Unidad IV: Diferenciación e integración numérica

4.1 Diferenciación numérica

El cálculo de la derivada de una función puede ser un proceso "difícil" ya sea por lo complicado de la definición analítica de la función o por que esta se conoce únicamente en un número discreto de puntos. (Este es el caso si la función representa el resultado de algún experimento). En esta lección estudiaremos técnicas para aproximar las derivadas de una función y veremos el análisis de error de dichas formulas.

Fórmulas para la primera derivada: La definición de la derivada de una función f(x) en el punto "x" está dada en términos del límite:

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

De esta definición podemos decir que si "h" es pequeño entonces: $f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$

(Note el símbolo de aproximación). Esto nos da inmediatamente la primera formula numérica para aproximar la derivada:

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

Antes de ver algunos ejemplos donde usamos esta fórmula, tratemos de contestar la pregunta de ¿cuán buena es esta aproximación de la derivada? Por el Teorema de Taylor sabemos que:

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

Donde esta entre x y x+h. Si despejamos ahora en esta fórmula por f'(x) y usamos la definición de tenemos que:

$$f'(x) = D_h f(x) - \frac{h}{2} f''(\xi_x)$$

Esta fórmula nos dice que aproxima a f'(x) con un error proporcional a "h", i.e., O(h). Formulas para la segunda derivada: El proceso de arriba se puede usar para obtener fórmulas para las derivadas de orden mayor de uno de una función f(x). Usamos este proceso para obtener una formula para la segunda derivada. Usando el Teorema de Taylor, podemos escribir las expansiones:

$$f(x+h) = f(x) + h f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f'''(x) + \frac{h^4}{24} f^{(iv)}(\zeta_x) ,$$

$$f(x-h) = f(x) - h f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{6} f'''(x) + \frac{h^4}{24} f^{(iv)}(\eta_x) .$$

Sumando estas dos expansiones y despejando para f''(x) obtenemos:

$$f''(x) = D_h^{(2)} f(x) - \frac{h^2}{12} f^{(iv)}(\gamma_x)$$

Donde

$$D_h^{(2)} f(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

y esta entre [x-h,x+h]. Tenemos aqui una fomula de orden dos para f''(x).

Diferenciación usando polinomios de interpolación: Suponga que son puntos distintos y sea pn(x) el polinomio que interpola a f(x) en estos puntos. Entonces aproximamos f '(x) por:

$$f'(x) = p_n'(x)$$

Suponga que $h = \left|x_i - x_j\right|, i \neq j$. Se puede demostrar que

$$f'(x) - p_n'(x) = O(h^n) \quad , \quad x \in [x_0, x_n]$$

Suponga que . Se puede demostrar que

Aunque no discutiremos en más detalles este método para aproximar derivadas, si mencionamos que las dos formulas que discutimos para aproximar f '(x) se pueden obtener usando polinomios de interpolación de grados uno y dos respectivamente.

4.2 Integración numérica

En análisis numérico la integración numérica constituye una amplia gama de algoritmos para calcular el valor numérico de una integral definida y, por extensión, el término se usa a veces para describir algoritmos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales. El término cuadratura numérica (a menudo abreviado a cuadratura) es más o menos sinónimo de integración numérica, especialmente si se aplica a integrales de una dimensión a pesar de que para el caso de dos o más dimensiones (integral múltiple) también se utiliza.

El problema básico considerado por la integración numérica es calcular una solución aproximada a la integral definida:

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

Este problema también puede ser enunciado como un problema de valor inicial para una ecuación diferencial ordinaria, como sigue:

$$y'(x) = f(x), \quad y(a) = 0$$

Encontrar y(b) es equivalente a calcular la integral. Los métodos desarrollados para ecuaciones diferenciales ordinarias, como el método de Runga-Kutta pueden ser aplicados al problema reformulado. En este artículo se discuten métodos desarrollados específicamente para el problema formulado como una integral definida.

Razones para la integración numérica

Hay varias razones para llevar a cabo la integración numérica. La principal puede ser la imposibilidad de realizar la integración de forma analítica. Es decir, integrales que requerirían de un gran conocimiento y manejo de matemática avanzada pueden ser resueltas de una manera más sencilla mediante métodos numéricos. Incluso existen funciones integrables pero cuya primitiva no puede ser calculada, siendo la integración numérica de vital importancia. La solución analítica de una integral nos arrojaría una solución exacta, mientras que la solución numérica nos daría una solución aproximada. El error de la aproximación, que depende del método que se utilice y de qué tan fino sea, puede llegar a ser tan pequeño que es posible obtener un resultado idéntico a la solución analítica en las primeras cifras decimales.

4.3 Integración múltiple

Las integrales múltiples se utilizan a menudo en la ingeniería. Por ejemplo, una ecuación general para calcular el promedio de una función bidimensional puede escribirse como sigue:

$$f = \frac{\int_c^d \left(\int_a^b (f(x,y)dx) \right) dy}{(d-c)(b-a)}$$

Al numerador se le llama integral doble.

Las técnicas estudiadas en este capítulo (y en el siguiente) se utilizan para evaluar integrales múltiples. Un ejemplo sencillo seria obtener la integral doble de una función sobre un área rectangular.

Recuerde del cálculo de dichas integrales se pueden calcular como integrales iteradas.

$$\int_c^d \left(\int_a^b f(x,y)dx\right)dy=\int_c^d \left(\int_a^b f(x,y)\right)dx$$

Primero se evalúa la integral en una de las dimensiones y el resultado de esta primera integración se incorpora en la segunda integración.
Una integral numérica doble estará basada en la misma idea. Primero se aplican métodos, como la regla de Simpson o del trapecio para segmentos múltiples, a la primera dimensión manteniendo constante los valores de la segunda dimensión.

4.4 Aplicaciones