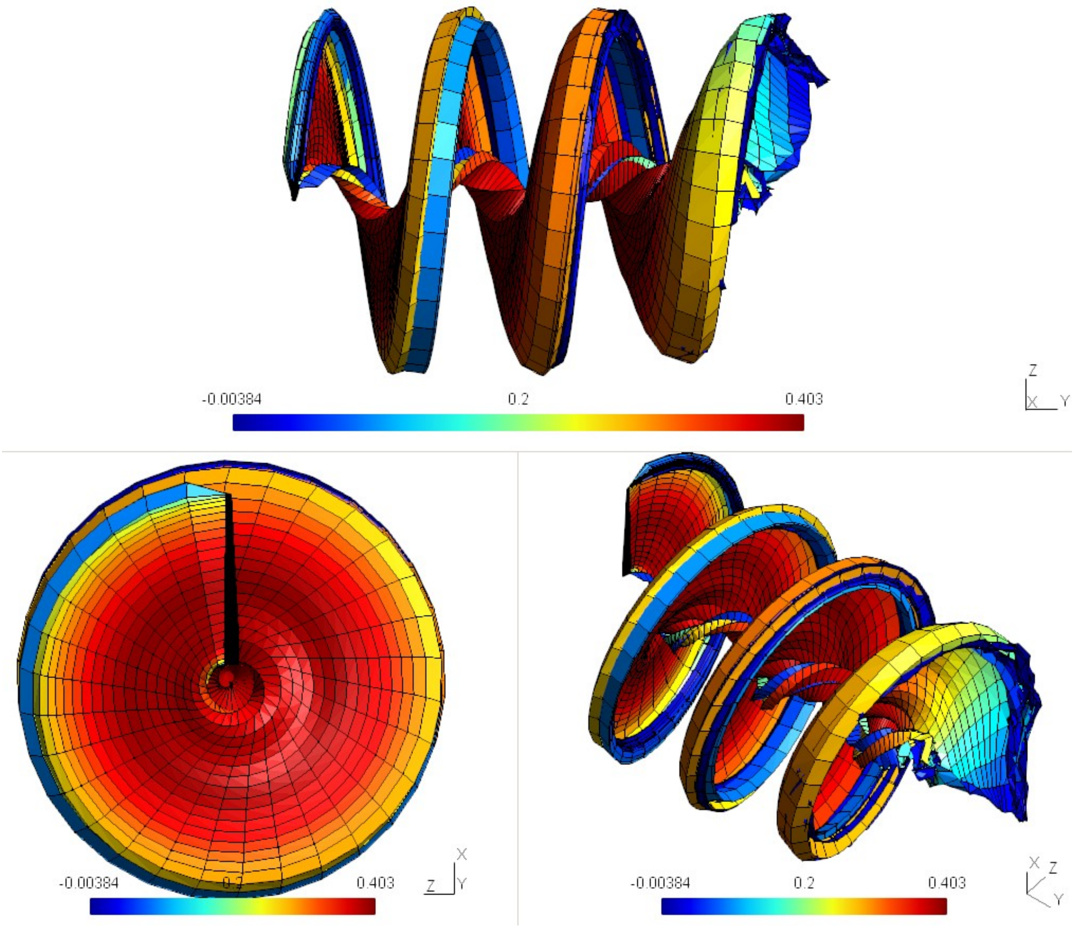


Elementos de Cálculo Numérico (M212)

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
- Integración de Romberg
- Método de Cuadratura de Gauss.

Integración numérica

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

La integración numérica, también conocida como “cuadratura”, es más precisa que la diferenciación numérica por naturaleza. Para aproximar la integral se utiliza una estrategia similar a la sumatoria de Riemann.

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx I = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$

Donde los A_i se denominan **pesos** y las abscisas x_i **nodos**. Los pesos y los nodos dependen del método de cuadratura.

Todos los métodos de cuadratura **se basan en la interpolación polinomial**, por lo tanto son más efectivos cuando la función se puede aproximar por polinomios.

Los métodos se pueden separar principalmente en dos grupos: los derivados por las **fórmulas de Newton-Cotes** y los de **cuadratura de Gauss**. Para el primer caso, los nodos están **equiespaciados**, mientras que para el segundo, los nodos **se colocan** para lograr la máxima precisión posible.

Fórmulas de Newton-Cotes

Consideremos la integral definida $\int_a^b f(x)\,dx$

Comenzamos realizando una partición del intervalo (a,b) en n-1 subintervalos iguales de longitud h=(b-a)/(n-1). Definimos los nodos como los extremos de cada subintervalo y los indicamos por $x_1, x_2, \ldots, x_n$.

Seguidamente se aproxima f(x) interpolando un polinomio de grado n-1.

$$P_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) L_i(x)$$ Donde $L_i(x)$ son las funciones de Lagrange.

Reemplazando en la integral se obtiene

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b P_{n-1}(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} \left(f(x_i) \int_a^b L_i(x)\,dx \right) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$

siendo $A_i = \int_a^b L_i(x)\,dx \,, i = 1,2,\ldots,n$

Fórmulas de Newton-Cotes

Según la cantidad de divisiones de la partición (n), se obtienen distintas reglas de integración.

Las reglas clásicas son:

- Regla del trapecio, n=2
- Regla de ⅓ Simpson, n=3
- Regla de ⅜ de Simpson, n=4

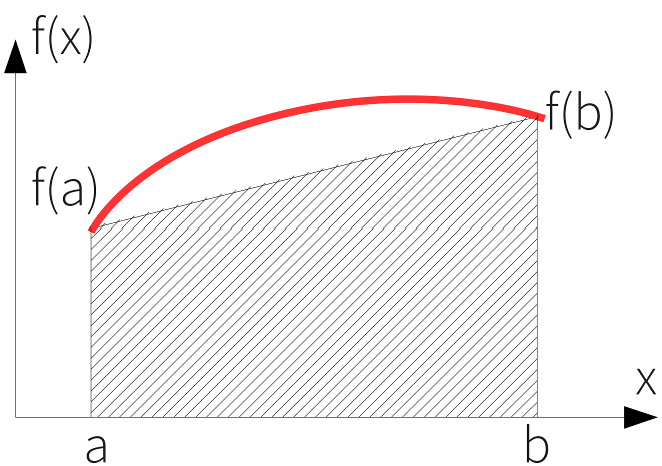
Regla del trapecio

Tomamos $n=2$

$$L_1(x)=\frac{(x-x_2)}{(x_1-x_2)}=\frac{(x-b)}{(a-b)}=-\frac{(x-b)}{h},\ A_1=\int_a^b L_1(x)dx=-\frac{1}{h}\int_a^b (x-b)dx=\frac{h}{2}$$

$$L_2(x)=\frac{(x-x_1)}{(x_2-x_1)}=\frac{(x-a)}{(b-a)}=\frac{(x-a)}{h},\ A_2=\int_a^b L_2(x)dx=\frac{h}{2}$$

substituyendo en la integral $I=\sum_{i=1}^{2} A_i f(x_i)=A_1 f(x_1)+A_2 f(x_2)=\frac{h}{2}[f(a)+f(b)]$



La aproximación resultante representa el área del trapecio definido por la función evaluada en los extremos.

El error de la aproximación es el área total menos el área del trapecio.

$$E=\int_a^b f(x)dx-\frac{h}{2}[f(a)+f(b)]=-\frac{h^3}{12}f''(\zeta)$$

Regla del trapecio compuesta

En la práctica, no se aproxima la integral con un único trapecio,

sino que se parte la integral en n-1 intervalos.

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}\sum_{i=1}^{n-1}[f(x_i)+f(x_{i+1})] = \frac{h}{2}[f(x_1)+2f(x_2)+\ldots+2f(x_{n-1})+f(x_n)]$$

Esta regla se conoce como regla del trapecio compuesta.

El error global :

$$E = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\zeta) = O(h^2)$$

Regla del trapecio recursiva

Sea I_k la integral evaluada con la regla del trapecio compuesta con 2^{k-1} subintervalos.

Llamamos al tamaño del intervalo como H = b-a

$$k=1,\ I_1=[f(a)+f(b)]\frac{H}{2}$$

$$k=2,\ I_2=[f(a)+2f(a+\frac{H}{2})+f(b)]\frac{H}{4}=\frac{1}{2}I_1+f(a+\frac{H}{2})\frac{H}{2}$$

$$k=3,\ I_3=[f(a)+2f(a+\frac{H}{4})+2f(a+\frac{H}{2})+2f(a+\frac{3}{4}H)+f(b)]\frac{H}{8}=\frac{1}{2}I_2+[f(a+\frac{H}{4})+f(a+\frac{3}{4}H)]\frac{H}{4}$$

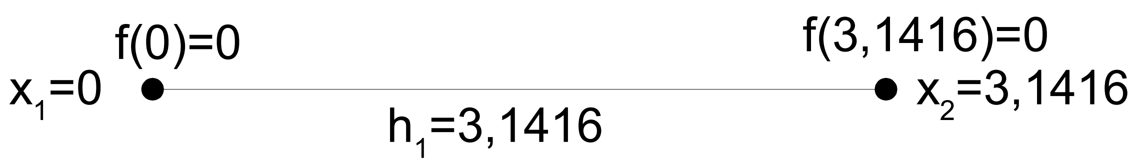
Generalizando $I_k=\frac{1}{2}I_{k-1}+\frac{H}{2^{k-1}}\sum_{i=1}^{2^{k-1}} f[a+\frac{(2i-1)}{2^{k-1}}H],\ k=2,3,\ldots$

O más fácil... $I(h)=\frac{1}{2}I(2h)+h\sum f(x_{new})$, con $h=\frac{H}{(n-1)}$

Ejemplo

$$\int_0^{\pi} sen\,x\,dx = -\cos x \Big|_0^{\pi} = -(-1) + 1 = 2$$

Para 1 panel (subintervalo)



$$I_1 = \frac{h_1}{2}\left[f(x_1) + f(x_2)\right] = \frac{3{,}1416}{2}\left[0+0\right] = 0$$

Ejemplo

Para 2 paneles

$f(1{,}5708)=1$

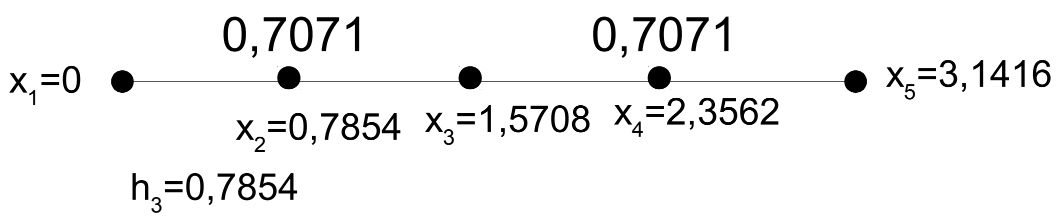
$x_1=0$ $x_2=1{,}5708$ $x_3=3{,}1416$

$h_2=1{,}5708$

$$I_2=\frac{h_2}{2}[f(x_1)+f(x_2)]+\frac{h_2}{2}[f(x_2)+f(x_3)]=\frac{1{,}5708}{2}(0+2(1)+0)=1{,}5708$$

Ejemplo

Para 4 paneles



$$I_3=\frac{h_3}{2}[f(x_1)+f(x_2)]+\frac{h_3}{2}[f(x_2)+f(x_3)]+\frac{h_3}{2}[f(x_3)+f(x_4)]+\frac{h_3}{2}[f(x_4)+f(x_5)]$$

$$I_3=\frac{0{,}7854}{2}(0+2(0{,}7071)+2(1)+2(0{,}7071)+0)=1{,}8961$$

Ejemplo por recursión

$$\int_0^{\pi} sen\, x\, dx = -\cos x \Big|_0^{\pi} = -(-1)+1=2$$

Paneles (n-1)	h=H/(n-1)	I	I_k-I_{k-1}
1	3,1416	(f(a)+f(b))H/2 = (0-0)*3,1416/2=0	0
2	1,5708	0,5*0+1,5708*sen(pi/2)=1,5708	1,5708
4	0,7854	0,5*1,5708+0,7854*(sen(pi/4)+sen(3/4pi))=1,896	0,3252
8	0,3927	0,5*1,896+0,3927*(sen(pi/8)+sen(3/8pi)+sen(5/8pi) +sen(7/8pi))=1,9742	0,0782
16	0,1964	0,5*1,9742+0,1964*(sen(pi/16)+sen(3/16pi)+sen(5/16pi) +sen(7/16pi)+sen(9/16pi)+sen(11/16pi)+sen(13/16pi) +sen(15/16pi))=1,9938	0,0196

Ejemplo

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Evaluemos el error obtenido en la última iteración

$$E=-\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\zeta)=-\frac{(\pi-0)0{,}1964^2}{12}(-sen(\zeta))=0{,}0101\,sen(\zeta)$$

El valor de ζ es desconocido pero sabemos que pertenece al intervalo $(0,\pi)$

Por lo tanto el valor del error estará acotado por $0{,}0101\,sen(0)<E<0{,}0101\,sen(\pi/2)$

El resultado final es $1{,}9938<\int_0^{\pi} sen(x)\,dx<2{,}0039$

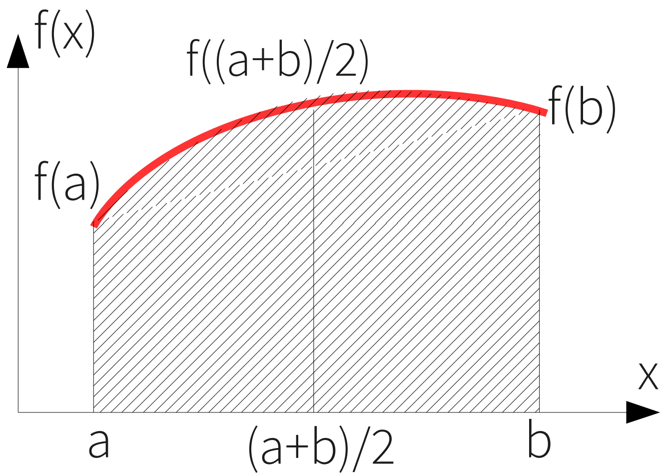
Regla de Simpson

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Tomamos $n=3$

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}[f(x_i)+4f(x_{i+1})+f(x_{i+2})]$$

Que resulta ser el área debajo de una parábola



La fórmula compuesta es

$$\int_{x_1}^{x_n} f(x)\,dx = \sum_{i=1,3,\dots}^{n-2} \int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}[f(x_1)+4f(x_2)+2f(x_3)+4f(x_4)+\dots+2f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n)]$$

Y el error es $E=\dfrac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\zeta)$

Observación: la regla de ⅓ de Simpson, necesita que las divisiones sean pares. Si las divisiones son impares se usa la regla ⅜ en el principio ,o el final, del rango (a,b).

$$I=\frac{3}{8}h[f(x_1)+3f(x_2)+3f(x_3)+f(x_4)]$$

Ejemplo

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Evaluar $\int_{0}^{2,5} f(x)dx$ a partir de los datos de la tabla

x	0	0,5	1	1,5	2	2,5
f(x)	1,5000	2,0000	2,0000	1,6364	1,2500	0,9565

Como hay 5 intervalos (número impar) usamos primero la regla de ⅜ y luego la de 1/3

$$I=\frac{3}{8}h[f(x_1)+3f(x_2)+2f(x_3)+f(x_4)]+\frac{h}{3}[f(x_4)+4f(x_5)+f(x_6)]$$

$$I=\frac{3}{8}(0,5)[(1,500)+3(2,0000)+3(2,0000)+(1,6364)]+\frac{(0,5)}{3}[1,6364+4(1,2500)+(0,9565)]$$

$$I=2,8381+1,2655=4,1036$$

Integración de Romberg

¿Recuerdan la extrapolación de Richardson?
¿Qué pasaría si se combina con la regla de trapecio recursiva?
La respuesta es la integración de Romberg

Se introduce la notación $R_{i,1}=I_i$,siendo I_i la aproximación obtenida con 2^{i-1} paneles

Se comienza evaluando $R_{1,1}=I_1$ (un panel) y $R_{2,1}=I_2$ (dos paneles)

Luego se utiliza la extrapolación de Richardson con p=2, para eliminar el término del error de mayor orden, y se obtiene $R_{2,2}=\frac{2^2 R_{2,1}-R_{1,1}}{2^2-1}=\frac{4}{3}R_{2,1}-\frac{1}{3}R_{1,1}$

Para continuar se evalúa $R_{3,1}=I_3$ (cuatro paneles) y se repite la extrapolación de Richardson utilizando p=2 $R_{3,2}=\frac{4}{3}R_{3,1}-\frac{1}{3}R_{2,1}$

Ahora tenemos dos resultados de $O(h^4)$ y se pueden extrapolar con p=4, $R_{3,3}=\frac{16}{15}R_{3,2}-\frac{1}{15}R_{2,2}$

Integración de Romberg

La secuencia se puede colocar en una tabla, donde los elementos de la diagonal resultan de la extrapolación y el resto son calculados por la regla de trapecios.

Aumenta el orden del error $\longrightarrow$

Aumenta la *cantidad de paneles* $\downarrow$

$$\begin{bmatrix} R_{1,1} & . & . \\ R_{2,1} & R_{2,2} & . \\ R_{3,1} & R_{2,2} & R_{3,3} \end{bmatrix}$$

Ejemplo

$$\int_0^{\pi} sen\, x\, dx = -\cos x\Big|_0^{\pi} = -(-1)+1=2$$

Paneles	I_i	$R_{i,1}=4/3I_i-1/3I_{i-1}$	$R_{i,2}=16/15I_i-1/15I_{i-1}$
1	0		
2	1,5708	2,0944	
4	1,896	2,0044	1,9984
8	1,9742	2,0003	2,0000
16	1,9938	2,0003	2,0003

Método de cuadratura de Gauss (y amigos)

Las fórmulas de integración de Gauss tienen la misma forma que las de Newton-Cotes

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx I = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$

En Newton-Cotes, los nodos se colocan espaciados uniformemente en (a,b), es decir, se colocan en posiciones predeterminadas.

Para la integración de Gauss, se calculan los pesos y las posiciones nodales asumiendo que la aproximación es exacta para una función f(x) que equivale a un polinomio de grado 2n-1 o menor. Además la integral a resolver se reformula como la función multiplicada por una función de peso w(x)

$$\int_a^b w(x) P_m(x)\,dx \approx I = \sum_{i=1}^{n} A_i P_m(x_i), \text{con } m \leq 2n-1$$

Una forma de determinar los nodos es utilizar polinomios simples x^{2n-1} y plantear un sistema de 2n ecuaciones, con incógnitas A_i y x_i.

$$\int_a^b w(x) x^j\,dx = \sum_{i=1}^{n} A_i x_i^j, \text{con } j = 0,1,\ldots,2n-1$$

Método de cuadratura de Gauss (y amigos)

Ejemplo

$$w(x)=e^{-x}, a=0, b=\infty, n=2$$

$$\int_0^\infty e^{-x}x^0dx=1=A_1x_1^0+A_2x_2^0$$

$$\int_0^\infty e^{-x}x^1dx=1=A_1x_1^1+A_2x_2^1$$

$$\int_0^\infty e^{-x}x^2dx=2=A_1x_1^2+A_2x_2^2$$

$$\int_0^\infty e^{-x}x^3dx=6=A_1x_1^3+A_2x_2^3$$

La solución del sistema de ecuaciones nolineal es

$$x_1=2-\sqrt{2}, x_2=2+\sqrt{2}$$

$$A_1=\frac{\sqrt{2}+1}{2\sqrt{2}}, A_2=\frac{\sqrt{2}-1}{2\sqrt{2}}$$

Y la fórmula de cuadratura resulta

$$\int_0^\infty e^{-x}f(x)dx\approx\frac{1}{2\sqrt{2}}[(\sqrt{2}+1)f(2-\sqrt{2})+(\sqrt{2}-1)f(2+\sqrt{2})]$$

Método de cuadratura de Gauss (y amigos)

Como es laborioso encontrar los pesos y nodos, existen varias soluciones "clásicas" que ya fueron calculadas y están tabuladas

Gauss-Legendre

$$\int_{-1}^{1} f(\zeta)\,d\zeta \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(\zeta_i)$$

Nodos	ζ_i	A_i
1	0,000000	2,000000
2	$\pm\sqrt{(1/3)}$	1,000000
3	0,000000 $\pm\sqrt{(3/5)}$	8/9 5/9
4	±0,339981 ±0,861136	0,652145 0,347855

Gauss-Laguerre

$$\int_{0}^{\infty} e^{-x} f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(\zeta_i)$$

Nodos	ζ_i	A_i
2	0,585 786 3,414 214	0,853 554 0,146 447
3	0,415 775 2,294 280 6,289 945	0,711 093 0,278 517 0,103 892(10^{-1})

Gauss-Hermite

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(\zeta_i)$$

Nodos	ζ_i	A_i
2	±0,707107	0,886227
3	0,000000 ±1,224745	1,181636 0,295409

Ejemplo

$$\int_0^{\pi} sen\, x\, dx = -\cos x \Big|_0^{\pi} = -(-1) + 1 = 2$$

Para poder aplicar la fórmula de Gauss-Legendre, debemos transformar el intervalo de integración original (a,b) al intervalo estándar (-1,1)

$$x_g = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\zeta \rightarrow dx_g = d\zeta \frac{b-a}{2} \rightarrow \int_a^b f(x_g)\, dx_g \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_{gi})$$

En este caso: $x_g = \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2}\zeta$

$$\int_0^{\pi} sen\, x\, dx \approx \frac{\pi}{2} \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_{gi})$$

Ejemplo

FCEN FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Con 1 punto: $x_{g1}=\frac{\pi}{2}+\frac{\pi}{2}0{,}000000=\frac{\pi}{2}$

$$\int_0^\pi sen\,x\,dx \approx \frac{\pi}{2}\left[2\,sen\left(\frac{\pi}{2}\right)\right]=3{,}1416$$

Con 2 puntos: $x_{g1,2}=\frac{\pi}{2}\pm\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{1}{3}}=1{,}5708\pm 0{,}9069$

$$\int_0^\pi sen\,x\,dx \approx \frac{\pi}{2}\left[1\,sen(0{,}6639)+1\,sen(2{,}4777)\right]=1{,}9358$$

Con 3 puntos: $x_{g1,3}=\frac{\pi}{2}\pm\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{3}{5}}=1{,}5708\pm 1{,}2167\,,\ x_{g2}=\frac{\pi}{2}$

$$\int_0^\pi sen\,x\,dx \approx \frac{\pi}{2}\left[5/9\,sen(0{,}3541)+8/9\,sen\left(\frac{\pi}{2}\right)+5/9\,sen(2{,}7875)\right]=2{,}0014$$