Métodos Numéricos

Integración Numérica, Ajuste de Mínimos Cuadrados y de Elemento Finito

Tarea 12 y 13

1 de diciembre de 2020

Erika Rivadeneira Pérez
erika.rivadeneira@cimat.mx
Matemáticas Aplicadas - CIMAT

1. Resumen

En el presente reporte se exponen métodos de integración numérica tales como el método de Ramberg y el método de la cuadratura Gaussiana con polinomios de Chebyshev. Además, se muestran el método de mínimos cuadrados y de elemento finito para ajustes polinomiales. Se utilizan distintas funciones para evaluar cada método para compararlos y se discuten los resultados obtenidos.

2. Introducción

A menudo es necesario evaluar la integral definida de una función que no tiene una antiderivada explícita, o cuya antiderivada no cs fácil de obtener. El metodo básico con que sc aproxima $[f(x)dx$ recibe el nombre de cuadratura numérica y enplea una suma del tipo

$$\sum_{i=0}^{m} a_i f(x_i)$$

para aproximar $\int_a^b f(x)dx$
Por otro lado, como ya hemos dicho anteriormente la búsqueda de un modelo matemático que represente lo mejor posible a unos datos experimentales puede abordarse, entre otras, de las dos formas siguientes:

- Mediante interpolación
- Mediante la obtención de una curva, $y = \phi(x)$, que se aproxime a los datos sin que, necesariamente, pase por ellos.

El segundo caso es que se abrodará en el presente informe. En la práctica habitualmente se usan funciones polinómicas de grado bajo, o bien de tipo exponencial, potencial, e incluso en la actualidad funciones tipo spline o polinomios a trozos. En cuanto al criterio a considerar para obtener el modelo concreto consiste, geométricamente, en hacer minima la suma de los cuadrados de las longitudes (distancia euclidea) L_i.

3. Metodología

3.1. Integración Numérica

3.1.1. Método de Romberg

Sea $I(h)$ el valor de la integral que aproxima a $I = \int_a^b f(x)dx$, mediante una partición de subintervalos de longitud $h = \frac{b-a}{n}$, usando la regla del trapecio. Entonces,

$$I = I(h) + E(h)$$

donde $E(h)$ es el error de truncamiento que se comete al aplicar la regla trapecial.
Supongamos que tenemos dos aproximaciones: $I(h_1)$ e $I(h_2)$, con subintervalos h_1 y h_2 respectivamente.

$$\left.\begin{array}{l} I = I(h_1) + E(h_1) \\ l = I(h_2) + E(h_2) \end{array}\right\} \Rightarrow I(h_1) + E(h_1) = I(h_2) + E(h_2)$$

Se ha visto que el error que se comete con la regla del trapecio para n subintervalos está dado por las siguientes fórmulas:

$$E(h_1) \approx -\tfrac{(b-a)}{12} h_1^2 f''(\varepsilon)$$
$$E(h_2) \approx -\tfrac{(b-a)}{12} h_2^2 f''(\varepsilon)$$

donde $f''(\varepsilon)$ es un promedio de la doble derivada entre ciertos valores que pertenecen a cada uno de los subintervalos. Ahora bien, si suponemos que el valor de f'' es constante, entonces:

$$E(h_1) \approx E(h_2) \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^2$$

Sustituyendo esto último en nuestra primera igualdad, tenemos que

$$I(h_1) - I(h_2) \approx E(h_2) - E(h_2) \left(\tfrac{h_1}{h_2}\right)^2 = E(h_2) \left[1 - \left(\tfrac{h_1}{h_2}\right)^2\right]$$

De aquí

$$I = I(h_2) + \tfrac{I(h_1) - I(h_2)}{1 - \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^2}$$

En el caso especial cuando $h_2 = \frac{h_1}{2}$ (que es el algoritmo de Romberg), se tiene que

$$I \approx \tfrac{4}{3} I(h_2) - \tfrac{I(h_1)}{3}$$

Esta fórmula es solo una parte del algoritmo de Romberg. Para entender el método, es conveniente pensar que se trabaja en niveles de aproximación. En un primer nivel, es cuando se aplica la regla del Trapecio, y para poder usar la fórmula anterior, se debe duplicar cada vez el número de subintervalos. Se puede comenzar con un subintervalo, luego con dos, cuatro, ocho, etc., hasta donde se desee.

3.1.2. Fórmula de Gauss-Chebyshev

I) Los polinomios de Chebyshev $T_n(x) = \cos\left(n \cos^{-1} x\right)$, son ortogonales a la función de peso $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ sobre el intervalo $[-1, 1]$, i.e.,

$$\int_{-1}^{1} \frac{T_m(x) T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = 0; n \neq m$$

cuando $n = m$, se tiene que

$$\int_{-1}^{1} \frac{T_n^2(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \begin{cases} \pi & n = 0 \\ \frac{\pi}{2} & n \neq 0 \end{cases}$$

II) Los polinomios de Chebyshev satisfacen la relación de recurrencia

$$T_n(x) = 2x T_{n-1}(x) - T_{n-2}(x) \text{ with } T_0(x) = 1 \text{ and } T_1(x) = x$$

Los polinomios de Chebyshev de orden superior se pueden calcular de la siguiente manera

$$\begin{array}{l}
T_0(x) = 1 \\
T_1(x) = x \\
T_2(x) = 2x T_1(x) - T_0(x) = 2x^2 - 1 \\
T_3(x) = 2x T_2(x) - T_1(x) = 4x^3 - 3x \\
T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1 \\
T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x \\
T_6(x) = 32x^6 - 48x^4 + 18x^2 - 1
\end{array}$$

Al usar la propiedad ortogonal de los polinomios de Chebyshev, tenemos la fórmula de integración de Gauss-Chebyshev de la siguiente manera

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) dx = \sum_{i=0}^{n} \lambda_i f(x_i)$$

donde los nodos x_i son los ceros de los polinomios ortogonales $T_i(x)$ los cuales son :

Fórmula de 1-punto: $T_1(x) = x = 0 \Rightarrow x_0 = 0$

Fórmula de 2-puntos: $T_2(x) = 2x^2 - 1 = 0 \Rightarrow x_0 = \dfrac{-1}{\sqrt{2}}, x_1 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$

3.2. Ajuste de mínimos cuadrados

Dados los datos $\{(x_i, y_i)\, i = 1, 2, \ldots, N\}$ hallar $\phi(x)$ que verifique: $\sum_{i=1}^{N} (y_i - \phi(x_i))^2 =$ mínima. Esta expresión dependerá de parámetros a, b,... según la forma de $\phi(x)$ que se han de obtener a partir del requisito impuesto. Además, una solución del problema anterior recibe el nombre de ajuste mínimos cuadrados de los datos. Dependiendo del modelo de función $\phi(x)$ utilizado aparecen distintos tipos de ajuste.

3.2.1. Modelos lineales

Los modelos lineales son aquellos que utilizan funciones $\phi(x)$ de la forma:

$$\phi(x) = a_1 q_1(x) + a_2 q_2(x) + \cdots + a_m q_m(x)$$

donde $a_i i = 1, n, m$ (normalmente, $m << N =$ número de datos) son los parámetros a determinar en el problema de ajuste, y $q_i(x) i = 1, n, m$ son funciones linealmente independientes de cierto espacio de funciones (polinomios, spline, etc.). Como casos particulares de ajustes de este tipo se tiene

1. **Ajuste lineal** (recta de mínimos cuadrados) si utilizamos: $\phi(x) = a + bx$
2. **Ajuste polinomial** si utilizamos el modelo: $\phi(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_k x^k$ (llamado cuadrático o cúbico para k = 2 o 3).
3. **Ajuste con spline lineal** (1 nodo interior $\mathbf{x}^*$) si utilizamos el modelo: $\phi(x) = a_0 + a_1 x + a_3 (x - x^*)_+$

3.2.2. Modelos no lineales

Los modelos no lineales son aquellos que utilizan funciones $\phi(x)$ que no son lineales respecto los parámetros del ajuste. Algunos modelos clásicos son

1. **Ajuste exponencial** cuando usamos el modelo: $\phi(x) = ae^{bx}$
2. **Ajuste potencial** si se toma $\phi(x) = ax^b$
3. **Ajuste racional** si se considera un modelo del tipo: $\phi(x) = \frac{1}{a+bx}$

3.3. Ajuste de elemento finito

Dado un entero n y un conjunto de m puntos $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{m}$, con $x_i \in [a, b]$, definimos una partición uniforme del intervalo $[a, b]$:

$$a = z_0 << z_1 < \ldots < z_{n-1} < z_n = b, \quad z_j = a + jh, \quad h = \frac{b-a}{n}$$

Sobre esta partición definimos las funciones $N_j(x)$ para $j = 0, \ldots, n$ como función lineal a pedazos que cumple con

$$N_j(x_k) = \begin{cases} 1 & j = k \\ 0 & j \neq k \end{cases}$$

A partir de estas funciones definimos

$$\phi(x) = \sum_{j=0}^{n} \phi_j N_j(x)$$

Buscamos una combinación lineal de las funciones $N_j(x)$ tal que la gráfica de esta función pase cerca de la colección de puntos $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{m}$. De este modo, para $x \in [z_k, z_{k+1}]$ tenemos que

$$\begin{array}{c} N_k(x) = 1 + \frac{1-0}{z_k - z_{k+1}} (x - z_k) = 1 - \frac{1}{h} (x - z_k) \\ N_{k+1}(x) = \frac{0-1}{z_k - z_{k+1}} (x - z_k) = \frac{1}{h} (x - z_k) \end{array}$$

Nos restringimos a trabajar con el elemento $[z_k, z_{k+1}]$, y sólo ver el efecto que tiene la función $\phi(x)$ evaluada en ese elemento y luego incorporar el efecto de todos los elementos. Bajo esta consideración, la función $\phi(x)$ evaluada en el elemento $[z_k, z_{k+1}]$ es igual a

$$\phi(x) = \phi_k N_k(x) + \phi_{k+1} N_{k+1}(x)$$

4. Implementación

A continuación se presentan los pseudo-códigos de integración numérica por el método de Romberg. Además, se encuentran los algortimos para el ajustes por mínimos cuadrados y de elemento finito.

Los datos de entrada del algoritmo (1) es la función $f(x)$ a considerar, el intervalo $[a, b]$ donde está definida esta función y el número de iteraciones.

Algoritmo 1 Método de Romberg

```
Result: r /* Valor de la integral en n-ésima iteración.                        */
r = array( [[0] * (n+1)] * (n+1) )
 h = b - a
 r[0,0] = 0.5 * h *(f(a) + f(b))
 p2 = 1
 for i in 1:n+1 do
   h = 0.5 * h /* medio paso y puntos restantes                                */
   suma = 0
    p2 = 2 * p2
    for j in 1:p2,2 do
      suma = suma + funcion(a+j*h)
   end
   r[i,0] = 0.5 * r[i-1,0] + suma*h/* regla del trapezoide compuesto para el siguiente nivel de
      subdivisión                                                              */
   p4 = 1
    for j in 1:i+1 do
      p4 = 4 * p4
       r[i,j] = r[i,j-1] + ( r[i,j-1] - r[i-1,j-1] ) / ( p4 - 1 )
   end
end
```

Por otro lado, el algoritmo (2) hace un ajuste lineal, parabólico y exponencial por mínimos cuadrados. Los datos de entrada son el vector de puntos x y su correspondiente verctor de imágenes $f(x)$.

Algoritmo 2 Ajuste por mínimos cuadrados

```
Result: (xo, yo) /* Valores ajustados al polinomio */
n = len(x)
 x_min = min(x)
 x_max = max(x)
 xo = np.linspace(x_min, x_max, n)
 /* AJUSTE LINEAL */
   A = np.ones((len(x),2))
   A[:,0]=x
   B=y
   ATb = np.dot(np.transpose(A),B)
   ATA = np.linalg.inv(np.dot(np.transpose(A),A))
   X=np.dot(ATA,ATb)
   b=X[1]
   a=X[0]
   yo = a*xo + b
   /* AJUSTE PARABÓLICO */
   A = np.ones((n,3))
A[:,0] = x**2
A[:,1] = x
B = y
ATb = np.dot(np.transpose(A),B)
ATA = np.linalg.inv(np.dot(np.transpose(A),A))
X1=np.dot(ATA,ATb)
a=X1[0]
b=X1[1]
c=X1[2]
yo=a*xo**2+b*xo+c
```

Finalmente, el algoritmo (3) ajusta datos dados por elemento finito. Los datos de entrada son el vector de puntos x, su correspondiente verctor de imágenes $f(x)$ y vector de puntos de referencia x_o para el ajuste de los datos.

Algoritmo 3 Ajuste por elemento finito

```
Result: (xo, yo) /* Valores ajustados al polinomio */
polinomio = np.zeros(len(xo))
 n=len(x)
 cont=0
 for i in 0:n-2 do
   while xo[cont]¡=x[i+1] do
      n1 = (xo[cont]-x[i+1])/(x[i]-x[i+1])
       n2 = (xo[cont]-x[i])/(x[i+1]-x[i])
       yj = y[i]*n1+y[i+1]*n2
       polinomio[cont]=yj
       cont+=1
   end
   plt.plot(x,y, '*', color= 'indigo')
    plt.plot(xo,polinomio, ls='-',color = 'lightslategray')
    plt.show()
end
```

5. Resultados

5.1. Método de Romberg

Se calculó el valor de la integral $I = \int_0^1 \frac{1}{1+x}$ con 6 valores iniciales para desarrollar el método de Romberg. Los resultados obtenidos se observan en la tabla (1).

Espaciado	***Valor de la regla trapezoidal***	1^{era} ***it. Romberg***	2^{da} ***it. Romberg***	3^{era} ***it. Romberg***	4^{ta} ***it. Romberg***	5^{ta} ***it. Romberg***
$h = 1$	0.75	0	0	0	0	0
$h/2 = 0{,}5$	0.70833333	0.69444444	0	0	0	0
$h/4 = 0{,}25$	0.69702381	0.69325397	0.6931746	0	0	0
$h/5 = 0{,}2$	0.69412185	0.69315453	0.6931479	0.69314748	0	0
$h/6 = 0{,}1667$	0.6933912	0.69314765	0.69314719	0.69314718	0.69314718	0
$h/7 = 0{,}143$	0.69320821	0.69314721	0.69314718	0.69314718	0.69314718	0.69314718

Tabla 1: Iteraciones de la integración de Romberg

5.2. Cuadratura Gaussiana (Fórmula de Gauss-Chebyshev)

Se calculó el método de cuadratura de Gauss con los polinomios de Chebyshev con dos puntos. Se consideraron las siguientes funciones:

- La distribución normal con $\mu = 0$ y $\sigma = 1$ en el intervalo (-1,1) y(-3,3)
- $f(x) = \frac{e^x \sin(x)}{x^2}$ en el intervalo (1,3)

La fórmula de dos puntos de Gauss-Chebyshev está dada por

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)dx = \frac{\pi}{2}\left(f\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\right) \tag{1}$$

Solución

I) Se resolverá la integral $\int_{-1}^{1} \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2\pi(1-x^2)}}dx$ numéricamente. Usando $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}$ en (1) se tiene que

$$\int_{-1}^{1} \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2\pi(1-x^2)}}dx = \frac{\pi}{2}\left(\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2}{2}}\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2}{2}}\right)\right) = \sqrt{\frac{\pi}{2}}e^{-\frac{1}{4}}$$

II) Ahora, se aproximará la integral $\int_{-3}^{3} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}dx$. Para cambiar el límite de la integral tenemos que

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2} = \frac{3-(-3)}{2}t = 3t$$

Sustituyendo ésta expresión en la integral dada se obtiene

$$\begin{aligned}
\int_{-3}^{3} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}dx &= \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(3t)^2}{2}}dt \\
&= \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(3t)^2}{2}}\frac{\sqrt{1-t^2}}{\sqrt{1-t^2}}dt \\
&= \int_{-1}^{1} \frac{f(t)}{\sqrt{1-t^2}}dt
\end{aligned}$$

donde $f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(3t)^2}{2}}\sqrt{1-t^2}$. Usando esto último en (1) se obtiene que

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} \frac{f(t)}{\sqrt{1-t^2}}dt &= \frac{\pi}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{\left(3\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\right)^2}{2}}\sqrt{1-\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{\left(3\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\right)^2}{2}}\sqrt{1-\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2}\right) \\
&= \frac{\sqrt{\pi}}{2}e^{-\frac{9}{4}}
\end{aligned}$$

III) Finalmente, se aproximará la integral $\int_{1}^{2} \frac{e^x sin(x)}{x^2}dx$. Una vez más para el cambio de variables se tiene que

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2} = \frac{1}{2}t + \frac{3}{2}$$

Sustituyendo ésta expresión en la integral dada se obtiene

$$\begin{aligned}
\int_1^2 \frac{e^x sin(x)}{x^2} dx &= \int_{-1}^1 \frac{e^{\frac{1}{2}t+\frac{3}{2}} sin\left(\frac{1}{2}t+\frac{3}{2}\right)}{\left(\frac{1}{2}t+\frac{3}{2}\right)^2} dt \\
&= \int_{-1}^1 \frac{e^{\frac{1}{2}t+\frac{3}{2}} sin\left(\frac{1}{2}t+\frac{3}{2}\right)}{\left(\frac{1}{2}t+\frac{3}{2}\right)^2} \frac{\sqrt{1-t^2}}{\sqrt{1-t^2}} dt \\
&= \int_{-1}^1 \frac{f(t)}{\sqrt{1-t^2}} dt
\end{aligned}$$

donde $f(t) = \frac{e^{\frac{1}{2}t+\frac{3}{2}} sin\left(\frac{1}{2}t+\frac{3}{2}\right)}{\left(\frac{1}{2}t+\frac{3}{2}\right)^2}\sqrt{1-t^2}$. Usando esto último en (1) se obtiene que

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 \frac{f(t)}{\sqrt{1-t^2}} dt &= \frac{\pi}{2}\left(\frac{e^{\frac{1}{2}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)+\frac{3}{2}} sin\left(\frac{1}{2}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)+\frac{3}{2}\right)}{\left(\frac{1}{2}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)+\frac{3}{2}\right)^2}\sqrt{1-\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2} + \frac{e^{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)+\frac{3}{2}} sin\left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)+\frac{3}{2}\right)}{\left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)+\frac{3}{2}\right)^2}\sqrt{1-\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2}\right) \\
&= 4{,}405
\end{aligned}$$

5.3. Ajuste por mínimos cuadrados

Para una serie de datos se realizó un ajuste de mínimos cuadrados y se calculó el error con respecto a la función $y = 2{,}154e^{0{,}758x}$ para las funciones

- Función lineal

  $$f(x) = \beta_1 x + \beta_0$$

  Error: 0,0017157

- Función cuadrática

  $$f(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$$

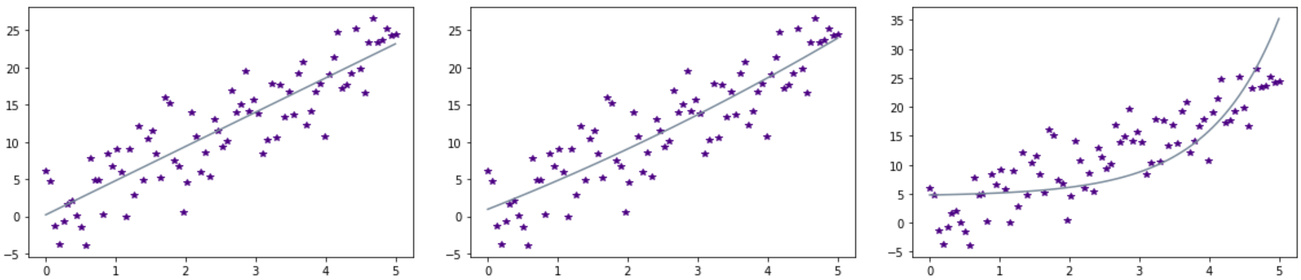
  Error: 0,0015393

- Función exponencial

  $$f(x) = \beta_0 + \beta_1 e^x$$

  Error: 0.000395

Las cuales se pueden observar en la figura (1)

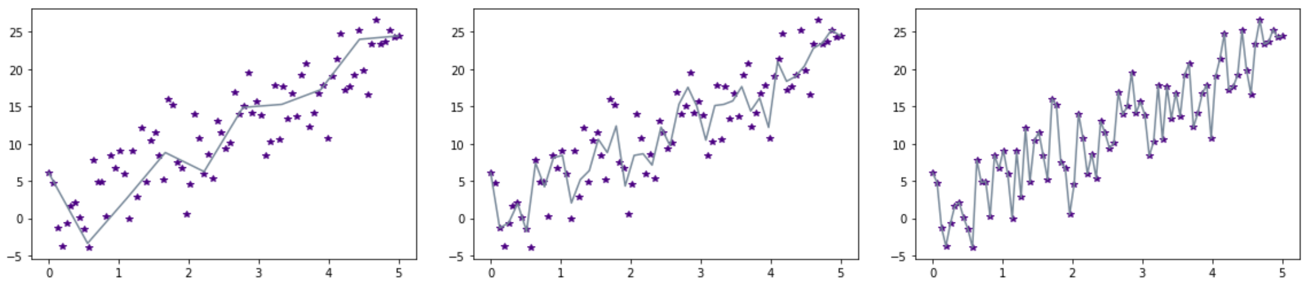


(a) Ajuste a una función lineal (b) Ajuste a una función cuadrática (c) Ajuste a una función exponencial

Figura 1: Ajuste por mínimos cuadrados

5.4. Ajuste por elemento finito

Se programó el método de interpolación por elemento finito para cierto conjunto de datos y se varió el parámetro de penalización. Los resultados obtenidos se observan en la figura (2).



(a) Parámetro de penalización : 10 (b) Parámetro de penalización : 40 (c) Parámetro de penalización : 80

Figura 2: Ajuste por elemento finito

6. Discusión

Al utilizar el método de Romberg se pudo observar, en la tabla (1) que bastaba realizar 4 iteraciones para obtener el valor de la integral ya que a partir de la $5ta$ iteración los valores se repetían. Se consiguió un buen resultado debido a que la función considerada $\frac{1}{1+x}$ es suficientemente derivable en el intervalo [0,1]. Por otro lado, se calculó a analíticamente el valor de las integrales de tres funciones en distintos intervalos utilizando el método de cuadratura Gaussiana con dos puntos de Gauss-Chebyshev. Obtener los resultados es bastante sencillo una vez que se la integral en la forma de Gauss-Chebyshev.
Finalmente, al realizar el ajuste de un polinomio al conjunto de datos dados utilizando los métodos de mínimos cuadrados y elemento finito se pudo observar que el método más eficiente es el de mínimos cuadrados ya que éste pasa por casi todos los puntos del conjunto de datos (dependiendo del parámetro de penalización utilizado), mientras que al utilizar el ajuste lineal, parabólico y exponencial solo se logra aproximar a una cierta cantidad de puntos, minimizando el error. Utilizando un parámetro de penalización de 80 se consiguió ajustar un polinomio que pasa por todos los puntos dados, véase la figura (2). Por otro lado, el mejor ajuste con mínimos cuadrados fue a una función exponencial $f(x) = \beta_0 + \beta_1 e^x$ debido a que el error entre los tres ajustes fue menor, $error = 0{,}000395$.

7. Conclusiones

El método de cuadratura Gaussiana con polinomios de Chebyshev es el más sencillo de computar. Se necesitan de funciones suficientemente diferenciables para computar el método de intgración de Romberg, en nuestro ejemplo bastaban con 4 iteraciones para encontrar el valor deseado de la integral.
Además, el ajuste exponencial con mínimos cuadrados fue el que mejor se aproximó a los datos, seguido del ajuste parabólico y el que más se alejaba fue el ajuste lineal. Resulta más beneficioso utilizar un ajuste a los puntos por elemento finito si se requiere pasar un polinomio que pase por todo el conjunto de datos; mientras más grande sea el parámetro de penalización el polinomio se ajustará mejor a los datos.

Referencias

[1] Gupta., 2015. Numerical Methods: Fundamentals And Applications. 5th ed.

[2] R.L. Burden and J.D. Faires, Análisis Numérico, Grupo Editorial Iberoamérica, México 1985.