en donde $C^{n+1}(I)$ representa un conjunto de constantes dentro del intervalo I . Si $P(x) = \sum_{k=0}^{N} f(x_k) L_k(x)$ y considerando el polinomio interpolador de Lagrange se tiene:

$$f(x) = P(x) + \frac{(x - x_0)\ldots(x - x_N)}{(n+1)!} f^{N+1}(\varepsilon(x)) \ldots (1)$$

Para alguna $\varepsilon(x)\in I$. Derivando esta expresión y evaluando en algún punto x_j (de los $N+1$ puntos x_i) se obtienen:

$$f^{'}(x_j)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)L_k^{'}(x)+\frac{f^{n+1}(\varepsilon(x_j))}{(n+1)!}\prod_{k=0;k\neq j}^{n}(x_j-x_k)\ldots(2)$$

Esta ecuación se conoce como *fórmula de los* $n+1$ *puntos* para aproximar $f^{'}(x_j)$, esta resulta ser muy compleja por lo que se definen fórmulas para tres y cinco puntos. Suponiendo que los x_i son espaciados con un $\Delta x = cte$, se tiene que $x_1 = x_0+\Delta x, x_2 = x_0+2\Delta x,\ldots, x_n = x_0+n\Delta x$ con $\Delta x\neq 0$. Con tres datos $x_j = x_0, x_1, x_2$ igualmente espaciados y utilizando la expresión (2) se obtiene la *fórmula para tres puntos*:

$$f^{'}(x_0)=\frac{1}{h}\left[-\frac{3}{2}f(x_0)+2f(x_1)-\frac{1}{2}f(x_2)\right]\ldots(3)$$

$$f^{'}(x_1)=\frac{1}{h}\left[-\frac{1}{2}f(x_0)+\frac{1}{2}f(x_2)\right]\ldots(4)$$

$$f^{'}(x_2)=\frac{1}{h}\left[\frac{1}{2}f(x_0)-2f(x_1)+\frac{3}{2}f(x_2)\right]\ldots(5)$$

Ahora con cinco datos $x_j = x_0, x_1, x_2, x_3, x_4$ igualmente espaciados y utilizando la expresión V.2 se obtiene la *fórmula para cinco puntos*:

$$f^{'}(x_2)=\frac{1}{12h}\left[f(x_0)-8f(x_1)+8f(x_3)-f(x_4)\right]\ldots(6)$$

Ejemplo.

A partir de la siguiente tabla calcular la derivada $f^{'}(0.05)$:

x	$f(x)=e^x$
0.00	1.000000000
0.01	1.010050167
0.02	1.020201340
0.03	1.030454534
0.04	1.040810774
0.05	1.051271096
0.06	1.061836547
0.07	1.072508181
0.08	1.083287068
0.09	1.094174284

Para calcular $f'(0.05)$ utilizando la ecuación (6) se tiene:

$$x_0 = 0.03, x_1 = 0.04, x_2 = 0.05, x_3 = 0.06, x_4 = 0.07$$

Como $\Delta x = 0.01$ se tiene:

$$f'(0.05) \approx \frac{1}{12 * 0.01}\left[f(0.03) - 8f(0.04) + 8f(0.06) - f(0.07)\right] = 1.0512710960256$$

Método con serie de Taylor.

Las aproximaciones por diferencias son importantes en la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales, pues se utiliza para evaluar las derivadas de una función por medio de los valores dados en algunos puntos.

Algoritmo.

Para una derivada de orden n, el número mínimo de datos que se necesita para aproximar la derivada por medio de diferencias finitas es $n+1$.

La notación que se utilizará en el desarrollo de la aproximación por diferencias será:

$$\begin{aligned} f_{i+1} &= f(x_{i+1}) \\ f_i &= f(x_i) \\ f_{i-1} &= f(x_{i-1}) \\ x_{i+1} &= x_i + \Delta x \\ x_{i-1} &= x_i - \Delta x \\ f_i' &= f'(x_i) \end{aligned}$$

Los valores de f en todos los puntos distintos de x_i se desarrollan en una serie de Taylor. El desarrollo de Taylor de f_{i+1} alrededor de x_i es:

$$f_{i+1} = f_i + \frac{\Delta x}{1!} f_i' + \frac{\Delta x^2}{2!} f_i'' + \frac{\Delta x^3}{3!} f_i''' + \cdots + \frac{\Delta x^n}{n!} f_i^n \ldots(7)$$

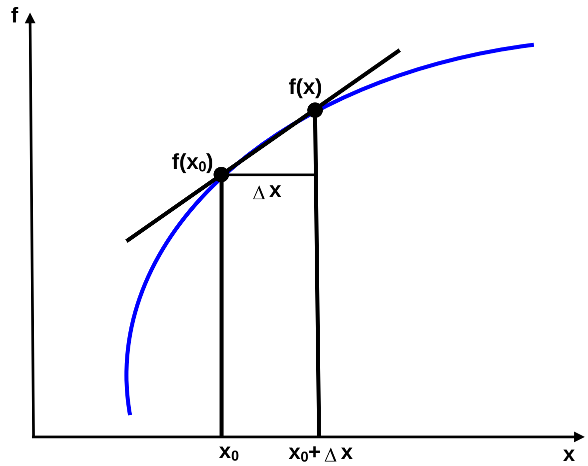
Entonces para la primera derivada despejando f_i' se tiene:

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} - \frac{1}{2!}\Delta x f_i'' - \frac{1}{3!}\Delta x^2 f_i''' - \cdots - \frac{1}{n!}\Delta x^{n-1} f_i^n \ldots(8)$$

Si después del primer término se trunca la serie se tiene la ecuación que permite obtener la aproximación por diferencias hacia adelante, comúnmente conocidas como diferencias progresivas:

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + O(\Delta x) \ldots (9)$$

Donde $O(\Delta x) = -\frac{1}{2}\Delta x f_i''$ y representa el error debido al truncamiento de la serie, este es aproximadamente proporcional al intervalo Δx. Gráficamente la aproximación progresiva se muestra en la figura 1.



Aproximación Progresiva.

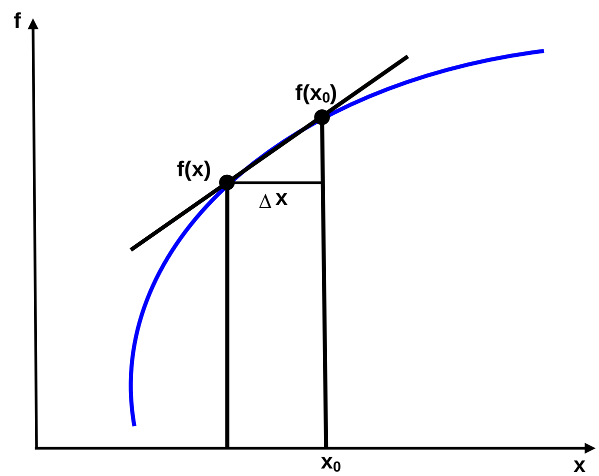
El desarrollo de Taylor de f_{i-1} alrededor de x_i es:

$$f_{i-1} = f_i - \frac{\Delta x}{1!} f_i' + \frac{\Delta x^2}{2!} f_i'' - \frac{\Delta x^3}{3!} f_i''' + \cdots + \frac{\Delta x^n}{n!} f_i^n \ldots (10)$$

Despejando f_i' y truncando la serie hasta el primer término se tiene la expresión para aproximar la derivada por medio de diferencias hacia atrás o regresivas:

$$f_i' = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x) \ldots (11)$$

Donde $O(\Delta x) = \frac{1}{2}\Delta x f_i''$ y representa el error debido al truncamiento de la serie. Gráficamente la aproximación regresiva se muestra en la figura 2.



Aproximación Regresiva.

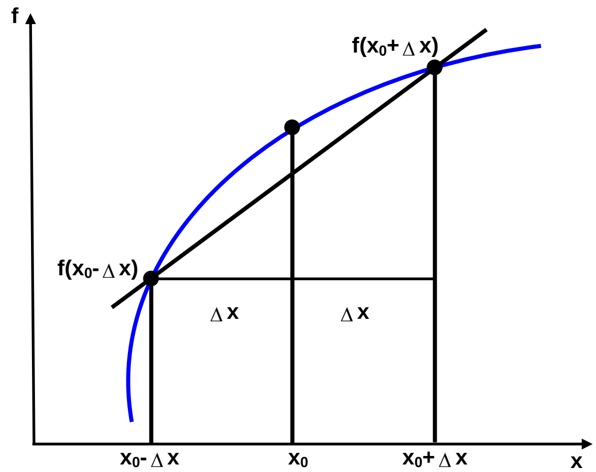
Utilizando los desarrollos de Taylor para f_{i+1} y f_{i-1} alrededor de x_i se obtiene la tercer expresión para aproximar una derivada por medio de diferencias centrales, restando el desarrollo de f_{i-1} al desarrollo de f_{i+1} se tiene:

$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2\Delta x f_i^{'} + \frac{\Delta x^3}{3!} f_i^{'''} + \cdots + \frac{\Delta x^n}{n!} f_i^{n} \ldots(12)$$

Despejando $f_i^{'}$ y truncando la serie hasta el primer término se tiene la expresión para aproximar la derivada por medio de diferencias centrales:

$$f_i^{'} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + O\left(\Delta x^2\right) \ldots(13)$$

Donde $O\left(\Delta x^2\right) = -\frac{1}{6}\Delta x^2 f_i^{'''}$ y representa el error debido al truncamiento de la serie, debido a la cancelación del término $f^{''}$ el error de la aproximación por diferencias centrales es proporcional a Δx^2 en vez de Δx. Al decrecer Δx, el error decrece más rápido que en las otras dos aproximaciones, por lo que las diferencias centrales representan la mejor aproximación. Gráficamente la aproximación central se muestra en la figura 3.



Aproximación Central.

Ejemplo.
Calcular la derivada de la función $y = e^{2x}$ en el punto 1, considerando un $\Delta t = 0.01$ utilizando diferencias centrales, despreciar el error de truncamiento.

$$f_i^{'} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} = \frac{e_{i+1}^{2(1.01)} - e_{i-1}^{2(0.99)}}{2(0.01)} = 14.7790975$$

La derivada analítica de $y = e^{2x}$ es $y' = 2e^{2x}$, evaluando en 1 dicha derivada se tiene $y' = 14.7781122$.

Derivada con spline cúbico.

Además de su uso como método de interpolación, el spline cúbico puede utilizarse para encontrar derivadas e integrales.

Algoritmo.
Como el spline cúbico se aproxima a $f(x)$ como un polinomio cúbico, se puede escribir para el intervalo $x_i \le x \le x_{i+1}$:

$$f(x) = a_i(x-x_i)^3 + b_i(x-x_i)^2 + c_i(x-x_i) + d_i \ldots(14)$$

Donde los coeficientes se calculan con las ecuaciones vistas en el tema de interpolación numérica.

$$a_i = \frac{(S_{i+1} - S_i)}{6(x_{i+1} - x_i)} \ldots(15)$$

$$b_i = \frac{S_i}{2} \ldots(16)$$

$$c_i = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} - \frac{2(x_{i+1} - x_i)S_i + (x_{i+1} - x_i)S_{i+1}}{6} \ldots(17)$$

$$d_i = f(x_i) \ldots(18)$$

Por lo que la aproximación de las primeras y segundas derivadas es directa; se estiman estos como los valores de las derivadas del polinomio cúbico:

$$f(x)' \doteq 3a_i(x-x_i)^2 + 2b_i(x-x_i) + c_i \ldots(19)$$

$$f(x)'' \doteq 6a_i(x-x_i) + 2b_i \ldots(20)$$

En los $n+1$ puntos x_i donde se conoce la función y el spline cúbico coincide con $f(x)$, estas fórmulas son particularmente sencillas:

$$f(x)' \doteq c_i \ldots(21a)$$

$$f(x)'' \doteq 2b_i \ldots(21b)$$

El spline cúbico no es útil para aproximar derivadas de un orden más elevado que el segundo, pues sería necesario un grado más elevado de la función dada por el spline.

Ejemplo.
Calcular la derivada de $f(x) = sen\,\pi x$ sobre el intervalo $0 \le x \le 1$ utilizando un spline cúbico que se ajusta en $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ y 1.0:

i	x	$f(x)$
1	0.00	0.0000
2	0.25	0.7071
3	0.50	1.0000
4	0.75	0.7071

5	1.00	0.0000

Ejemplo Derivada con Spline Cúbico.

Utilizando la condición 1 de los extremos $S_1 = 0$ y $S_5 = 0$, en la siguiente tabla se muestran los resultados obtenidos por medio del spline cúbico:

i	x	S_i	a_i	b_i	c_i	d_i
1	0.00	0.0000	-4.8960	0.0000	3.1340	0.0000
2	0.25	-7.3440	-2.0288	-3.6720	2.2164	0.7071
3	0.50	-10.3872	2.0288	-5.1936	0.0000	1.0000
4	0.75	-7.3440	4.8960	-3.6720	-2.2164	0.7071

Resultados Derivada con Spline Cúbico.

Con estos datos se pueden calcular las derivadas, obteniendo:

x	$f'(x)$	$Exacta$	$Error$	$f''(x)$	$Exacta$	$Error$
0.25	2.2164	2.2214	0.005	-7.344	-6.979	0.365
0.50	0.0000	0.0000	0.000	-10.387	-9.870	0.517
0.75	-2.2164	-2.2214	0.005	-7.344	-6.979	0.365

Tabla Derivadas y Error.

Integración numérica.

Los métodos de integración numérica se utilizan para integrar funciones, ya sea de forma analítica o por medio de una tabla dada. Estos métodos se obtienen al integrar los polinomios de interpolación, como resultado de esto las distintas fórmulas de interpolación darán diferentes métodos de integración.

Fórmulas de Newton – Cotes.

Se basan en las fórmulas de interpolación con puntos de separación uniforme y se deducen al integrar las fórmulas de interpolación de Newton así como la de interpolación de Lagrange. Y se subdividen en: tipo cerrado y tipo abierto.

Regla del trapecio.

Este método se obtiene de integrar la fórmula de interpolación lineal vista en el capítulo correspondiente:

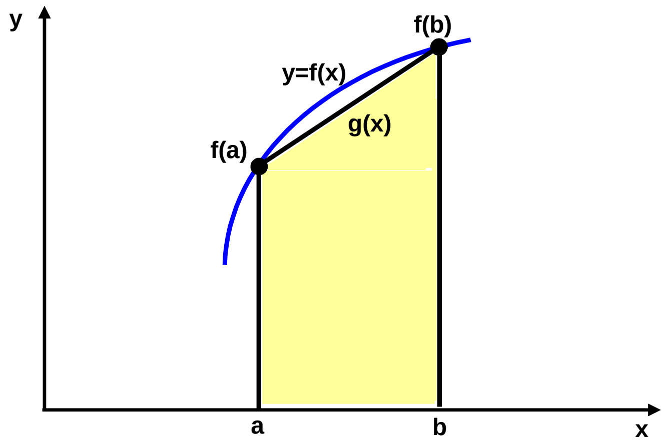
$$g(x) = \frac{b-x}{b-a} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b)$$

Algoritmo.

Dicha integral que da como:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right] + E \ldots (22)$$

Donde E representa el error. En la figura se puede ver la regla del trapecio de forma gráfica:



Regla del Trapecio.

La recta $g(x)$ es la recta de interpolación, mientras que el área sombreada por debajo de esta es el resultado de la integral obtenida con la regla del trapecio, como el área por debajo de la curva $f(x)$ representa la integral exacta el error esta dado por el área entre $g(x)$ y $f(x)$.

La regla se puede extender a varios intervalos y se puede aplicar N veces al caso de N intervalos con una separación uniforme h para así obtener la regla extendida del trapecio:

$$I = \int_a^b f(x) = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{j=1}^{N-1} f(a+jh) + f(b)\right] + E \ldots (23)$$

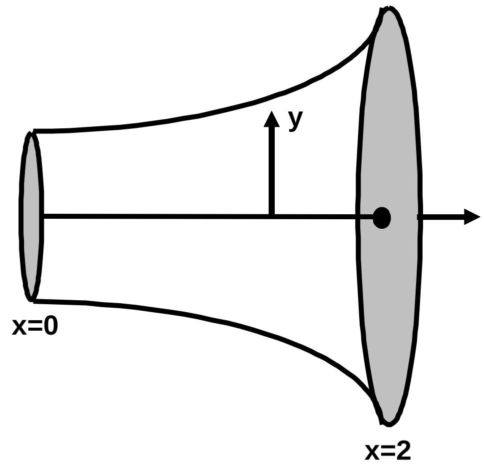
Donde $h = {(b-a)}/{N}$. La ecuación anterior se puede escribir en la siguiente forma:

$$I = \frac{h}{2}\left(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{N-1} + f_N\right) + E \ldots (24)$$

En donde $f_0 = f(a)$, $f_1 = f(a+h)$ y $f_i = f(a+ih)$.

Ejemplo.

El cuerpo de revolución mostrado en la figura se obtiene después de girar la curva $y = 1 + \left({x}/{2}\right)^2$ en el intervalo $0 \le x \le 2$ alrededor del eje x. Calcular el volumen utilizando la regla extendida del trapecio con $N = 2$ y 4. Considerar que el valor exacto es 11.7286 u^3.



Ejemplo Regla del Trapecio.

El volumen está dado por $I = \int_0^2 f(x)dx = \int_0^2 \pi\left(1+\left(\frac{x}{2}\right)^2\right)^2 dx$

Para $N = 2$ $h = \frac{(2-0)}{2} = 1$

$$I = \frac{1}{2}\left[f(0)+2f(1)+f(2)\right] = 0.5\pi\left[1+2(1.5625)+4\right] = 12.7627u^3$$

Para $N = 4$ $h = \frac{(2-0)}{4} = 0.5$

$$I = \frac{0.5}{2}\left[f(0)+2f(0.5)+2f(1.5)+f(2)\right] = 11.9895u^3$$

Se observa que al aumentar el valor de N, el cálculo comienza a aproximarse al valor de la integral analítica, con $N = 128$ el resultado obtenido es $11.7288u^3$.

Regla de Simpson 1/3.
Esta regla es para una cuadrática integrada en dos intervalos Δx de ancho uniforme.

Algoritmo.
La fórmula es:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(a)+4f(\bar{x})+f(b)\right]+E \ldots(25)$$

Donde $h = {(b-a)}/{2}$ y $\bar{x} = {(a+b)}/{2}$, el error se anula si $f(x)$ es un polinomio de orden menor o igual que 3.

La regla extendida de Simpson 1/3 se aplica a un dominio dividido en un número par de intervalos n y se escribe:

$$I = \frac{h}{3}\left[f(a) + 4\sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih) + 2\sum_{i=2}^{n-2} f(a+ih) + f(b)\right] + E \ldots\text{V.26}$$

Donde $h = {(b-a)}/{N}$; y la primera suma es únicamente sobre las i impares y la segunda es sobre las i pares, esta ecuación se puede escribir también como:

$$I = \frac{h}{3}\left[f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n\right] + E \ldots\text{V.27}$$

Ejemplo.
Calcular el volumen del ejemplo anterior utilizando la regla extendida de Simpson 1/3 con $N = 2$ y 4. Considerar que el valor exacto es 11.7286 u^3.

El volumen está dado por $I = \int_0^2 f(x)dx = \int_0^2 \pi\left(1 + \left(\frac{x}{2}\right)^2\right)^2 dx$

Para $N = 2$ $h = \frac{(2-0)}{2} = 1$

$$I = \frac{1}{3}\left[f(0) + 4f(1) + f(2)\right] = \frac{1}{3}\pi\left[1 + 4\left(1.25^2\right) + 2^2\right] = 11.7809u^3$$

Para $N = 4$ $h = \frac{(2-0)}{4} = 0.5$

$$I = \frac{0.5}{3}\left[f(0) + 4f(0.5) + 2f(1) + 4f(1.5) + f(2)\right] = 11.7318u^3$$

Se observa que al aumentar el valor de N, el cálculo comienza a aproximarse al valor de la integral analítica, lo hace con mayor rapidez que la regla del trapecio, con $N = 16$ el resultado obtenido es exacto $11.7286u^3$.

Regla de Simpson 3/8.
La regla de Simpson 3/8 se obtiene de integrar un polinomio de interpolación cúbico.

Algoritmo.

Para un dominio $[a,b]$ dividido en tres intervalos se tiene:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \frac{3}{8}h\left[f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3\right] + E \ldots(28)$$

Donde $h = {(b-a)}/{3}$, $f_i = f(a+ih)$.

Integración con Spline Cúbico.

Para aproximar la integral de $f(x)$ sobre los n intervalos en donde $f(x)$ se ajusta mediante el spline cúbico se hace de manera directa.

Algoritmo.

La integral se obtiene mediante la siguiente expresión:

$$\int_{x_1}^{x_{n+1}} f(x)dx = \int_{x_1}^{x_{n+1}} P_3(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \frac{a_i}{4}(x-x_i)^4 + \frac{b_i}{3}(x-x_i)^3 + \frac{c_i}{2}(x-x_i)^2 + d_i(x-x_i)\Big|_{x_i}^{x_{i+1}} \ldots(29)$$

Que evaluada en los límites de integración se reduce a:

$$\sum_{i=1}^{n}\left[\frac{a_i}{4}(x_{i+1}-x_i)^4 + \frac{b_i}{3}(x_{i+1}-x_i)^3 + \frac{c_i}{2}(x_{i+1}-x_i)^2 + d_i(x_{i+1}-x_i)\right] \ldots(30)$$