

CLASE

6

Métodos Numéricos

Diferenciación Numérica

Educación de calidad

INTRO DUC CIÓN DE LA CLASE

GRADO / POSGRADO / TECNOLOGÍAS

Estudia a tu tiempo
son interrupciones



En esta clase se aborda la diferenciación numérica como procedimiento para aproximar derivadas cuando la expresión analítica de una función no está disponible o cuando se trabaja con datos discretos, partiendo del concepto de derivada como límite del cociente incremental, lo que permite construir fórmulas aproximadas mediante desarrollos en series de Taylor, destacando su importancia en contextos donde la información proviene de mediciones o simulaciones, y analizando la relación entre el tamaño del paso, la precisión y la estabilidad del método, para luego desarrollar fórmulas como diferencias hacia adelante y centradas, evaluando su deducción y el orden de error asociado, así como la influencia del paso en el error total y su interacción con el redondeo, con el objetivo de que el estudiante pueda estimar errores y aplicar estas técnicas de forma adecuada en problemas reales.

Además, se introduce la integración numérica como herramienta para aproximar integrales definidas cuando no existe una solución analítica o solo se dispone de datos discretos, partiendo de su interpretación como área bajo la curva y su relación con sumas de Riemann, lo que permite entender el paso de lo continuo a lo discreto, para luego estudiar métodos básicos como la regla del trapecio y la regla de Simpson 1/3, analizando su construcción, nivel de precisión y condiciones de uso, junto con el estudio del error en función del tamaño del paso y de las propiedades de la función, permitiendo al estudiante aplicar estos métodos, estimar la precisión obtenida y elegir la técnica más adecuada según el problema.

Resultado o resultados de aprendizaje que será abordado con el contenido de la clase.

- 1) Analizar problemas matemáticos y computacionales utilizando métodos numéricos adecuados para su solución aproximada.
- 2) Aplicar técnicas numéricas en la resolución de problemas propios de la ingeniería y las ciencias computacionales.
- 3) Evaluar resultados numéricos considerando el error, la estabilidad y la confiabilidad de los métodos empleados.

Reto # (3)

Diferenciación Numérica

En las clases anteriores hemos trabajado con interpolación y aproximación de funciones. Ahora abordamos la diferenciación numérica, técnica esencial para aproximar derivadas cuando la función $f(x)$ es conocida solo en puntos discretos o su expresión analítica es compleja o inexistente.

La diferenciación numérica es una técnica utilizada para aproximar el valor de las derivadas de funciones cuando no es posible obtenerlas de forma analítica o cuando solo se dispone de datos discretos. En lugar de calcular la derivada de una función de manera simbólica, la diferenciación numérica emplea métodos que utilizan valores discretos de la función en puntos cercanos para aproximar las derivadas.

El método de diferencias hacia adelante se basa en aproximar la derivada utilizando los valores de la función en un punto y en el siguiente, lo que resulta en una fórmula sencilla para obtener una estimación de la derivada. Es especialmente útil cuando se tienen datos secuenciales y la función está definida en puntos discretos cercanos entre sí. Sin embargo, aunque es fácil de implementar, este método tiene una precisión limitada y un error que puede crecer a medida que aumenta el paso entre los puntos discretos. En cambio, las diferencias centradas son una técnica más precisa que utiliza valores de la función en ambos lados del punto de interés, es decir, en el punto anterior y en el siguiente. Esto permite obtener una aproximación más simétrica y, por lo tanto, más precisa de la derivada, ya que la estimación está basada en un promedio de las tasas de cambio en ambos sentidos.

Aproximación numérica de derivadas

La derivada primera de una función f en un punto x se define como:

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

En diferenciación numérica aproximamos esta derivada usando valores finitos de h (paso de discretización) y evaluaciones de f en puntos cercanos a x . El objetivo es obtener fórmulas con

error pequeño para h pequeño, pero considerando que h no puede ser arbitrariamente pequeño debido a errores de redondeo en aritmética finita.

Las aproximaciones se derivan mediante expansión de Taylor y eliminación de términos de orden bajo.

Teorema general de error (expansión de Taylor): Si $f \in C^{k+1}$ en un intervalo alrededor de x , entonces $f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(\xi_1)$, $\xi_1 \in (x, x+h)$ o versiones más precisas con términos superiores.

Enlace 1: https://en.wikipedia.org/wiki/Finite_difference Ver en Wikipedia: Finite difference
Este artículo presenta fórmulas forward, backward, centradas, coeficientes de error y orden de precisión.

Diferencias hacia adelante

Formulación matemática formal

La aproximación de diferencias hacia adelante (forward difference) es:

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

Análisis de error (expansión de Taylor):

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

$$\Rightarrow D_h^+ f(x) = f'(x) + \frac{h}{2}f''(\xi)$$

Por lo tanto, el error de truncamiento es:

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

El orden de precisión es 1 (error $O(h)$).

Error total: Error de truncamiento $O(h)$ + error de redondeo $\approx \epsilon_{\text{machine}}/|h|$ (donde $\epsilon_{\text{machine}} \approx 10^{-16}$ en doble precisión). El error total se minimiza cuando $h \approx \sqrt{(\epsilon_{\text{machine}} \cdot |f''(x)|/2)}$, típicamente $h \approx 10^{-8}$ para doble precisión.

Diferencias centradas

La aproximación de diferencias centradas (central difference) es:

$$D_h^0 f(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

Análisis de error (expansión de Taylor):

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_1)f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_2)$$

$$\Rightarrow f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + \frac{h^3}{6}[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)]$$

$$\Rightarrow D_h^0 f(x) = f'(x) + \frac{h^2}{6}f'''(\xi) \text{ para algún } \xi \text{ entre } x-h \text{ y } x+h.$$

Por lo tanto, el error de truncamiento es:

$$E = f'(x) - D_h^0 f(x) = -\frac{h^2}{6}f'''(\xi) = O(h^2)$$

El orden de precisión es 2 (error $O(h^2)$), mucho mejor que las diferencias hacia adelante.

Error total: truncamiento $O(h^2)$ + redondeo $\approx \epsilon_{\text{machine}} / h$. Mínimo global cuando $h \approx (3\epsilon_{\text{machine}}|f'''(x)|)^{1/3}$, típicamente $h \approx 10^{-5}$ a 10^{-6} en doble precisión.

TRUNCATION ERROR COMPARISON: Forward Difference $O(h)$ vs Centered Difference $O(h)^2$

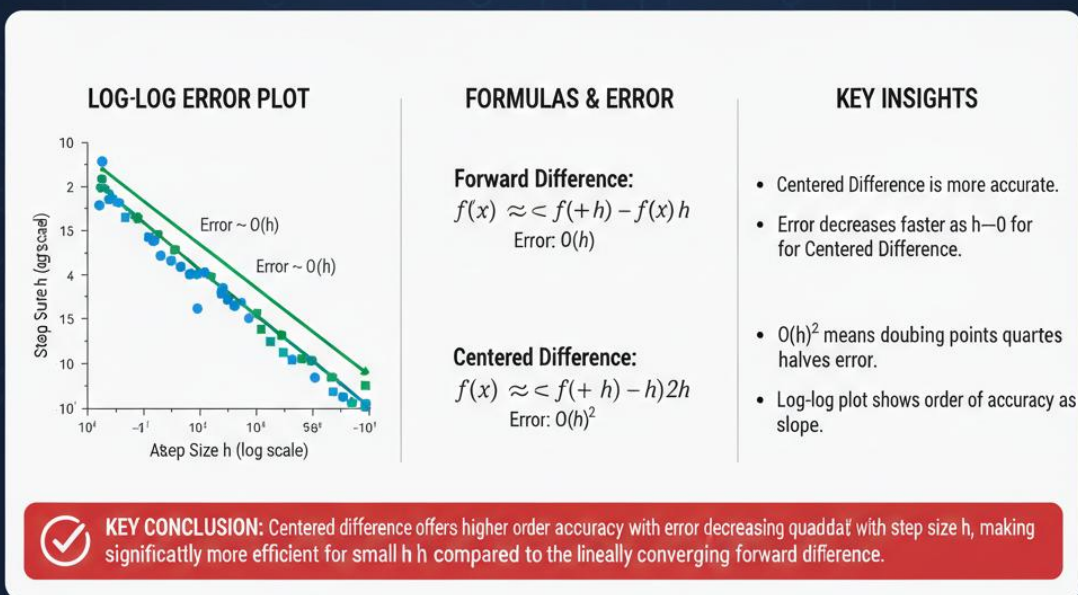


Figura 1: Comparación de error de truncamiento: $O(h)$ para forward vs $O(h^2)$ para centradas (log-log plot).

Creación propia.

Error en la diferenciación numérica

Error total $\approx$ error de truncamiento + error de redondeo + error de cancelación.

- **Error de truncamiento:** depende del orden del método ($O(h^p)$ donde $p=1$ para forward, $p=2$ para centradas, $p=4$ para fórmulas de Richardson o diferencias de orden superior).
- **Error de redondeo:** al evaluar $f(x \pm h)$ se introduce error $\approx \epsilon_{\text{machine}} |f(x)|$; al restar se produce cancelación catastrófica cuando h es muy pequeño (los dígitos significativos se pierden).
- **Error de cancelación:** en diferencias finitas, la resta $f(x+h) - f(x-h)$ cancela los términos de orden bajo, pero si $h \ll 1$ y f varía poco, se pierden dígitos significativos.

Balance óptimo: Para diferencias forward: $error_{total} \approx \frac{h}{2} |f''| + \frac{2\epsilon_m |f|}{h}$ Mínimo cuando

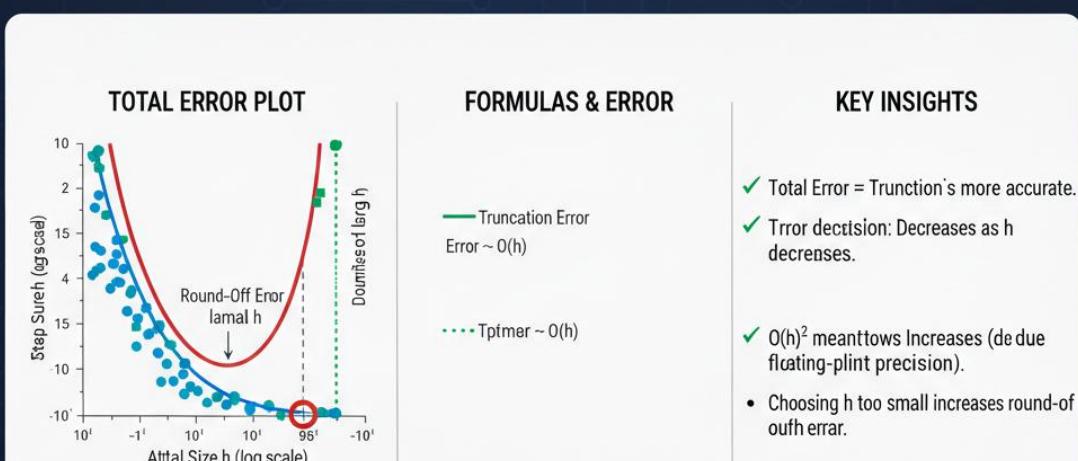
$$h_{opt} \approx \sqrt{\frac{4\epsilon_m |f|}{|f''|}}$$

Para diferencias centradas: $error_{total} \approx \frac{h^2}{6} |f'''| + \frac{2\epsilon_m |f|}{h}$ Mínimo cuando $h_{opt} \approx$

$$\left(\frac{12\epsilon_m |f|}{|f'''|} \right)^{1/3}$$

Fórmulas de orden superior (Richardson extrapolation o diferencias de 4 puntos): Ejemplo de centradas de orden 4: $f'(x) \approx \frac{-f(x+2h)+8f(x+h)-8f(x-h)+f(x-2h)}{12h}$ Error $O(h^4)$.

TOTAL ERROR VS COMPARISON: Truncation Difference $O(h)$ vs Centered Round-off $O(h)^4$ Visualizing Optimal Step Size



KEY CONCLUSION: Centered difference offers higher order accuracy with error decreasing quadratically with step size h , making significantly more efficient for small h compared to the forward difference.

Figura 2: Error total vs h: curva típica con mínimo (truncamiento domina a la derecha, redondeo a la izquierda).

Creación propia.

Integración Numérica I

En la clase anterior vimos la diferenciación numérica para aproximar derivadas. Ahora pasamos a la integración numérica (o cuadratura numérica), técnica para aproximar el valor de una integral definida $\int_a^b f(x)dx$ cuando la antiderivada analítica no existe, es complicada o la función f se conoce solo en puntos discretos.

La integración numérica es una técnica utilizada para calcular aproximaciones del valor de una integral definida cuando no es posible obtener una solución analítica, o cuando se trabaja con datos discretos. En lugar de resolver la integral de manera exacta, la integración numérica se enfoca en estimar el valor del área bajo una curva utilizando métodos que se basan en la evaluación de la función en puntos discretos dentro del intervalo de integración. Esta técnica es fundamental en situaciones donde la integral de una función es difícil de calcular debido a su complejidad o a la falta de una expresión explícita.

Uno de los métodos más sencillos de integración numérica es la regla del trapecio. Este método aproxima el área bajo la curva dividiendo el intervalo de integración en subintervalos y aproximando cada subintervalo con un trapecio, es decir, una figura geométrica que conecta los puntos extremos de cada subintervalo con una línea recta. La regla del trapecio es bastante simple de implementar y proporciona una estimación razonablemente precisa cuando la función es relativamente suave. Sin embargo, su precisión depende de cuán pequeña sea la partición del intervalo, ya que un mayor número de subintervalos mejora la aproximación.

Otro método ampliamente utilizado es la regla de Simpson 1/3, que es más precisa que la regla del trapecio. Este método utiliza un polinomio cuadrático para aproximar la función en cada par de subintervalos, lo que mejora la estimación del área bajo la curva. En lugar de aproximar cada subintervalo con un trapecio, la regla de Simpson 1/3 ajusta una parábola a los puntos de los extremos y al punto medio del subintervalo, lo que resulta en una mejor aproximación para funciones suaves. La fórmula es más compleja que la del trapecio, pero la mejora en la precisión justifica su uso en casos donde se requiere una mayor exactitud.

A pesar de su utilidad, la integración numérica está sujeta a errores, los cuales dependen de varios factores, como el tamaño de los subintervalos y la naturaleza de la función a integrar. El error en la integración numérica está relacionado con el comportamiento de la función en el intervalo de integración; por ejemplo, funciones con curvaturas muy pronunciadas o con

discontinuidades pueden generar errores significativos en los resultados obtenidos mediante estos métodos.

Concepto de integración numérica

La integración numérica aproxima la integral definida mediante una suma ponderada de valores de la función en puntos específicos del intervalo $[a, b]$:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$$

donde $\{x_i\}$ son los nodos (puntos de evaluación) y $\{w_i\}$ los pesos (coeficientes).

Estas fórmulas se derivan de la interpolación polinómica (Newton-Cotes) o de métodos ortogonales (Gauss). El objetivo es lograr alta precisión con pocos puntos de evaluación, minimizando el costo computacional.

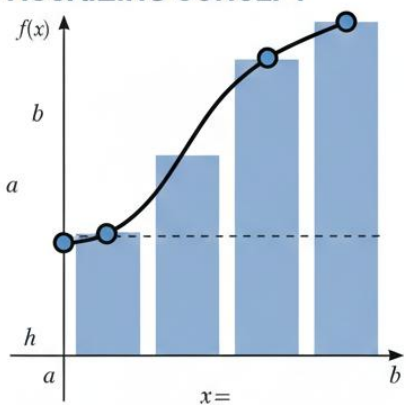
Teorema de precisión de grado (para fórmulas de Newton-Cotes): Una fórmula de cuadratura con $n+1$ puntos tiene grado de precisión m si integra exactamente polinomios de grado $\leq m$. Para fórmulas cerradas de Newton-Cotes con $n+1$ puntos, el grado es n si n par, $n-1$ si n impar (excepto casos especiales como Simpson).

Error de truncamiento: surge de la diferencia entre $f(x)$ y su interpolador polinómico; depende de la derivada de orden superior de f .

BASIC CONCEPT NUMERICAL INTEGRATION

Approximating Area Under the Curve by Weighted Point Sum

VISUALIZING CONCEPT



FORMULA & EXPLANATION

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n f(x_i) \Delta x$$

KEY INSIGHTS

- Approximates area of a definite integral.
- Divides area into small shapes (rectangles/trapezoids).
- Sums areas of these shapes.
- Accuracy improves as h gets smaller (n increases).
- Fundamental to computational mathematics.

KEY CONCLUSION

Numerical integration estimates the definite integral by summing weighted function values at discrete points, offering powerful method to solve integrals that lack analytical solutions.

Figura 3: Concepto básico de integración numérica: aproximación del área bajo la curva mediante suma ponderada de valores puntuales.

Creación propia.

Dependiendo del método utilizado, los puntos en los que se evalúa la función pueden ser los extremos de cada segmento, puntos intermedios o una combinación de ambos. Por ejemplo, en el método del rectángulo (o regla de los trapecios en su variante más sencilla), los valores de la función en los extremos de cada subintervalo se multiplican por la longitud del subintervalo y luego se suman para obtener una aproximación del área. Métodos más precisos, como la regla de Simpson, utilizan más puntos y ponderaciones más sofisticadas para mejorar la precisión de la estimación.

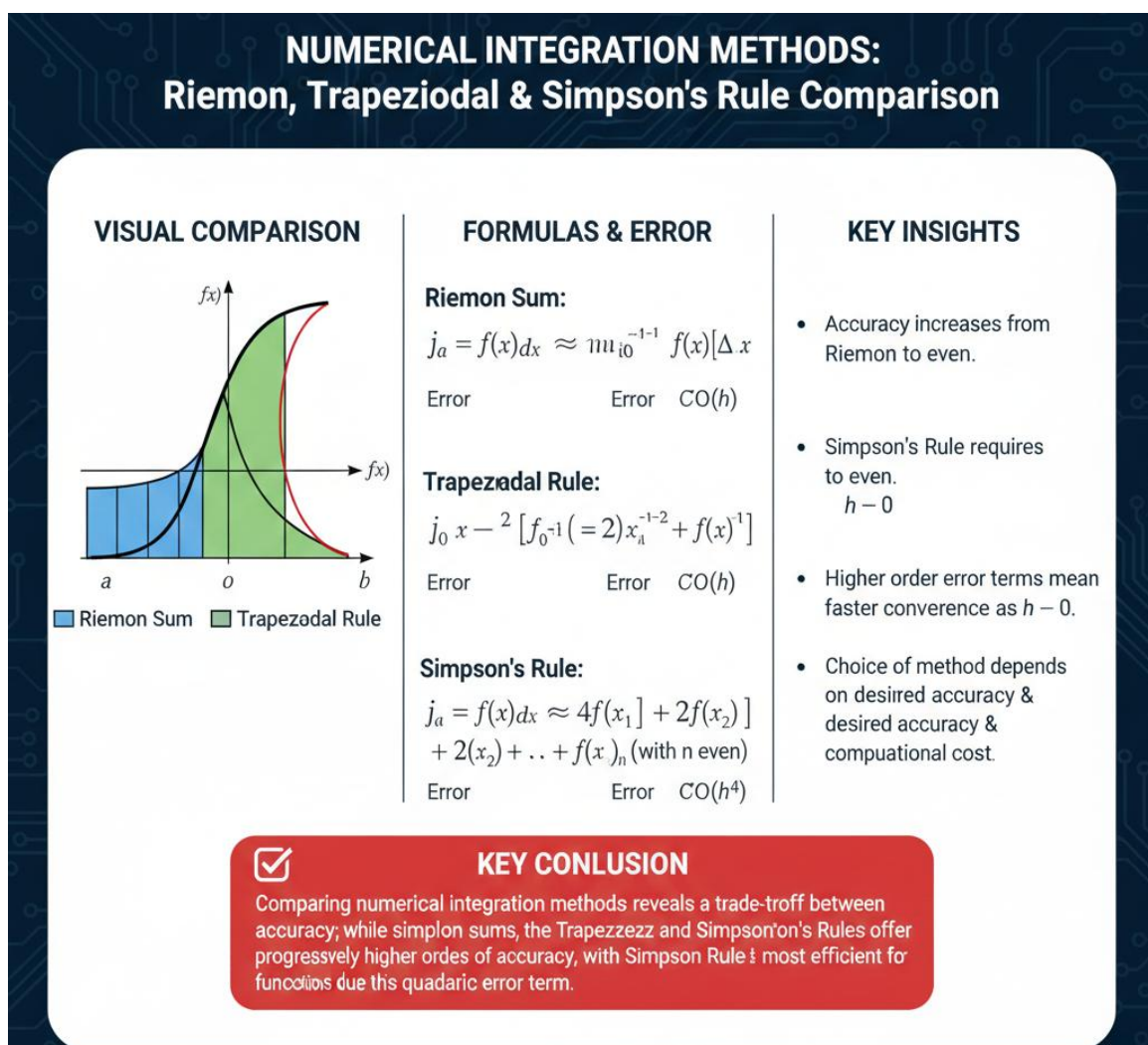


Figura 4: Comparación entre suma de Riemann simple y métodos más precisos (trapezio, Simpson).

En la suma de Riemann simple, el intervalo $[a, b]$ se divide en varios subintervalos y, en cada subintervalo, la función se evalúa en un único punto, típicamente el extremo izquierdo, derecho o el punto medio del subintervalo. La aproximación del área bajo la curva se realiza

sumando las áreas de los rectángulos formados por estos valores puntuales y la longitud de los subintervalos. Este método es básico y suele ser menos preciso, ya que solo utiliza información de los valores de la función en puntos específicos sin tener en cuenta la forma de la curva.

Regla del trapecio

Formulación matemática formal

La regla del trapecio simple aproxima la integral en $[a, b]$ por el área de un trapecio:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$$

Regla del trapecio compuesta (divide $[a, b]$ en n subintervalos de ancho $h = (b-a)/n$, nodos $x_i = a + i h$, $i=0, \dots, n$):

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2} [f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)]$$

Análisis de error (teorema): Si $f \in C^2[a, b]$, entonces el error compuesto es:

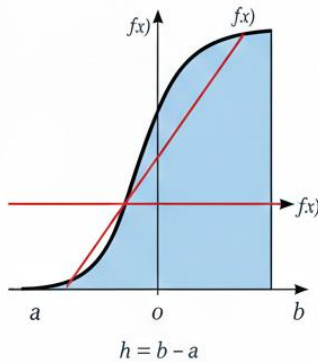
$$E_T = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi) \text{ para algún } \xi \in [a, b]$$

$$\Rightarrow |E_T| \leq \frac{(b-a)h^2}{12} \max_{\xi \in [a, b]} |f''(\xi)| = O(h^2)$$

El orden de precisión es 2 (exacta para polinomios de grado ≤ 1).

SIMPLE TRAPEZOIDAL RULE: Approximating Area with Single Trapezoid

VISUALIZING CONCEPT



FORMULA & EXPLANATION

$$\int_a^b f(x) dx \approx \left[\frac{f(a) + f(b)}{2} \right] (b - a)$$

Error $\propto h^3$

Explanation:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \left[\frac{f(a) + f(b)}{2} \right] (b - a)$$

✓ Area of the single trapezoid with straight line.

✓ Connects $f(a)$ & $f(b)$ with straight line.
Error is proportional to h^3

Error $\propto h^3$

KEY INSIGHTS

- Simple & easy to implement.
- More accurate than a simple sum.
- Approximation is poor for highly curved functions.
- Foundation for composite trapezoidal rule.



KEY CONCLUSION

The simple trapezoidal rule provides a basic yet effective method for approximating the area under a curve by approximating the area as single trapezoids for smooth functions.

Figura 5: Regla del trapecio simple: área del trapecio entre $f(a)$ y $f(b)$.

Creación propia.

La área del trapecio se calcula utilizando la fórmula estándar de área para un trapecio, que es:

$$A = \frac{1}{2} \cdot (b - a) \cdot (f(a) + f(b))$$

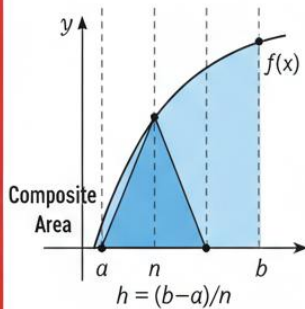
En esta fórmula:

- $(b - a)$ es la base del trapecio, que es la longitud del intervalo.
- $f(a)$ y $f(b)$ son las alturas del trapecio, es decir, los valores de la función en los extremos a y b respectivamente.

El método del trapecio simple supone que la función $f(x)$ es aproximada linealmente entre a y b , lo que implica que se considera una línea recta que conecta los dos puntos $(a, f(a))$ y $(b, f(b))$, y el área bajo la curva se calcula como el área bajo esta línea recta, que forma un trapecio.

COMPOSITE TRAPEZIODAL RULE: Sum of Areas on Subintervals

VISUALIZING CONCEPT



FORMULA & EXPLANATION

$$\frac{1}{2} \left[f(a) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(b) \right]$$

$$\text{Error} = O(h^2)$$

- Divides interval $[a, b]$ into n subintervals.
- Applies trapezoidal rule to each subinterval.
- Sums individual trapezoidal areas.

KEY INSIGHTS

- ✓ Improved accuracy with smaller h (larger n).
- ✓ Error is proportional h^2 functions.
- ✓ Versatile for various applications.
- ✓ Widely used in numerical applications.

KEY CONCLUSION



The composite trapezoidal rule enhances accuracy by summing multiple trapezoids over subintervals, offering a robust method for approximating definite integrals with a higher order of convergence.

Figura 6: Regla del trapecio compuesta: suma de trapecios en subintervalos.

Creación propia.

Regla de Simpson 1/3

Formulación matemática formal

La regla de Simpson 1/3 simple aproxima la integral en $[a, b]$ usando interpolación cuadrática (tres puntos: a , $m=(a+b)/2$, b):

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(m) + f(b)]$$

Regla de Simpson 1/3 compuesta (n par, $h = (b-a)/n$, subintervalos pares):

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4 \sum_{i=1,3,\dots,n-1} f(x_i) + 2 \sum_{i=2,4,\dots,n-2} f(x_i) + f(x_n) \right]$$

Análisis de error (teorema): Si $f \in C^4[a, b]$, entonces el error compuesto es:

$$E_S = -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi) \text{ para algún } \xi \in [a, b]$$

$$\Rightarrow |E_S| \leq \frac{(b-a)h^4}{180} \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)| = O(h^4)$$

El orden de precisión es 4 (exacta para polinomios de grado ≤ 3).

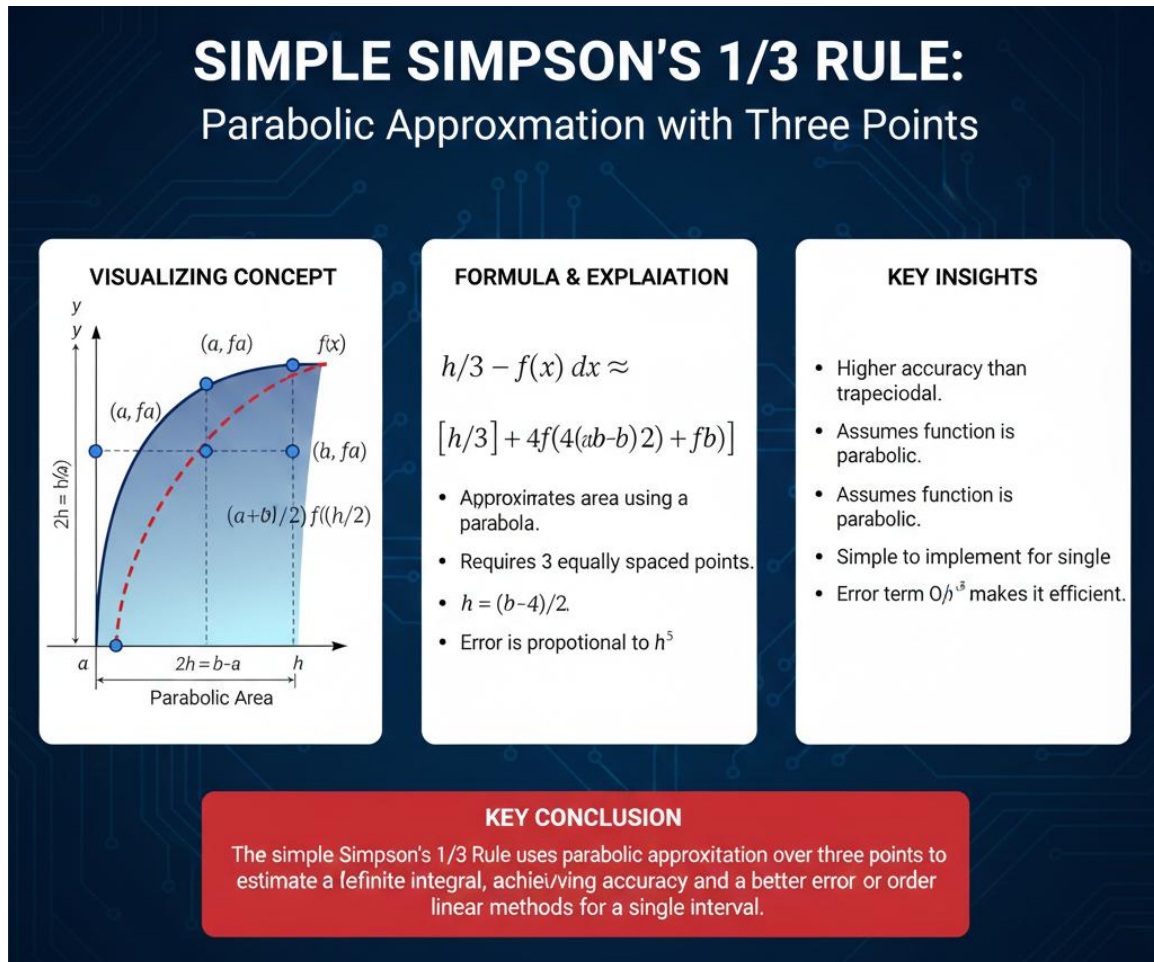


Figura 7: Regla de Simpson 1/3 simple: aproximación parabólica con tres puntos.

Creación propia.

Enlace 2: https://es.wikipedia.org/wiki/Regla_de_Simpson Ver en Wikipedia: Regla de Simpson

Recurso con deducción, fórmula 1/3 compuesta y error $O((b-a)^5 f^{(4)}/180)$.

La fórmula de la regla de Simpson 1/3 es:

$$I \approx \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

En esta fórmula:

- $f(a)$ y $f(b)$ son los valores de la función en los extremos del intervalo.
- $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ es el valor de la función en el punto medio del intervalo.

COMPOSITE SIMPSON'S 1/3 RULE:

Combining Parabolas on Pairs of Subintervals

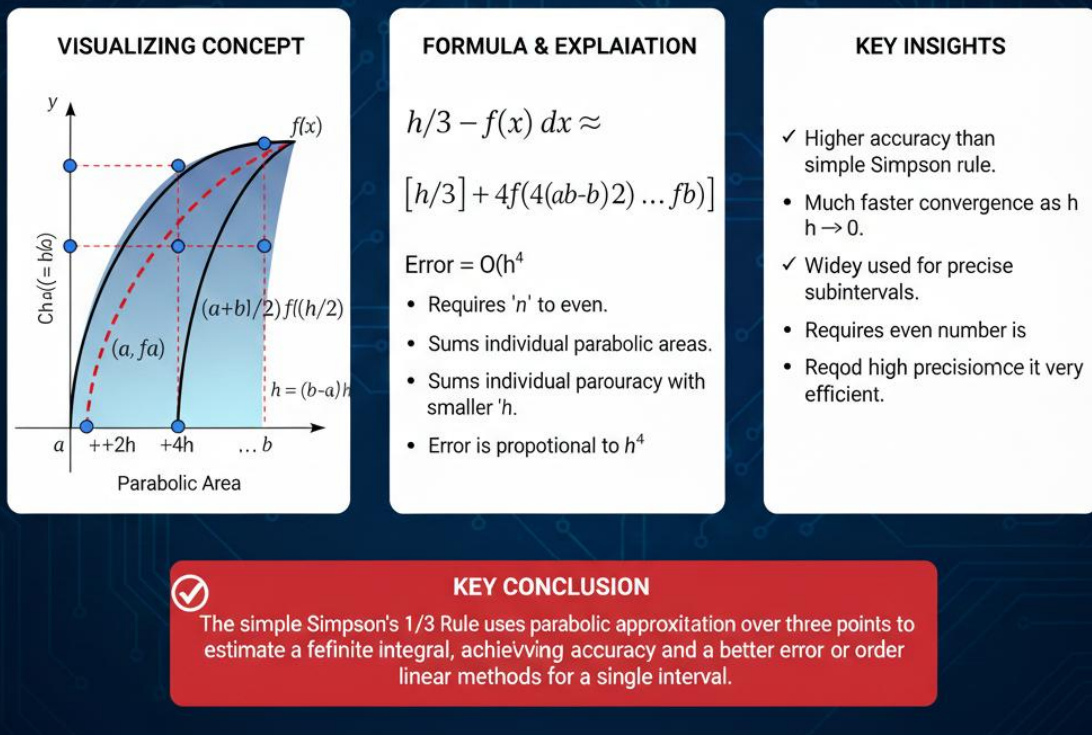


Figura 8: Regla de Simpson 1/3 compuesta: combinación de parábolas en pares de subintervalos.

Creación propia.

En lugar de usar una única parábola para aproximar la función en todo el intervalo, la regla de Simpson compuesta combina parábolas en pares de subintervalos, lo que mejora la precisión de la aproximación.

La idea es dividir el intervalo $[a, b]$ en un número par de subintervalos, de modo que cada par de subintervalos sea aproximado por una parábola. Si el intervalo $[a, b]$ se divide en (n) subintervalos, con (n) siendo un número par, se aplica la regla de Simpson 1/3 a cada par de subintervalos. La fórmula general para la regla de Simpson 1/3 compuesta es:

$$I \approx \frac{h}{3} \left(f(x_0) + 4 \sum_{i=1,3,5,\dots}^{n-1} f(x_i) + 2 \sum_{i=2,4,6,\dots}^{n-2} f(x_i) + f(x_n) \right)$$

Donde:

- $(h = \frac{b-a}{n})$ es el tamaño del subintervalo.
- $(x_0 = a)$ y $(x_n = b)$ son los extremos del intervalo.

- Las sumas de los términos con coeficientes 4 y 2 se realizan sobre los puntos intermedios (x_i) dentro del intervalo, siguiendo el patrón de los coeficientes de la fórmula de Simpson 1/3 simple.

Error en integración numérica

Análisis matemático del error total:

Error total = error de truncamiento + error de redondeo + error de muestreo.

- **Error de truncamiento:** dominante para h no demasiado pequeño; $O(h^2)$ para trapecio, $O(h^4)$ para Simpson.
- **Error de redondeo:** $\approx \varepsilon_{\text{machine}} \cdot (b - a)/h \cdot \max |f|$ (acumulación en suma ponderada).
- **Error de muestreo:** si f no es suave, error aumenta.

Balance óptimo (trapecio): $h_{\text{opt}} \approx [12\varepsilon_{\text{machine}} \max |f| / \max |f''|]^{1/2}$

Simpson: $h_{\text{opt}} \approx [180\varepsilon_{\text{machine}} \max |f| / \max |f^{(4)}|]^{1/4}$

Teorema de convergencia: si f suficientemente suave y $h \rightarrow 0$, el *error* $\rightarrow 0$ (convergencia consistente).

En ciberseguridad: el error en integración afecta la precisión en DPA/CPA (integración de correlación sobre trazas), estimación de áreas bajo curvas de rendimiento (ROC/AUC), y Monte Carlo para probabilidad de éxito de ataques.

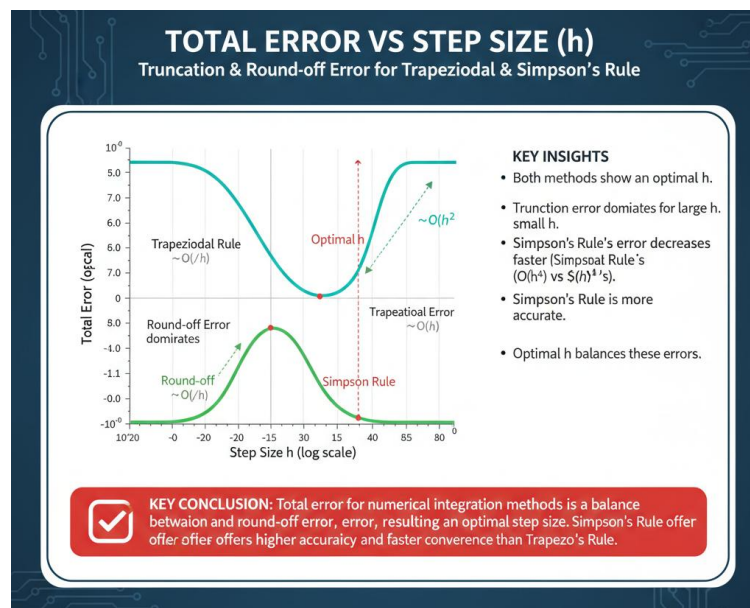


Figura 9: Error total vs h : curva con mínimo (truncamiento domina a la derecha, redondeo a la izquierda) para trapecio y Simpson.

Creación propia.

RE FE REN CIAS

Glosario:

- Doetsch, G. (1974). Introduction to the Theory and Application of the Laplace Transformation. Springer.
- Burden, R. L., Faires, J. D., & Burden, A. M. (2015). Numerical analysis (10ª ed.). Cengage Learning.
- Higham, N. J. (2002). Accuracy and stability of numerical algorithms (2ª ed.). SIAM.
- Atkinson, K. E. (1989). An introduction to numerical analysis. Wiley.
- Paar, C., & Pelzl, J. (2010). Understanding cryptography: A textbook for students and practitioners. Springer.



síguenos en:



www.pucevirtual.puce.edu.ec