Universidad de Granada Departamento de Matemática Aplicada	**Ecuaciones Diferenciales y Cálculo Numérico** Grado en Ingeniería de Tecnologías de Telecomunicación	TEMA 10 (VERSIÓN 24 DE MARZO DE 2014)

Tema 10. Derivación e integración numéricas

1. Introducción

Como aplicación del tema de interpolación de funciones, vamos a obtener fórmulas que nos permitan dar valores aproximados de

- la derivada de una función en un punto;
- la integral definida de una función en un intervalo.

Dichas fórmulas, que vamos a obtener a partir de polinimios de interpolación adecuados, se denominan *fórmulas de tipo interpolatorio* para la aproximación numérica de derivadas e integrales.

Conviene decir que existen otros tipos de fórmulas que permiten resolver la cuestión planteada y que, obviamente, se obtienen por vías diferentes.

2. Derivación numérica

Sea $f(x)$ una función derivable. Para aproximar su primera derivada en el punto $x = a$ podemos emplear las siguientes fórmulas.

- Fórmula progresiva: se calcula el polinomio que interpola $(a, f(a))$, $(a + h, f(a + h))$. A partir de dicho polinomio, se tiene la aproximación

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

- Fórmula regresiva: se toma el polinomio que interpola los datos $(a, f(a))$, $(a-h, f(a-h))$. En este caso se tiene la aproximación

$$f'(a) \approx \frac{f(a) - f(a-h)}{h}.$$

- Fórmula centrada: se parte del polinomio que interpola $(a-h, f(a-h))$ y $(a+h, f(a+h))$ para obtener la aproximación

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}.$$

- Fórmula centrada (de nuevo): a partir del polinomio que interpola a la función f en los puntos $a-h$, a y $a+h$, se tiene la misma aproximación que antes, es decir,

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}.$$

3. Exactitud

Queremos diseñar una fórmula para aproximar $f'(a)$ a partir del conocimiento de los valores de f en $a-h$, a y $a+h$. Es decir, queremos una fórmula del tipo

$$f'(a) \approx \alpha_0 f(a-h) + \alpha_1 f(a) + \alpha_2 f(a+h),$$

donde $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ son parámetros por determinar.

Para hallar los valores de $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$, vamos a imponer *exactitiud* en $\mathbb{P}_2$ (también se suele decir que vamos a imponer *grado de exactitud* 2), esto es, exigimos que la fórmula proporcione el valor exacto de la derivada para polinomios de grado menor o igual que dos. De esta forma, tenemos que

$$\left.\begin{array}{l} f(x) = 1 \Rightarrow f'(a) = 0 = \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 \\ f(x) = x \Rightarrow f'(a) = 1 = \alpha_0(a-h) + \alpha_1 a + \alpha_2(a+h) \\ f(x) = x^2 \Rightarrow f'(a) = 2a = \alpha_0(a-h)^2 + \alpha_1 a^2 + \alpha_2(a+h)^2 \end{array}\right\}.$$

Resolviendo este sistema, tenemos que $\alpha_0 = -\frac{1}{2h}$, $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = \frac{1}{2h}$. Por tanto

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h},$$

que es la fórmula centrada hallada en la sección anterior.

Nota 1. Las fórmulas de tipo interpolatorio en $n+1$ nodos (prefijados y distintos dos a dos) son exactas en $\mathbb{P}_n$ (tiene grado de exactitud n). Y recíprocamente, si una fórmula con $n+1$ nodos (prefijados y distintos dos a dos) es exacta en $\mathbb{P}_n$ (tiene grado de exactitud n) entonces tal fórmula es de tipo interpolatorio.

En general, este resultado no es cierto para fórmulas distintas a las que estamos considerando en esta tema.

Nota 2. Puede ocurrir que al considerar $n+1$ nodos obtengamos una fórmula que tenga un grado de exactitud mayor que n. Esto no contradice el resultado comentado en la nota anterior; simplemente indica que la fórmula obtenida es mejor de lo esperado a priori.

Ejercicio 3. Imponiendo exactitud, obtén de nuevo las fórmulas progresiva y regresiva de derivación numérica.

Ejercicio 4. Al medir f en una serie de puntos x_i, se han obtenido los siguientes valores:

x_i	0	1	2	3
f_i	0	1	8	27

a) Aproxima de distintas formas la derivada de f en $x = 2$.

b) Aproxima la derivada de f en $x = 2.5$.

c) Aproxima la derivada de f en 1.5 usando toda la información disponible.

Ejercicio 5. Fórmula centrada para la segunda derivada: queremos aproximar la derivada segunda de una función $f(x)$ en el punto $x = a$ a partir de los valores $f(a-h)$, $f(a)$, $f(a+h)$, donde $h \neq 0$.

a) A partir del polinomio de interpolación, justifica que la fórmula buscada es

$$f''(a) \approx \frac{f(a-h) - 2f(a) + f(a+h)}{h^2}.$$

b) Obtén nuevamente la fórmula anterior imponiendo exactitud.

c) ¿Cuál es el grado de exactitud de la fórmula hallada?

4. Integración numérica

Para obtener aproximaciones del valor de una integral definida podemos usar las siguientes fórmulas o *reglas simples.*

- Regla del rectángulo a izquierdas: se toma el polinomio que interpola el dato $(a, f(a))$. La aproximación resultante es

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)f(a).$$

  Esta fórmula tiene grado de exactitud cero: es exacta en $\mathbb{P}_0$ pero no lo es en $\mathbb{P}_1$.

- Regla del rectángulo a derechas: usando el polinomio de interpolación para el dato $(b, f(b))$, se tiene la aproximación
$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)f(b),$$
que también tiene grado de exactitud cero (es exacta en $\mathbb{P}_0$ pero no lo es en $\mathbb{P}_1$).

- Regla central del rectángulo: se obtiene al considerar el polinomio que interpola el dato $(\frac{a+b}{2}, f(\frac{a+b}{2}))$. La aproximación a la que se llega tiene grado de exactitud uno (es exacta en $\mathbb{P}_1$ pero no lo es $\mathbb{P}_2$) y viene dada por
$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right).$$
En un principio, sería esperable que esta aproximación sólo tuviera grado de exactitud cero. En efecto, puesto que sólo se usa un dato, el polinomio interpolante empleado para obtener la regla es de grado cero.

- Regla del trapecio: a partir del polinomio que interpola los datos $(a, f(a))$, $(b, f(b))$, se tiene la aproximación
$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right),$$
que es exacta en $\mathbb{P}_1$ pero no en $\mathbb{P}_2$ (o sea, tiene grado de exactitud uno).

- Regla de Simpson: por medio del polinomio que interpola a la función f en los puntos a, $\frac{a+b}{2}$ y b, se tiene la aproximación
$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right),$$
que es exacta en $\mathbb{P}_3$ y no en $\mathbb{P}_4$ (por lo que tiene grado de exactitud igual a tres). De nuevo tenemos una regla que alcanza mayor grado de exactitud del esperable a priori: como tenemos tres datos, el polinomio interpolante empleado es de grado dos.

Ejercicio 6. Halla de nuevo las cinco fórmulas vistas a partir del concepto de exactitud.

Ejercicio 7. Aproxima $\displaystyle\int_1^2 x^{-1}\,\mathrm{d}x$ por medio de las fórmulas vistas.

5. Reglas compuestas

En general, la aplicación de las reglas simples de integración numérica no ofrecen buenos resultados. Por ejemplo, supongamos que queremos estimar el valor de
$$\int_1^{50} x^{-1}\,dx$$
de manera relativamente precisa. Observemos que

- su valor exacto es $\ln(50) \approx 3.912023005$;
- aplicando las reglas del trapecio y de Simpson, obtenemos las aproximaciones 24.99 y 9.6110457516, respectivamente.

No hace falta decir que las dos aproximaciones son bastante malas. Teniendo en cuenta que
$$\int_1^{50} x^{-1}\,dx = \sum_{i=1}^{49}\left(\int_i^{i+1} x^{-1}\,dx\right),$$
vamos a calcular nuevas aproximaciones de la integral.

- Aplicando la regla del trapecio en cada una de las integrales que aparecen en la sumatoria anterior, obtenemos la aproximación 3.9892053383294.
- Si aplicamos la regla de Simpson en cada una de las integrales de la sumatoria, la aproximación es 3.9134349107430.

Hemos usado las *reglas compuestas* asociadas a las fórmulas del trapecio y de Simpson respectivamente. En ambos casos, mejoramos significativamente los resultados obtenidos aplicando las reglas simples en el intervalo $[1, 50]$.

Para justificar la razón de los buenos resultados para las fórmulas compuestas, vamos a estudiar el error cometido en el caso de la regla de Simpson. Consideremos $f \in C^4([a, b])$ tal que $\left|f^{(iv)}(x)\right| \leq K,\ \forall x \in [a, b]$. Si aplicamos la fórmula simple, el error cometido es

$$\left| \int_a^b f(x) \mathrm{d}x - \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b) \right) \right| \leq \frac{(b-a)^5}{2880} K.$$

Por tanto, si $b - a$ es "grande", el error cometido es "bastante grande".

Si aplicamos la fórmula compuesta dividiendo $[a, b]$ en N subintervalos, entonces el error cometido es

$$\left| \int_a^b f(x) \mathrm{d}x - SC(f, [a, b], N) \right| \leq \frac{(b-a)^5}{2880 N^4} K,$$

donde $SC(f, [a, b], N)$ es el resultado de aplicar Simpson compuesto. Si N es "suficientemente grande" frente al valor $b - a$, el error disminuye significativamente.

Ejercicio 8. Empleando la regla de Simpson simple y la regla del trapecio compuesta para $N = 20$, calcula dos aproximaciones de π teniendo en cuenta que

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} \, \mathrm{d}x = \pi.$$

Referencias

[1] J.M. Sanz-Serna. "Diez lecciones de cálculo numérico (Segunda edición)". Universidad de Valladolid (Secretariado de Publicaciones e Intercambio Editorial), 2010.