Derivación e integración numérica

Escuela de Ingeniería Informática de Oviedo

Contenidos

Derivación numérica

Problema

Obtener una aproximación de f' en un punto $\hat{x}$ en función de valores de f en un número finito de puntos cercanos a $\hat{x}$.

¿Por qué?

- Porque sólo conocemos los valores de f en un número finito de puntos x,
- Porque es *menos costoso* calcular la aproximación que el valor exacto.

¿Cómo lo hacemos? A partir de la definición de derivada

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

podemos deducir varias aproximaciones.

Aproximaciones habituales

$h > 0$ pequeño

- Diferencias finitas progresivas

$$(\delta^+ f)(\hat{x}) = \frac{f(\hat{x}+h) - f(\hat{x})}{h}.$$

- Diferencias finitas regresivas

$$(\delta^- f)(\hat{x}) = \frac{f(\hat{x}) - f(\hat{x}-h)}{h}.$$

- Diferencias finitas centradas

$$(\delta f)(\hat{x}) = \frac{1}{2}\left((\delta^+ f)(\hat{x}) + (\delta^- f)(\hat{x})\right) = \frac{f(\hat{x}+h) - f(\hat{x}-h)}{2h}$$

Error

Error

- Diferencias finitas **progresivas y regresivas** proporcionan una aproximación de **primer orden**:

$$|(\delta^{\pm} f)(\hat{x}) - f'(\hat{x})| \leq c\, h.$$

- Diferencias finitas **centradas** proporcionan una aproximación de **segundo orden**:

$$|(\delta f)(\hat{x}) - f'(\hat{x})| \leq c\, h^2.$$

Para ver esto, usamos la aproximación de Taylor:

$$f(\hat{x}+h) = f(\hat{x}) + f'(\hat{x})h + f''(\xi)\frac{h^2}{2}, \quad \xi \in (\hat{x}, \hat{x}+h) \Rightarrow$$

$$(\delta_+ f)(\hat{x}) = f'(\hat{x}) + f''(\xi)\frac{h}{2} \;\Rightarrow\; |(\delta_+ f)(\hat{x}) - f'(\hat{x})| \leq c\, h.$$

Error

Error

- Diferencias finitas **progresivas y regresivas** proporcionan una aproximación de **primer orden**:

$$|(\delta^{\pm} f)(\hat{x}) - f'(\hat{x})| \leq c\, h.$$

- Diferencias finitas **centradas** proporcionan una aproximación de **segundo orden**:

$$|(\delta f)(\hat{x}) - f'(\hat{x})| \leq c\, h^2.$$

Para ver esto, usamos la aproximación de Taylor:

$$f(\hat{x}+h) = f(\hat{x}) + f'(\hat{x})h + f''(\xi)\frac{h^2}{2}, \quad \xi \in (\hat{x}, \hat{x}+h) \Rightarrow$$

$$(\delta_+ f)(\hat{x}) = f'(\hat{x}) + f''(\xi)\frac{h}{2} \;\Rightarrow\; |(\delta_+ f)(\hat{x}) - f'(\hat{x})| \leq c\, h.$$

Más precisión

Dada una partición de $[a, b]$

$$a < x_1 < x_2 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$$

usamos la fórmula centrada para conseguir un orden de aproximación de orden 2 si x_j es interior ($1 < j < n$).

Problema

¿Qué fórmulas usamos para x_1 y x_n?

La respuesta a esta cuestión también contesta la pregunta siguiente:

Problema

¿Cómo conseguimos aproximaciones de orden mayor que 2?

Pista

Usar las fórmulas de interpolación polinómicas.

Más precisión

Ejemplo

Usamos un polinomio de interpolación de f de 2^o grado en x_1, x_2, x_3, siendo $y_j = f(x_j)$.

$$p(x) = [y_1] + [y_1, y_2](x - x_1) + [y_1, y_2, y_3](x - x_1)(x - x_2)$$

Más precisión

Ejemplo

Usamos un polinomio de interpolación de f de 2^o grado en x_1, x_2, x_3, siendo $y_j = f(x_j)$.

$$p(x) = [y_1] + [y_1, y_2](x - x_1) + [y_1, y_2, y_3](x - x_1)(x - x_2)$$

$$[y_1] = y_1, \quad [y_1, y_2] = \frac{y_1 - y_2}{x_1 - x_2} = \frac{y_2 - y_1}{h},$$

$$[y_1, y_2, y_3] = \frac{[y_1, y_2] - [y_2, y_3]}{x_1 - x_3} = \frac{1}{2h}\left(\frac{y_1 - y_2}{h} - \frac{y_2 - y_3}{h}\right) = \frac{1}{2h^2}(y_1 - 2y_2 + y_3).$$

Más precisión

Ejemplo

Usamos un polinomio de interpolación de f de 2^o grado en x_1, x_2, x_3, siendo $y_j = f(x_j)$.

$$p(x) = [y_1] + [y_1, y_2](x - x_1) + [y_1, y_2, y_3](x - x_1)(x - x_2)$$

$$[y_1] = y_1, \quad [y_1, y_2] = \frac{y_2 - y_1}{h}, \quad [y_1, y_2, y_3] = \frac{1}{2h^2}(y_1 - 2y_2 + y_3)$$

Más precisión

Ejemplo

Usamos un polinomio de interpolación de f de 2^o grado en x_1, x_2, x_3, siendo $y_j = f(x_j)$.

$$p(x) = [y_1] + [y_1, y_2](x - x_1) + [y_1, y_2, y_3](x - x_1)(x - x_2)$$

$$[y_1] = y_1, \quad [y_1, y_2] = \frac{y_2 - y_1}{h}, \quad [y_1, y_2, y_3] = \frac{1}{2h^2}(y_1 - 2y_2 + y_3)$$

Obtenemos

$$f'(x_1) \approx p'(x_1) = [y_1, y_2] + [y_1, y_2, y_3]\Big((x_1 - x_1) + (x_1 - x_2)\Big),$$

Más precisión

Ejemplo

Usamos un polinomio de interpolación de f de 2^o grado en x_1, x_2, x_3, siendo $y_j = f(x_j)$.

$$p(x) = [y_1] + [y_1, y_2](x - x_1) + [y_1, y_2, y_3](x - x_1)(x - x_2)$$

$$[y_1] = y_1, \quad [y_1, y_2] = \frac{y_2 - y_1}{h}, \quad [y_1, y_2, y_3] = \frac{1}{2h^2}(y_1 - 2y_2 + y_3)$$

Obtenemos

$$f'(x_1) \approx p'(x_1) = [y_1, y_2] + [y_1, y_2, y_3]\Big((x_1 - x_1) + (x_1 - x_2)\Big),$$

o

$$f'(x_1) \approx \frac{1}{2h}\big(-3f(x_1) + 4f(x_2) - f(x_3)\big).$$

Más precisión

Ejemplo

Usamos un polinomio de interpolación de f de 2^o grado en x_1, x_2, x_3, siendo $y_j = f(x_j)$.

$$p(x) = [y_1] + [y_1, y_2](x - x_1) + [y_1, y_2, y_3](x - x_1)(x - x_2)$$

$$[y_1] = y_1, \quad [y_1, y_2] = \frac{y_2 - y_1}{h}, \quad [y_1, y_2, y_3] = \frac{1}{2h^2}(y_1 - 2y_2 + y_3)$$

y

$$f'(x_3) \approx p'(x_3) = [y_1, y_2] + [y_1, y_2, y_3]\Big((x_3 - x_1) + (x_3 - x_2)\Big),$$

Más precisión

Ejemplo

Usamos un polinomio de interpolación de f de 2^o grado en x_1, x_2, x_3, siendo $y_j = f(x_j)$.

$$p(x) = [y_1] + [y_1, y_2](x - x_1) + [y_1, y_2, y_3](x - x_1)(x - x_2)$$

$$[y_1] = y_1, \quad [y_1, y_2] = \frac{y_2 - y_1}{h}, \quad [y_1, y_2, y_3] = \frac{1}{2h^2}(y_1 - 2y_2 + y_3)$$

y

$$f'(x_3) \approx p'(x_3) = [y_1, y_2] + [y_1, y_2, y_3]\Big((x_3 - x_1) + (x_3 - x_2)\Big),$$

o

$$f'(x_3) \approx p'(x_3) = \frac{1}{2h}(f(x_1) - 4f(x_2) + 3f(x_3)).$$

Derivada segunda

Podemos concatenar dos veces las δ-aproximaciones. Por ejemplo:

$$(\delta^+ f)(\hat{x}) = \frac{f(\hat{x}+h) - f(\hat{x})}{h} = \frac{1}{h}(f(\hat{x}+h) - f(\hat{x})) \Rightarrow$$

$$(\delta^-(\delta^+ f))(\hat{x}) = \frac{1}{h}\Big(\frac{f(\hat{x}+h) - f(\hat{x})}{h} - \frac{f(\hat{x}) - f(\hat{x}-h)}{h}\Big) \Rightarrow$$

$$(\delta^{\pm}_{xx} f)(\hat{x}) = \frac{f(\hat{x}+h) - 2f(\hat{x}) + f(\hat{x}-h)}{h^2}.$$

Obtenemos el mismo resultado por interpolación:

$$p(x) = [y_1] + [y_1, y_2](x - x_1) + [y_1, y_2, y_3](x - x_1)(x - x_2) \Rightarrow$$

$$p''(x_2) = 2[y_1, y_2, y_3] = \frac{1}{h^2}(y_1 - 2y_2 + y_3).$$

Derivada segunda

Podemos concatenar dos veces las δ-aproximaciones. Por ejemplo:

$$(\delta^+ f)(\hat{x}) = \frac{f(\hat{x}+h) - f(\hat{x})}{h} = \frac{1}{h}(f(\hat{x}+h) - f(\hat{x})) \Rightarrow$$

$$(\delta^-(\delta^+ f))(\hat{x}) = \frac{1}{h}\left(\frac{f(\hat{x}+h) - f(\hat{x})}{h} - \frac{f(\hat{x}) - f(\hat{x}-h)}{h}\right) \Rightarrow$$

$$(\delta^{\pm}_{xx} f)(\hat{x}) = \frac{f(\hat{x}+h) - 2f(\hat{x}) + f(\hat{x}-h)}{h^2}.$$

Obtenemos el mismo resultado por interpolación:

$$p(x) = [y_1] + [y_1, y_2](x - x_1) + [y_1, y_2, y_3](x - x_1)(x - x_2) \Rightarrow$$

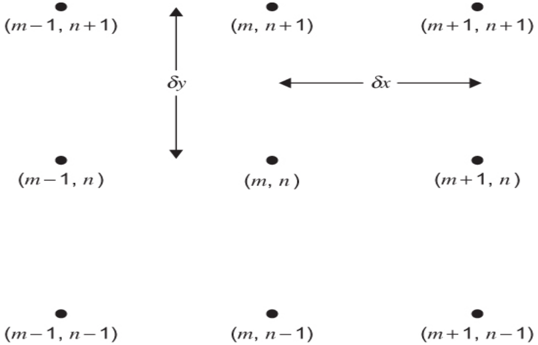
$$p''(x_2) = 2[y_1, y_2, y_3] = \frac{1}{h^2}(y_1 - 2y_2 + y_3).$$

Derivadas en dos variables. Ejemplos

Sea $[a,b] \times [c,d] \subset \mathbb{R}^2$. Introducimos particiones uniformes

$$a = x_1 < x_2 < \ldots < x_{M-1} < x_M = b$$
$$c = y_1 < y_2 < \ldots < y_{N-1} < y_N = d$$

Si llamamos a un punto (x_m, y_n), sus vecinos son



Ejemplos:

- Derivada parcial (progresiva): $\partial_x f(x_m, y_n)$

$$(\delta_x^+ f)(x_m, y_n) = \frac{f(x_{m+1}, y_n) - f(x_m, y_n)}{h_x}.$$

- Gradiente (centrado): $\nabla f(x_m, y_n) = \big(\partial_x f(x_m, y_n), \partial_y f(x_m, y_n)\big)$

$$\left(\frac{f(x_{m+1}, y_n) - f(x_{m-1}, y_n)}{2h_x}, \frac{f(x_m, y_{n+1}) - f(x_m, y_{n-1})}{2h_y}\right).$$

- Divergencia (centrada): $\mathrm{div}(\mathbf{f}(x_m, y_n)) = \partial_x f_1(x_m, y_n) + \partial_y f_2(x_m, y_n)$

$$\frac{f_1(x_{m+1}, y_n) - f_1(x_{m-1}, y_n)}{2h_x} + \frac{f_2(x_m, y_{n+1}) - f_2(x_m, y_{n-1})}{2h_y}$$

Ejemplos:

- Derivada parcial (progresiva): $\partial_x f(x_m, y_n)$

$$(\delta_x^+ f)(x_m, y_n) = \frac{f(x_{m+1}, y_n) - f(x_m, y_n)}{h_x}.$$

- Gradiente (centrado): $\nabla f(x_m, y_n) = \big(\partial_x f(x_m, y_n), \partial_y f(x_m, y_n)\big)$

$$\left(\frac{f(x_{m+1}, y_n) - f(x_{m-1}, y_n)}{2h_x}, \frac{f(x_m, y_{n+1}) - f(x_m, y_{n-1})}{2h_y}\right).$$

- Divergencia (centrada): $\mathrm{div}(\mathbf{f}(x_m, y_n)) = \partial_x f_1(x_m, y_n) + \partial_y f_2(x_m, y_n)$

$$\frac{f_1(x_{m+1}, y_n) - f_1(x_{m-1}, y_n)}{2h_x} + \frac{f_2(x_m, y_{n+1}) - f_2(x_m, y_{n-1})}{2h_y}$$

Ejemplos:

- Derivada parcial (progresiva): $\partial_x f(x_m, y_n)$

$$(\delta_x^+ f)(x_m, y_n) = \frac{f(x_{m+1}, y_n) - f(x_m, y_n)}{h_x}.$$

- Gradiente (centrado): $\nabla f(x_m, y_n) = \big(\partial_x f(x_m, y_n), \partial_y f(x_m, y_n)\big)$

$$\Big(\frac{f(x_{m+1}, y_n) - f(x_{m-1}, y_n)}{2h_x}, \frac{f(x_m, y_{n+1}) - f(x_m, y_{n-1})}{2h_y}\Big).$$

- Divergencia (centrada): $\mathrm{div}(\mathbf{f}(x_m, y_n)) = \partial_x f_1(x_m, y_n) + \partial_y f_2(x_m, y_n)$

$$\frac{f_1(x_{m+1}, y_n) - f_1(x_{m-1}, y_n)}{2h_x} + \frac{f_2(x_m, y_{n+1}) - f_2(x_m, y_{n-1})}{2h_y}$$

- Laplaciana (centrada): $\Delta f(x_m, y_n) = \partial_{xx} f(x_m, y_n) + \partial_{yy} f(x_m, y_n)$

$$\frac{f(x_{m+1}, y_n) - 2f(x_m, y_n) + f(x_{m-1}, y_n)}{h_x^2} + \frac{f(x_m, y_{n+1}) - 2f(x_m, y_n) + f(x_m, y_{n-1})}{h_y^2}.$$

Integración numérica

Problema:

Aproximar

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx.$$

La integración es, como la derivación, una operación en la que se utilizan límites. Realizamos una partición con N puntos de $[a, b]$:

$$x_n = a + h(n-1), \quad h = \frac{b-a}{N-1}, \quad n = 1, 2, \ldots, N.$$

Por definición

$$I(f) = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=2}^{N} f(x_n)(x_n - x_{n-1}) = \lim_{N\to\infty} h \sum_{n=2}^{N} f(x_n).$$

Una aproximación es truncar la suma infinita:

$$I(f) \approx h \sum_{n=2}^{N} f(x_n).$$

Integración numérica

Problema:

Aproximar

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx.$$

La integración es, como la derivación, una operación en la que se utilizan límites. Realizamos una partición con N puntos de $[a, b]$:

$$x_n = a + h(n-1), \quad h = \frac{b-a}{N-1}, \quad n = 1, 2, \ldots, N.$$

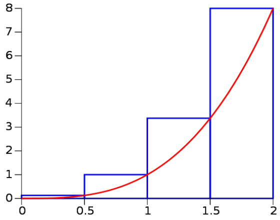
Por definición

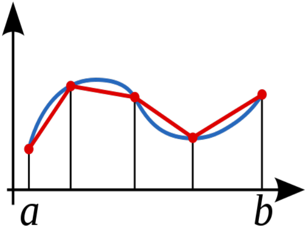
$$I(f) = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=2}^{N} f(x_n)(x_n - x_{n-1}) = \lim_{N\to\infty} h \sum_{n=2}^{N} f(x_n).$$

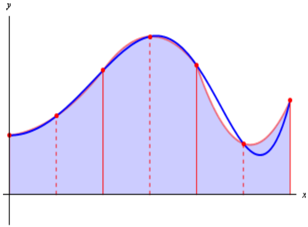
Una aproximación es truncar la suma infinita:

$$I(f) \approx h \sum_{n=2}^{N} f(x_n).$$

Varias estrategias de discretización







Fórmulas correspondientes

La lista de métodos de integración es grande.

- Fórmula del punto medio: Sea $\bar{x}_n = \dfrac{x_{n-1} + x_n}{2}$

$$I(f) \approx h \sum_{n=2}^{N} f(\bar{x}_n), \quad \text{aprox. constante}$$

- Regla de los trapecios:

$$I(f) \approx \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) + h \sum_{n=2}^{N-1} f(x_n), \quad \text{aprox. lineal}$$

- Fórmula de Simpson:

$$I(f) \approx \frac{h}{6} \sum_{n=2}^{N} \left(f(x_{n-1} + 4f(\bar{x}_n) + f(x_n))\right), \quad \text{aprox. cuadrática}$$

Error y grado de precisión

Definición

- El error de la fórmula de cuadratura, $I_q(f)$ cuando aproximamos $I(f)$ es

$$|I(f) - I_q(f)|.$$

- El grado de precisión de la fórmula de cuadratura es el máximo r tal que

$$I_q(p) = I(p), \quad \text{con } p(x) = a_r x^r + a_{r-1} x^{r-1} + \ldots + a_1 x + a_0.$$

Error y grado de precisión

Definición

- El error de la fórmula de cuadratura, $I_q(f)$ cuando aproximamos $I(f)$ es
$$|I(f) - I_q(f)|.$$
- El grado de precisión de la fórmula de cuadratura es el máximo r tal que
$$I_q(p) = I(p), \quad \text{con } p(x) = a_r x^r + a_{r-1} x^{r-1} + \ldots + a_1 x + a_0.$$

Error estimado para las fórmulas más habituales

Si usamos la fórmula de Taylor.

- Fórmula del punto medio: Sea $\bar{x}_n = \dfrac{x_{n-1} + x_n}{2}$

$$I(f) - I_{mp}(f) = \frac{b-a}{24} h^2 f''(\xi),$$

- Fórmula de los trapecios:

$$I(f) - I_t(f) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi),$$

- Fórmula de Simpson:

$$I(f) - I_t(f) = -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\xi),$$

para algún $\xi \in [a, b]$.

Grado de precisión de las fórmulas más habituales

Obtenido a partir de la estimación del error

- Fórmula del punto medio: Grado 1, porque el error depende de f''.
- Fórmula de los trapecios: Grado 1 (igual que el anterior).
- Fórmula de Simpson: Grado 3, porque el error depende de $f^{(4)}$.

Mayor precisión

En lugar de usar particiones equiespaciadas podemos escribir:

$$I_q(f) = \sum_{n=1}^{N} w_n f(x_n),$$

para x_n no necesariamente equiespaciados y algunos *pesos* w_n.

Pregunta

¿Es posible calcular $I(p_r)$ de forma exacta para algún polinomio p_r de grado $\leq r$ eligiendo de forma adecuada los nodos y los pesos?

La respuesta es "Sí".

Escribamos $p_r(x)$ usando los polinomios de Lagrange,

$$p_r(x) = \sum_{i=0}^{r} p_r(x_i)\varphi_i(x).$$

Entonces

$$\int_a^b p_r(x)dx = \sum_{i=0}^{r} p_r(x_i) \int_a^b \varphi_i(x)dx = \sum_{i=1}^{r} w_i p_r(x_i),$$

donde los pesos Gaussianos son

$$w_i = \int_a^b \varphi_i(x)dx.$$

Seleccionando x_i de forma que **tenga el máximo grado precisión** es posible.

Se puede demostrar que si escogemos los nodos de forma que sean las raíces de los polinomios de Legendre de grado $r+1$ entonces, para $m \leq 2r-1$ tenemos

$$\int_a^b p_m(x)dx = \sum_{i=1}^{r} w_i p_m(x_i^L).$$

Esta es la fórmula de cuadratura de Gauss, que tiene un grado de precisión $2r-1$ y un error absoluto proporcional a $f^{(2r)}(\xi)$.

Se puede demostrar que si escogemos los nodos de forma que sean las raíces de los polinomios de Legendre de grado $r+1$ entonces, para $m \leq 2r-1$ tenemos

$$\int_a^b p_m(x)dx = \sum_{i=1}^{r} w_i p_m(x_i^L).$$

Esta es la fórmula de cuadratura de Gauss, que tiene un grado de precisión $2r-1$ y un error absoluto proporcional a $f^{(2r)}(\xi)$.

Ejemplo

Para $p_3(x)$ tanto la fórmula de Simpson como la de Gauss ($r=2$) son exactas. Sin embargo (en $[-1,1]$)

$$I_s(p_3) = \frac{1}{3}(p_3(-1) + 4p_3(0) + p_3(1)),$$

mientras que

$$I_g(p_3) = p_3(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + p_3(\frac{1}{\sqrt{3}}).$$

Se puede demostrar que si escogemos los nodos de forma que sean las raíces de los polinomios de Legendre de grado $r+1$ entonces, para $m \leq 2r-1$ tenemos

$$\int_a^b p_m(x)dx = \sum_{i=1}^{r} w_i p_m(x_i^L).$$

Esta es la fórmula de cuadratura de Gauss, que tiene un grado de precisión $2r-1$ y un error absoluto proporcional a $f^{(2r)}(\xi)$.

Señalar que:

- Los pesos y nodos están tabulados o bien se calculan en el momento usando, por ejemplo, métodos de cálculo de autovalores.
- La función de MATLAB `quadl(f,a,b)` utiliza la fórmula de cuadratura de Gauss-Lobatto adaptativa.