Capítulo 4

Diferenciación e integración numérica

4.1. Introducción

Tanto en ciencias como en ingeniería, e incluso en otras áreas como la economía, dinámica social, etc., se estudian sistemas que cambian y por tanto existe el interés de entender la manera en que ocurren esos cambios. En la formación básica de ingeniería y ciencias, la matemática del cambio se aborda formalmente en los cursos de cálculo diferencial e integral. Por ejemplo, si se tiene una función $f(x)$ que tiene un comportamiento como el de la figura 4.1, se puede observar que el valor de la función disminuye cuando la variable x cambia desde x_0 hasta x_1.

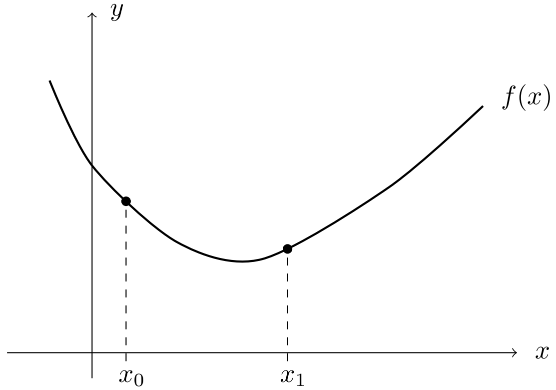

Figura 4.1: cambios en la función $f(x)$.

El cambio en el valor de la función se encuentra dado por $\Delta y = f(x_1) - f(x_0)$. El valor medio de este cambio es

$$\bar{f} = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

Si se toma $\Delta x = x_1 - x_0$, entonces $x_1 = x_0 + \Delta x$ y la ecuación anterior se transforma en

$$\bar{f} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}.$$

Ahora, si Δx se hace tender a cero, o en forma equivalente $x_1 \to x_0$, se llega a la expresión que define la derivada de la función $f(x)$ en x_0:

$$f'(x_0) = \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_0} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}. \tag{4.1}$$

4.2. Aproximaciones a la derivada

Si el conocimiento de la función se tiene mediante una tabla de datos, la definición de la ecuación 4.1 no se puede aplicar. Sin embargo, si los puntos x_i y x_{i+1} están cerca y por lo tanto Δx es pequeño, es posible calcular la primera derivada en x_i con la aproximación:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x}. \tag{4.2}$$

Aunque puede ser que la ecuación 4.2 sea una excelente aproximación, no hay conocimiento del error que se comete y esto podría ser una desventaja. Una mejor opción es suponer que la función $f(x)$ y todas sus derivadas se conocen en x_i y por lo tanto al expandir en serie de Taylor alrededor de x_i, el valor de $f(x_{i+1})$ se obtiene mediante la expresión

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)\,(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}\,(x_{i+1} - x_i)^2 + \cdots \tag{4.3}$$

Al despejar $f'(x_i)$ se tiene que

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \frac{f''(x_i)}{2!}h - \cdots .$$

donde $h = x_{i+1} - x_i$. De lo anterior, se desprende que se puede aproximar la primera derivada con

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h},$$

cometiendo el error

$$E = \frac{f''(x_i)}{2!}h + \cdots .$$

Ahora, notar que si el paso h es pequeño, el primer término domina el error E, y por tanto se tiene que $E = O(h)$ de acuerdo a la notación introducida en la sección 1.6.

Observación: se puede argumentar que la última expresión para aproximar la primera derivada es idéntica a 4.2, sin embargo, la última brinda información sobre el error cometido y por tanto representa una mejora.

Con el fin de unificar la notación, la primera derivada en diferencias hacia adelante es

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}, \tag{4.4}$$

con error $O(h)$. Ahora, si la serie de Taylor 4.3, se hubiera evaluada en x_{i-1}, se tendría en dicho caso

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) + f'(x_i)\,(x_{i-1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}\,(x_{i-1} - x_i)^2 + \cdots$$

Al hacer $h = x_i - x_{i-1}$, se obtiene

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 - \cdots \tag{4.5}$$

Nuevamente, al despejar $f'(x_i)$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + \frac{f''(x_i)}{2!}h - \cdots,$$

expresión que también es válida para aproximar la primera derivada y como se puede observar, con término de error $O(h)$. Como se considera el punto inmediatamente anterior, entonces, la expresión

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}, \tag{4.6}$$

se conoce como primera derivada en diferencias hacia atrás.

Ejemplo 24. Dada una función $f(x)$, se conoce la información dada por la tabla 4.1. Calcular $f'(x_2)$ usando tanto diferencias hacia adelante como hacia atrás.

i	x_i	$f(x_i)$
0	0.2	0.45
1	0.3	0.57
2	0.4	0.71
3	0.5	0.88
4	0.6	1.08

Cuadro 4.1: información de $f(x)$.

Solución: notar que $h = 0.1$. Usando diferencias hacia adelante, $f'(x_2) = \dfrac{f(x_3) - f(x_2)}{h}$, de donde $f'(x_2) = \dfrac{0.88 - 0.71}{0.1} = 1.7$. Similarmente, con diferencias hacia atrás, $f'(x_2) = \dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{h}$, de donde se concluye que $f'(x_2) = \dfrac{0.71 - 0.57}{0.1} = 1.4$. ♢

En los dos casos vistos hasta ahora, diferencias hacia adelante y diferencias hacia atrás, se ha insistido que el error cometido es proporcional a la magnitud de h y por tanto es de esperarse que si h es pequeño, entonces el error también lo será. El problema es que h no se puede hacer tan pequeño en términos prácticos, pues valores cercanos a cero pueden afectar la precisión de la máquina, o presentarse errores de división por cero. Lo anterior lleva a buscar fórmulas o métodos que puedan lograr una precisión alta sin tener que utilizar un paso muy pequeño.

Para mejorar la anterior situación, se puede observar que si h es pequeño, (por ejemplo, menor que uno) entonces h^2 lo será aún más y h^3 inclusive más. De acuerdo a lo anterior, si se encuentra una fórmula en el que el término de error sea proporcional a una potencia alta de h, seguro se tendrá una manera más confiable de aproximar la primera derivada.

Considerar ahora que las series 4.3 y 4.5

$$
\begin{aligned}
f(x_{i+1}) &= f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + \cdots \\
f(x_{i-1}) &= f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 - \frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + \cdots
\end{aligned}
$$

se restan. Notar que algunos términos se cancelan y por tanto

$$f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}) = 2f'(x_i)h + O\big(h^3\big)\,.$$

Al despejar $f'(x_i)$ se obtiene

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + O\big(h^2\big)\,, \tag{4.7}$$

con lo que se obtiene una fórmula con error $O\big(h^2\big)$, que de acuerdo a lo argumentado anteriormente, ofrece una mejor aproximación a la primera derivada sin tener que tomar h peligrosamente pequeños. La expresión 4.7, que frecuentemente también se escribe como

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h}, \tag{4.8}$$

se conoce como primera derivada en diferencias centradas. Notar que para un paso h, si se reduce a la mitad, el error se reduce en una cuarta parte, mientras que en los casos de error $O(h)$, la redución sería también a la mitad.

4.3. Extrapolación de Richardson

En el cálculo de la derivada, las fórmulas de la sección 4.2 aunque pueden dar una buena aproximación, dependen del valor de h elevado a cierta potencia n. Como se argumentó en su momento, entre mayor sea el valor de n, se reduce la necesidad de un paso h tan pequeño y con ello los riesgos inherentes asociados a una eventual división por cero.

Por otro lado, cuando se trabaja con una tabla de datos, el valor real V_r de la derivada en general no es posible saberlo, de donde se tendría un error real ε_r definido como el valor real V_r menos el error aproximado V_a:

$$\varepsilon_r = V_r - V_a.$$

En el caso de la primera derivada en diferencias centradas (ecuación 4.8), el error es proporcional al cuadrado del paso h y por tanto

$$V_r = (V_a)_h + Ch^2, \tag{4.9}$$

donde $(V_a)_h$ significa usar un paso h en la ecuación 4.8 y C es una constante desconocida. Si el paso se reduce a la mitad, entonces:

$$V_r = (V_a)_{h/2} + C\left(\frac{h}{2}\right)^2.$$

Notar que la constante C es igual en las últimas dos ecuaciones, ya que esta se calcula con los términos restantes de la serie de Taylor centrada en x_i. También es igual el valor real, pues se quiere calcular la primera derivada en x_i. Dado lo anterior, y al multiplicar por cuatro, la última ecuación se transforma en

$$4V_r = 4(V_a)_{h/2} + Ch^2. \tag{4.10}$$

Al restar la ecuación 4.10 de la ecuación 4.9 se tiene

$$-3V_r = (V_a)_h - 4(V_a)_{h/2},$$

de donde al despejar el valor real V_r, se tiene finalmente que

$$V_r = \frac{4}{3}(V_a)_{h/2} - \frac{1}{3}(V_a)_h.$$

La primera derivada $f'(x_i)$ se puede aproximar entonces como

$$f'(x_i) = \frac{4}{3}(f'_{\text{centrada}})_{h/2} - \frac{1}{3}(f'_{\text{centrada}})_h, \tag{4.11}$$

expresión conocida como *extrapolación de Richardson*, donde $(f'_{\text{centrada}})_{h/2}$, se interpreta como la primera derivada en diferencias centradas con paso $h/2$. Lo interesante de la extrapolación de Richardson, es que se puede demostrar que se obtiene un término de error $O(h^4)$.

Ejercicios 10

1. Usando diferencias hacia adelante y hacia atrás, completar el cuadro 4.2.

2. Usando diferencias centradas, completar el cuadro 4.3.

i	x_i	$f(x_i)$	$f'(x_i)$
0	0.4	1.45	
1	0.5	2.57	
2	0.6	3.71	
3	0.7	4.88	
4	0.8	6.12	

Cuadro 4.2: información de $f(x)$.

i	x_i	$f(x_i)$	$f'(x_i)$
0	-0.2	-1.23	
1	0.0	-2.34	
2	0.2	-0.34	
3	0.4	2.46	
4	0.6	4.35	

Cuadro 4.3: información de $f(x)$.

3. Para el intervalo $[a, b]$, función $f(x)$ y entero positivo N dados, partir uniformente el intervalo en nodos x_i, con lo cual $x_i = a + ih$ para $i = 0, \ldots, N$ donde $h = \dfrac{b-a}{N}$. A continuación calcular $(f'_{\text{centrada}})_h$ y $(f'_{\text{centrada}})_{h/2}$ en los nodos x_i. Calcular finalmente $f'(x_i)$ usando extrapolación de Richardson.

   a) $f(x) = e^x$, $N = 10$ en $[0, 1]$.

   b) $f(x) = \sin x - x$, $N = 10$ en $[0, \pi]$.

   c) $f(x) = x^4 - x^3 + 1$, $N = 20$ en $[2, 6]$.

   d) $f(x) = \ln x + 2x$, $N = 30$ en $[3, 7]$.

   e) $f(x) = \tan x - x^2 + 1$, $N = 20$ en $[-1, 0]$.

4. En las mismas situaciones del ejercicio anterior, calcular los valores reales de $f'(x_i)$ y comparar con los obtenidos usando extrapolación de Richardson.

4.4. Aproximaciones a la integral definida

En el curso de cálculo integral, es usual tratar el problema del área bajo la función $f(x)$ mediante el cálculo de sumas de Riemann. Para ello, suponer que el intervalo $[a, b]$ se ha dividido en subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$, donde $x_0 = a$ y $x_N = b$. Si x_i^* es un punto en el intervalo $[x_{i-1}, x_i]$, entonces la suma de Riemann $\sum_{i=1}^{N} f(x_i^*)\,\Delta x_i$, donde $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, es una aproximación al área bajo la curva como se muestra en la figura 4.2. En dicho caso, la integral de Riemann de f sobre el intervalo $[a, b]$ se define como

$$\int_a^b f(x)\,dx = \lim_{\max \Delta x_i \to 0} \sum_{i=1}^{N} f(x_i^*)\,\Delta x_i, \tag{4.12}$$

siempre que dicho límite exista. Dado que hacer integrales definidas de la anterior manera no es práctico, el teorema fundamental del cálculo brinda una forma conveniente de hacer las cuentas. Para ello, es necesario calcular primitivas o antiderivades. El problema es que no todas las funciones tienen primitiva en términos elementales[1]. Basta considerar el conocido caso de la función $f(x) = e^{-x^2}$. Dado lo anterior, es necesario desarrollar métodos que brinden aproximaciones al problema del área bajo la curva. En la secciones 4.5 y 4.6 se exponen algunos de ellos.

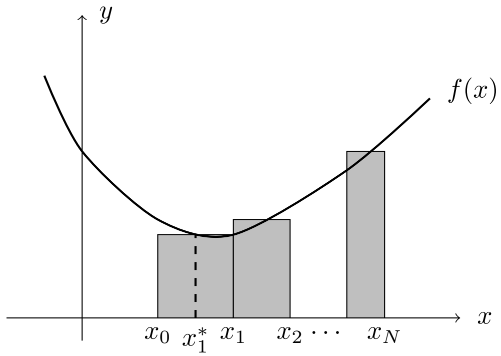

Figura 4.2: sumas de Riemann.

4.5. Regla de los trapecios

La regla de los trapecios se obtiene al aproximar el área bajo la gráfica de $f(x)$ en un intervalo $[a, b]$ mediante un trapecio como se observa en la figura 4.3. Notar que el área sombreada en dicha figura corresponde a $\dfrac{f(a) + f(b)}{2}(b-a)$, y por tanto en dicho intervalo se tiene que

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{f(a) + f(b)}{2}(b - a). \tag{4.13}$$

Ahora, si el intervalo $[a, b]$ se divide en N subintervalos $[x_i, x_{i+1}]$, donde $x_0 = a$ y $x_N = b$,

[1]Al respecto se puede consultar el teorema de Liouville del álgebra diferencial, o también el algoritmo de Risch de integración indefinida.

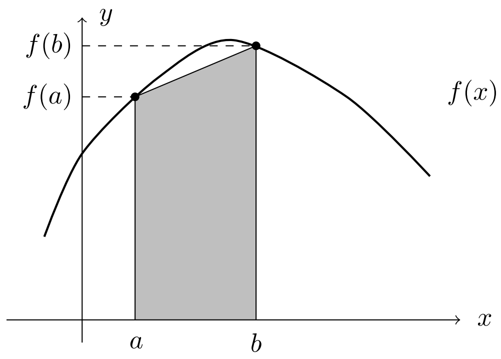

Figura 4.3: regla de los trapecios.

el resultado 4.13 se puede aplicar en cada intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ para obtener

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} \Delta x_i, \tag{4.14}$$

donde $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$. La expresión 4.14 se conoce como *regla del trapecio compuesta.* Ahora, si la partición del intervalo es uniforme, esto es, con todos los subintervalos de igual longitud h, entonces la expresión 4.14 se simplifica en

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{N-1}) + f(x_N)\right], \tag{4.15}$$

la cual se usa en la práctica, pues requiere de menos evaluaciones de la función f que el resultado 4.14.

Sobre el término de error, en el caso de funciones dos veces derivables con continuidad en el intervalo $[a, b]$, se tiene que existe $\xi \in (a, b)$ tal que:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + f(x_N)\right] - \frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\xi). \tag{4.16}$$

Ejemplo 25. Estimar un valor de N que permita una aproximación al valor exacto de $\displaystyle\int_{-1}^{1} e^{-x^2}\,dx$ con una precisión menor a $\varepsilon = 10^{-6}$ al usar la regla del trapecio compuesta.

Solución: si $f(x) = e^{-x^2}$, entonces $f''(x) = e^{-x^2}\left(4x^2 - 2\right)$. Haciendo un análisis de máximos y mínimos, se tiene que el máximo global de $f(x)$ es $4/e^{3/2}$ y se alcanza en $x = \pm\sqrt{\frac{3}{2}}$. Similarmente el mínimo global es -2 y se alcanza en $x = 0$. Dado lo anterior, se tiene la siguiente estimación para el término de error:

$$\left|\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\xi)\right| = \frac{1-(-1)}{12} h^2 \left|f''(\xi)\right| \leq \frac{h^2}{3}.$$

Si se desea alcanzar la precisión dada, se tiene que $\dfrac{h^2}{3} < 10^{-6}$, o en forma equivalente $\dfrac{4}{3N^2} < 10^{-6}$ pues $h = \dfrac{2}{N}$. De lo anterior se sigue que $N > \sqrt{\dfrac{4 \cdot 10^6}{3}} \approx 1154.7$, y por tanto se requiere de $N = 1155$ para obtener la precisión de $\varepsilon = 10^{-6}$. $\diamondsuit$

4.6. Regla de Simpson

En la regla del trapecio, para aproximar el área bajo la curva, se usa interpolación lineal a trozos. Un mejora natural sería usar interpolación de grado superior, y de hecho, si se usan polinomios cuadráticos, se llega a un método conocido como la *regla de Simpson.*

Si se tiene una función f y puntos x_0, x_1 y x_2 (figura 4.4) tales que $h = x_2 - x_1 = x_1 - x_0$, entonces para calcular el área sombreada es necesario integrar el polinomio interpolante

$$P(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2)$$

discutido en la sección 3.2.1.

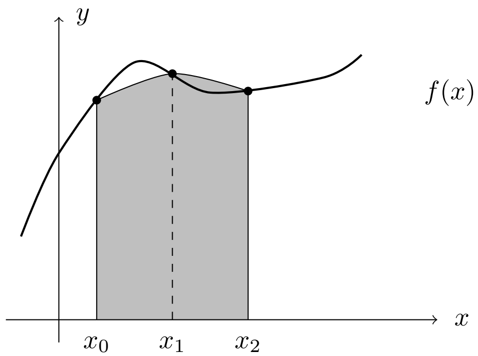

Figura 4.4: regla de Simpson

Para comenzar, dado que $h = x_2 - x_1 = x_1 - x_0$, el polinomio $P(x)$ se puede escribir como

$$P(x) = \frac{f(x_0)}{2h^2}(x-x_1)(x-x_2) - \frac{f(x_1)}{h^2}(x-x_0)(x-x_2) + \frac{f(x_2)}{2h^2}(x-x_0)(x-x_1),$$

de donde, para calcular $\displaystyle\int_{x_0}^{x_2} P(x)\,dx$, es necesario calcular las integrales

$$\int_{x_0}^{x_2} (x-x_1)(x-x_2)\,dx,$$

$$\int_{x_0}^{x_2} (x - x_0)(x - x_2)\, dx,$$

$$\int_{x_0}^{x_2} (x - x_0)(x - x_1)\, dx.$$

Al hacer el cambio de variable $u = x - x_1$, dichas integrales se transforman en

$$\int_{-h}^{h} u(u - h)\, du,$$

$$\int_{-h}^{h} (u + h)(u - h)\, du,$$

$$\int_{-h}^{h} (u + h)u\, du,$$

las cuales tienen valor de $\frac{2h^3}{3}$, $-\frac{4h^3}{3}$ y $\frac{2h^3}{3}$ respectivamente. Se concluye entonces que

$$\int_{x_0}^{x_2} P(x)\, dx = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right],$$

y por tanto

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\, dx \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]. \tag{4.17}$$

Si el intervalo $[a, b]$ se divide en N subintervalos $[x_i, x_{i+1}]$, donde $x_0 = a$ y $x_N = b$ y N es par, el resultado 4.17 se puede aplicar en cada par de subintervalos consecutivos para llegar al siguiente método conocido como *regla de Simpson compuesta*:

$$\int_a^b f(x)\, dx \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{\frac{N}{2}-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} f(x_{2i-1}) + f(x_N)\right]. \tag{4.18}$$

Sobre el término de error, en el caso de funciones cuatro veces derivables con continuidad en el intervalo $[a, b]$, se tiene que existe $\xi \in (a, b)$ tal que:

$$\int_a^b f(x)\, dx = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{\frac{N}{2}-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} f(x_{2i-1}) + f(x_N)\right] - \frac{(b-a)}{180} h^4 f^{(4)}(\xi). \tag{4.19}$$

Ejemplo 26. Estimar un valor de N que permita una aproximación al valor exacto de $\int_{-1}^{1} e^{-x^2}\, dx$ con una precisión menor a $\varepsilon = 10^{-6}$ al usar la regla de Simpson compuesta.

Solución: si $f(x) = e^{-x^2}$, entonces $f^{(4)}(x) = 4e^{-x^2}\left(4x^4 - 12x^2 + 3\right)$ y $\left|f^{(4)}(\xi)\right| \leq 12$ con razonamientos similares al ejemplo 25. Dado lo anterior, se tiene la siguiente estimación para el término de error:

$$\left|\frac{(b-a)}{180}h^4 f^{(4)}(\xi)\right| = \frac{1-(-1)}{180}h^4\left|f^{(4)}(\xi)\right| \leq \frac{2h^4}{15}.$$

Si se desea alcanzar la precisión dada, se tiene que $\dfrac{2h^4}{15} < 10^{-6}$, o en forma equivalente $\dfrac{32}{15N^4} < 10^{-6}$ pues $h = \dfrac{2}{N}$. De lo anterior se sigue que $N > \sqrt[4]{\dfrac{32 \cdot 10^6}{15}} \approx 37.905$, y por tanto se requiere de $N = 38$ para obtener la precisión de $\varepsilon = 10^{-6}$. Notar la buena mejora con respecto al ejemplo 25. $\diamondsuit$

Ejercicios 11

1. Aproximar las siguientes integrales usando la regla del trapecio compuesta con $N = 40$.

   a) $\displaystyle\int_0^1 e^{-2x+5}\,dx$

   b) $\displaystyle\int_2^6 x\ln(x)\,dx$

   c) $\displaystyle\int_0^{\pi} \cos^2(x)\,dx$

   d) $\displaystyle\int_{-2}^2 \frac{1}{1+x^2}\,dx$

   e) $\displaystyle\int_{10}^{15}\left(1+\sqrt{x^2+1}\right)dx$

   f) $\displaystyle\int_0^4 \sin\left(e^x\right)\,dx$

2. Aproximar las siguientes integrales usando la regla de Simpson compuesta con $N = 10$.

   a) $\displaystyle\int_0^1 e^{-2x+5}\,dx$

   b) $\displaystyle\int_2^6 x\ln(x)\,dx$

   c) $\displaystyle\int_0^{\pi} \cos^2(x)\,dx$

   d) $\displaystyle\int_{-2}^2 \frac{1}{1+x^2}\,dx$

   e) $\displaystyle\int_{10}^{15}\left(1+\sqrt{x^2+1}\right)dx$

   f) $\displaystyle\int_0^4 \sin\left(e^x\right)\,dx$

3. Estimar un valor de N que permita una aproximación al valor exacto de $\displaystyle\int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos x\,dx$ con una precisión menor a $\varepsilon = 10^{-8}$ al usar la regla del trapecio compuesta.

4. Estimar un valor de N que permita una aproximación al valor exacto de $\displaystyle\int_1^2 e^x \sin x\,dx$ con una precisión menor a $\varepsilon = 10^{-8}$ al usar la regla de Simpson compuesta.