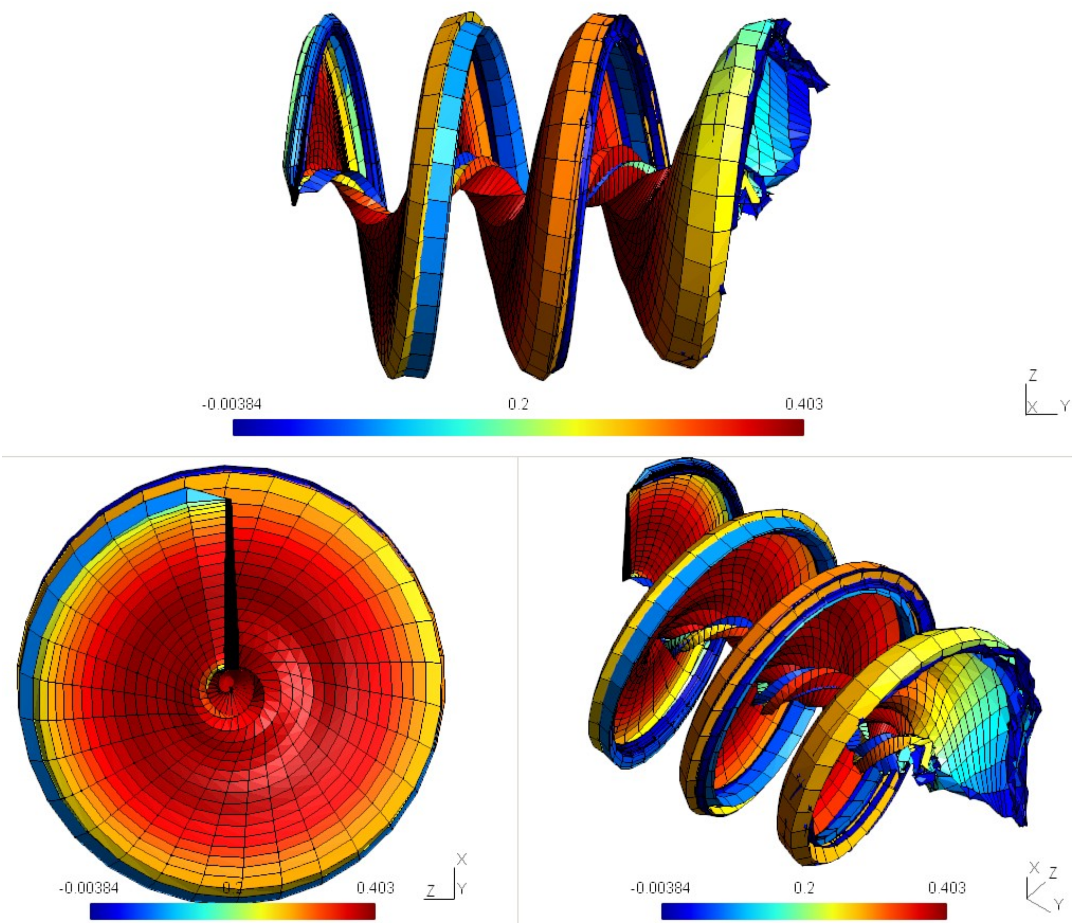
FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES



Elementos de Cálculo Numérico (M212)

Unidad 5: Diferenciación e integración numérica

http://fcen.uncuyo.edu.ar/elementos-de-calculo-numerico

Unidad 5: Diferenciación e integración numérica

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Parte A: Diferenciación numérica

- Aproximación de derivadas por diferencias finitas
- Errores
- Diferencia progresiva, regresiva y centrada
- Método general para obtención de fórmulas y su error
- Extrapolación de Richardson

Parte B: Integración numérica

- Integración numérica
- Fórmulas de Newton-Cotes
- Regla de Trapecios y de Simpson
- Método de Cuadratura de Gauss.

Aproximación de derivadas por diferencias finitas

La diferenciación numérica trata con el siguiente problema: **dada una función y=f(x)**, se desea obtener una de sus derivadas en un punto dado $x=x_k$. La función puede ser conocida, o se puede conocer solamente el valor que toma en ciertos puntos discretos (xi , yi), i = 1, 2, . . . , n. En cualquier caso, **disponemos de una cantidad finita de pares ordenados (x,y) a partir de los cuales se desean obtener las derivadas**.

La diferenciación numérica **se puede realizar de varias maneras**, como por ejemplo:

- **Interpolando un polinomio** localmente y luego derivándolo.
- Realizando una **expansión por series de Taylor** de la función f(x) alrededor del punto x_k. Esta opción **permite estimar el error** involucrado en la aproximación.

La diferenciación numérica **no es un proceso particularmente preciso** ya que sufre de un conflicto entre errores de redondeo, errores de interpolación y errores de truncamiento.

Aproximación de derivadas por diferencias finitas

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Nomenclatura:

Se suele indicar con subíndices la posición de cada imagen y sus vecinos.

$f_{i-1}=f(x_0-\Delta x)$ — $f_i=f(x_0)$ — $f_{i+1}=f(x_0+\Delta x)$

Aproximación de derivadas por diferencias finitas

El concepto de diferenciación numérica se puede asociar a la definición de la derivada de una función f(x)

$$\frac{df}{dx}(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

Si la función es continua, se espera que el cociente incremental sea una aproximación razonable a la derivada para un Δx "**suficientemente pequeño**".

Aproximación de derivadas por diferencias finitas

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

La aproximación de la derivada se puede definir con mayor formalidad mediante una expansión en series de Taylor.

$$f(x_0+\Delta x)=f(x_0)+\frac{df}{dx}(x_0)\Delta x+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x^2}{2!}+\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^3}{3!}+\ldots$$

Despejando la derivada de primer orden y agrupando términos en **diferencias finitas** DF y **error de truncamiento** (ET)

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\left[\frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0)}{\Delta x}\right]+\left[-\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x}{2!}-\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^2}{3!}-\ldots\right]$$

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0)}{\Delta x}+ET\text{, con } ET=-\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x}{2!}-\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^2}{3!}-\ldots$$

Errores

El **error de truncamiento** es la diferencia entre el valor exacto de la derivada y su representación en diferencias finitas. Aunque no se puede determinar con exactitud, **se puede caracterizar** mediante la **notación de orden** de magnitud O.

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0)}{\Delta x}+O(\Delta x)$$

Cuando decimos que $f(x)=O[\varphi(x)]$, significa que existe una constante positiva K tal que $|f(x)|\leq K|\varphi(x)|\ \forall$ x del dominio de f

La notación de orden **no dice nada sobre el valor exacto** del ET pero sí de **cómo se comporta cuando Δx tiende a cero**. Si tuviéramos una expresión con ET de $O(\Delta x^2)$ se espera que su valor sea menor a $O(\Delta x)$.

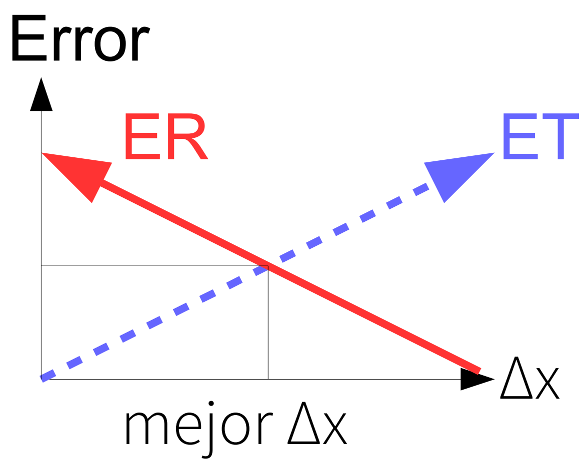
Errores

Idealmente para eliminar el ET se debería usar un Δx suficientemente pequeño, sin embargo, a medida que **Δx se reduce, aumentan los errores de redondeo** producidos por la aritmética de punto flotante.

Por lo tanto, **existe un compromiso entre el error de truncamiento y el error de redondeo**. Si el Δx es muy chico, los errores de redondeo son grandes, mientras que si Δx es grande, el error de truncamiento es grande.

Para mitigar este problema es recomendable

- Utilizar aritmética de **doble precisión**
- Utilizar expresiones con ET de **al menos $O(\Delta x^2)$**



Diferencia progresiva, regresiva y centrada

Existen tantas aproximaciones a una derivada por diferencias finitas como puntos en el dominio. **Las formas más simples se obtienen a partir de dos puntos.** Para obtenerlas vamos a necesitar la expansión hacia adelante y hacia atrás de la función alrededor de x_0.

$$f(x_0+\Delta x)=f(x_1)=f(x_0)+\frac{df}{dx}(x_0)\Delta x+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x^2}{2!}+\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^3}{3!}+\ldots$$

$$f(x_0-\Delta x)=f(x_{-1})=f(x_0)-\frac{df}{dx}(x_0)\Delta x+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x^2}{2!}-\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^3}{3!}+\ldots$$

Diferencia progresiva, regresiva y centrada

De la expansión hacia adelante se puede despejar la derivada de primer orden y se obtiene la fórmula progresiva, vista anteriormente.

$$\frac{df}{dx}(x_0) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

De igual manera, a partir de la expansión hacia atrás se obtiene la fórmula regresiva.

$$\frac{df}{dx}(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_{-1})}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

Observar que ambas aproximaciones tienen un ET de $O(\Delta x)$

Diferencia progresiva, regresiva y centrada

Si restamos las expansiones se obtiene una nueva aproximación.

$$f(x_1)-f(x_{-1})=2\frac{df}{dx}(x_0)\Delta x+2\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^3}{3!}+\ldots$$

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\frac{f(x_1)-f(x_{-1})}{2\Delta x}+\left[-\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^2}{3!}-\ldots\right]$$

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\frac{f(x_1)-f(x_{-1})}{2\Delta x}+O(\Delta x^2)$$

Esta aproximación se conoce como diferencia centrada y es de $O(\Delta x^2)$.
¿Cómo se obtiene un orden mayor con 2 puntos? En realidad usa 3...

Ejemplo 1

$$f(x)=e^{(-x)}, x_0=0 \rightarrow f'(0)=-1$$

ΔX	xi-1	xi+1	progresiva	regresiva	centrada
1	-1	1	-0,632121	-1,718282	-1,175201
0,5	-0,5	0,5	-0,786939	-1,297443	-1,042191
0,25	-0,25	0,25	-0,884797	-1,136102	-1,010449
0,125	-0,125	0,125	-0,940025	-1,065188	-1,002606
0,0625	-0,0625	0,0625	-0,969391	-1,031911	-1,000651
0,03125	-0,03125	0,03125	-0,984536	-1,015789	-1,000163
0,015625	-0,015625	0,015625	-0,992228	-1,007853	-1,000041
0,007813	-0,007813	0,007813	-0,996104	-1,003916	-1,00001

Ejemplo 2

$$f(x)=\cos(x), x_0=\pi/4 \rightarrow f'(\pi/4)=-0{,}7071$$

ΔX	xi-1	xi+1	progresiva	regresiva	centrada
1,5708	-0,7854	2,3562	-0,9003	0,0000	-0,4502
0,7854	0,0000	1,5708	-0,9003	-0,3729	-0,6366
0,3927	0,3927	1,1781	-0,8261	-0,5520	-0,6891
0,1963	0,5890	0,9817	-0,7718	-0,6334	-0,7026
0,0982	0,6872	0,8836	-0,7407	-0,6713	-0,7060
0,0491	0,7363	0,8345	-0,7242	-0,6895	-0,7068
0,0245	0,7609	0,8099	-0,7157	-0,6984	-0,7070
0,0123	0,7731	0,7977	-0,7114	-0,7028	-0,7071

Ejemplo 3

$$f(x) = \cos(x), x_0 = 0 \rightarrow f'(0) = 0$$

ΔX	xi-1	xi+1	progresiva	regresiva	centrada
1,5708	-1,5708	1,5708	-0,6366	0,6366	0,0000
0,7854	-0,7854	0,7854	-0,3729	0,3729	0,0000
0,3927	-0,3927	0,3927	-0,1938	0,1938	0,0000
0,1963	-0,1963	0,1963	-0,0979	0,0979	0,0000
0,0982	-0,0982	0,0982	-0,0490	0,0490	0,0000
0,0491	-0,0491	0,0491	-0,0245	0,0245	0,0000
0,0245	-0,0245	0,0245	-0,0123	0,0123	0,0000
0,0123	-0,0123	0,0123	-0,0061	0,0061	0,0000

Ejemplo 4

$$f(x) = sen(x), x_0 = 0 \rightarrow f'(0) = 1$$

ΔX	xi-1	xi+1	progresiva	regresiva	centrada
1,5708	-1,5708	1,5708	0,6366	0,6366	0,6366
0,7854	-0,7854	0,7854	0,9003	0,9003	0,9003
0,3927	-0,3927	0,3927	0,9745	0,9745	0,9745
0,1963	-0,1963	0,1963	0,9936	0,9936	0,9936
0,0982	-0,0982	0,0982	0,9984	0,9984	0,9984
0,0491	-0,0491	0,0491	0,9996	0,9996	0,9996
0,0245	-0,0245	0,0245	0,9999	0,9999	0,9999
0,0123	-0,0123	0,0123	1,0000	1,0000	1,0000

Método general para obtención de fórmulas y su error

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Expansión por series de Taylor:

Dados un punto central y n puntos vecinos, queremos determinar una fórmula de diferencias finitas que aproxime la k-ésima derivada con un error de $O(\Delta x^m)$.

Procedimiento:

1)Se realizan expansiones para todos los puntos vecinos.

2)Se combinan linealmente y se divide por Δx^k.

3)Se impone que las derivadas de orden menor se anulen, y la que se desea hallar esté multiplicada por 1.

4)Se resuelve el SEL para determinar los coeficientes de la combinación.

Ejemplo 1

Dados un punto central x_0 y 2 puntos vecinos x_{-1} y x_1, queremos determinar una fórmula de diferencias finitas que aproxime la primer derivada con un error de $O(\Delta x^2)$.

$$f(x_{-1})=f(x_0)-\frac{df}{dx}(x_0)\Delta x+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x^2}{2!}-\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^3}{3!}+\dots$$

$$f(x_1)=f(x_0)+\frac{df}{dx}(x_0)\Delta x+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x^2}{2!}+\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^3}{3!}+\dots$$

$$\frac{a f(x_{-1})-(a+b)f(x_0)+b f(x_1)}{\Delta x}=(b-a)\frac{df}{dx}(x_0)+\dots$$

$$\dots+(a+b)\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x}{2!}+(b-a)\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^2}{3!}$$

Ejemplo 1

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

$$\frac{a f(x_{-1})-(a+b) f(x_0)+b f(x_1)}{\Delta x}=(b-a)\frac{df}{dx}(x_0)+\ldots$$

$$\ldots+(a+b)\frac{d^2 f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x}{2!}+(b-a)\frac{d^3 f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^2}{3!}$$

Se busca $\frac{df}{dx}(x_0)\rightarrow(b-a)=1$

Además se busca ET de $O(\Delta x^2)\rightarrow a+b=0$

$$\begin{array}{r} -a+b=1 \\ a+b=0 \end{array}\rightarrow b=1/2 \wedge a=-1/2$$

Reemplazando en la ecuación original

$$\frac{df}{dx}(x_0)=\left[\frac{f(x_1)-f(x_{-1})}{2\Delta x}\right]-\frac{d^3 f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^2}{3!}-\ldots$$

Ejemplo 2

Dados los puntos x_0 x_1 y x_2, queremos determinar una fórmula de diferencias finitas que aproxime la primer derivada hacia adelante con un error de $O(\Delta x^2)$.

$$f(x_1)=f(x_0)+\frac{df}{dx}(x_0)\Delta x+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x^2}{2!}+\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^3}{3!}+\ldots$$

$$f(x_2)=f(x_0)+\frac{df}{dx}(x_0)(2\Delta x)+\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{(2\Delta x)^2}{2!}+\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{(2\Delta x)^3}{3!}+\ldots$$

$$\frac{a f(x_1)-(a+b)f(x_0)+b f(x_2)}{\Delta x}=(a+2b)\frac{df}{dx}(x_0)+\ldots$$

$$\ldots+(a+4b)\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x}{2!}+(a+8b)\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^2}{3!}$$

Ejemplo 2

$$\frac{a\,f(x_1)-(a+b)\,f(x_0)+b\,f(x_2)}{\Delta x}=(a+2b)\frac{df}{dx}(x_0)+\ldots$$

$$\ldots+(a+4b)\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x}{2!}+(a+8b)\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^2}{3!}$$

Se busca $\frac{df}{dx}(x_0)\rightarrow a+2b=1$

Además se busca anular $\frac{d^2f}{dx^2}(x_0)\rightarrow a+4b=0$

$$\begin{bmatrix}1 & 2\\ 1 & 4\end{bmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}\rightarrow\begin{bmatrix}1 & 2\\ 0 & 2\end{bmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}\rightarrow b=-1/2\wedge a=2$$

Finalmente $\frac{df}{dx}(x_0)=\left[\frac{4\,f(x_1)-3\,f(x_0)-f(x_2)}{2\,\Delta x}\right]-(-2)\frac{d^3f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^2}{3!}-\ldots$

Ejemplo 3

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Dados los puntos x_0 x_{-1} y x_{+1}, queremos determinar una fórmula de diferencias finitas que aproxime la segunda derivada con un error de $O(\Delta x)$.

$$f(x_{-1}) = f(x_0) - \frac{df}{dx}(x_0)\Delta x + \frac{d^2 f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x^2}{2!} - \frac{d^3 f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^3}{3!} + \dots$$

$$f(x_1) = f(x_0) + \frac{df}{dx}(x_0)\Delta x + \frac{d^2 f}{dx^2}(x_0)\frac{\Delta x^2}{2!} + \frac{d^3 f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x^3}{3!} + \dots$$

$$\frac{a f(x_{-1}) - (a+b) f(x_0) + b f(x_1)}{\Delta x^2} = \frac{(b-a)}{\Delta x}\frac{df}{dx}(x_0) + \dots$$

$$\dots + (a+b)\frac{d^2 f}{dx^2}(x_0)\frac{1}{2!} + (b-a)\frac{d^3 f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x}{3!}$$

Ejemplo 3

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

$$\frac{a f(x_{-1})-(a+b) f(x_0)+b f(x_1)}{\Delta x^2}=\frac{(b-a)}{\Delta x}\frac{df}{dx}(x_0)+\dots$$

$$\dots+(a+b)\frac{d^2 f}{dx^2}(x_0)\frac{1}{2!}+(b-a)\frac{d^3 f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x}{3!}$$

Buscamos $\frac{d^2 f}{dx^2}(x_0) \rightarrow (a+b)\frac{1}{2!}=1$

Además se pide que $\frac{df}{dx}(x_0)$ se anule $\rightarrow (b-a)=0$

$$\begin{matrix} a+b=2 \\ b-a=0 \end{matrix} \rightarrow a=b=1$$

Finalmente $\frac{d^2 f}{dx^2}(x_0)=\frac{f(x_{-1})-(2) f(x_0)+f(x_1)}{\Delta x^2}-(0)\frac{d^3 f}{dx^3}(x_0)\frac{\Delta x}{3!}+\dots$

¿De qué orden es el error de truncamiento?

Extrapolación de Richardson

La extrapolación de Richardson es un método que permite aumentar la precisión de ciertos métodos numéricos, incluída la diferenciación numérica.

Supongamos que queremos determinar una cantidad G, que es función del parámetro Δx. Su aproximación es $g(\Delta x)$ por ende $G = g(\Delta x)+E(\Delta x)$, siendo E el error. Si el error es de la forma $c(\Delta x)^p$, donde p es el orden del error, la extrapolación de Richardson puede remover parte del error.

Se evalúa la cantidad con un cierto $\Delta x=\Delta x_1$: $G=g(\Delta x_1)+c(\Delta x_1)^p$

Se evalúa la cantidad con otro $\Delta x=\Delta x_2$: $G=g(\Delta x_2)+c(\Delta x_2)^p$

Se elimina c y se despeja G : $G=\dfrac{(\Delta x_1/\Delta x_2)^p g(\Delta x_2)-g(\Delta x_1)}{(\Delta x_1/\Delta x_2)^p-1}$

Se suele usar $\Delta x_2=\Delta x_1/2 \rightarrow G=\dfrac{(2)^p g(\Delta x_1/2)-g(\Delta x_1)}{(2)^p-1}$

Ejemplo

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

$$f(x)=e^{(-x)}, x_0=0 \rightarrow f'(0)=-1$$

$$G=\frac{(2)^p g(\Delta x_1/2)-g(\Delta x_1)}{(2)^p-1}=2g(\Delta x_1/2)-g(\Delta x_1)$$

ΔX	Diferencia progresiva	Error absoluto	Richardson con p=1	Error absoluto	Diferencia centrada	Error absoluto
1	-0,632121		---		-1,175201	
0,5	-0,786939	0,213061	-0,941757	0,058243	-1,042191	0,042191
0,25	-0,884797	0,115203	-0,982655	0,017345	-1,010449	0,010449
0,125	-0,940025	0,059975	-0,995253	0,004747	-1,002606	0,002606
0,0625	-0,969391	0,030609	-0,998757	0,001243	-1,000651	0,000651
0,03125	-0,984536	0,015464	-0,999681	0,000319	-1,000163	0,000163
0,015625	-0,992228	0,007772	-0,99992	0,00008	-1,000041	0,000041
0,007813	-0,996104	0,003896	-0,99998	0,00002	-1,00001	0,00001