

5

Integración y diferenciación numérica (~12 hrs.)

La evaluación analítica de una derivada o una integral definida, puede llegar a ser un ejercicio complicado o, como en casos extremos, imposible. Por ejemplo, hay interés en conocer el valor de la segunda, tercer o cualquier derivada de orden superior en un punto, pero, únicamente se cuenta con un conjunto de datos observados en donde para distintos valores de x_k se tiene el valor de la función $f(x_k) = y_k$ y en un escenario como éste, los métodos numéricos son la herramienta ideal.

Para identificar un caso diferente, la función de probabilidad gamma definida por

$$f(x) = \frac{\lambda^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} e^{-\lambda x}$$

es uno de los modelos típicos investigando el tiempo de vida de dispositivos electrónicos o cualquier componente electrónica y para conocer la probabilidad de que funcione correctamente, digamos durante tres años, se tendría que calcular la medida de probabilidad $P(x \geq 3)$ (probabilidad de que funcione más de tres años) y se obtiene mediante la integral

$$P(x \geq 3) = 1 - P(x < 3) = 1 - \int_0^3 \frac{\lambda^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} e^{-\lambda x} dx$$

la cual no es posible resolver en forma analítica, por lo que una buena aproximación es clave para entender fenómenos como éste. Por tanto, se hace imprescindible establecer métodos que permitan obtener derivadas o integrales en forma numérica. Así, en esta unidad temática se abordarán fórmulas que atienden este tipo de problemas.

5.1 Diferenciación numérica

Iniciando con el caso en que $f(x)$ es conocida, pero tiene una expresión complicada, el método más simple es la definición de la derivada de una función, mediante

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad \text{o bien} \quad f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad h \ll 1.$$

La segunda alternativa consiste en implementar el polinomio de Taylor (Maclaurin) alrededor de x y truncarlo hasta la primera derivada, es decir

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

de modo que, despejando se obtiene (la misma expresión)

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad h \ll 1,$$

pero si resulta lo mismo, ¿cuál es la ventaja?... en este caso, se puede calcular el error con $Err = \frac{h^2}{2!} f''(\xi)$ para $\xi \in (x, x+h)$ que resulta de la aproximación, en este caso $O[h^2]$, sobresaliendo además la posibilidad de evaluar el polinomio en $x+h$ y $x-h$ para restarlos y obtener (extrapolación de Richardson)

$$\left. \begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \dots \\ f(x-h) &= f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) - \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \dots \end{aligned} \right\} f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

que se conoce como método de diferencias centradas de $f'(x)$ y que tiene una mejor aproximación con $O[h^3]$, para $h \ll 1$.

Además, se puede ver que si en lugar de restar, se suman, resulta una aproximación de orden $O[h^3]$ para la segunda derivada dada por

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

Ejemplo 18. Con $h = 10^{-1}, 10^{-2}, \dots, 10^{-10}$, verifique el desempeño de los métodos propuestos para aproximar $f'(x)$ y $f''(x)$ en el punto $x = 1$, para la función $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$. Implementando en octave, en la siguiente lista se pueden ver los resultados aproximados para distintos valores de h .

h	$\approx f'(1)$	$\approx f'(1)$	$\approx f''(1)$
10^{-1}	-0.475113122171946	-0.499987500312492	0.497487562810928
10^{-2}	-0.497500123756256	-0.499999998750006	0.499974998749986
10^{-3}	-0.499750000124866	-0.499999999999862	0.499999749936642
10^{-4}	-0.499975000000097	-0.499999999999945	0.49999996961265
10^{-5}	-0.499997500003069	-0.499999999997725	0.499998931147161
10^{-6}	-0.499999749992153	-0.500000000042133	0.500044450291171
10^{-7}	-0.499999975867027	-0.500000000291934	0.488498130835069
10^{-8}	-0.499999991410149	-0.499999994185707	0.000000000000000
10^{-9}	-0.500000041370185	-0.500000041370185	0.000000000000000
10^{-10}	-0.500000041370185	-0.500000041370185	0.000000000000000

Comparando con el valor exacto [$f'(1) = -\frac{1}{2}$ y $f''(1) = \frac{1}{2}$], sobresale que el método de diferencias centradas muestra mejor desempeño desde un inicio y además, la definición de la derivada y que la segunda derivada presenta una mala aproximación para $h = 10^{-8}, 10^{-9}, 10^{-10}$

Ejemplo 19. Para la función $f(x) = \exp\left(\frac{\log(x) - x^3}{3x^2 - \cos(5x^7)}\right)$ calcule su derivada en el punto $x_0 = 3$.

Resolviendo, se puede ver que al evaluar la función para distintos valores de h resulta

h	$\approx f'(3)$	$\approx f'(3)$	$\approx f''(3)$
10^{-1}	-0.122143441	-0.108019435	-0.282480108
10^{-2}	-0.036218533	0.731671509	-153.578008331
10^{-3}	3.226114996	3.616404076	-780.578160567
10^{-4}	-98.602668407	59.642868795	-3164910.74404577
10^{-5}	231.106741984	259.360947606	-5650841.12434943
10^{-6}	259.121341737	261.962417618	-5682151.76177666
10^{-7}	261.704366999	261.988490142	-5682462.8613672
10^{-8}	261.960336473	261.988749573	-5682619.9301696
10^{-9}	261.985938665	261.988780198	-5683065.12960248
10^{-10}	261.988477024	261.988761796	-5695444.11632705

y comparando con una mejor aproximación [$f'(3) = 261.9887539094844$ y $f''(3) = -5682468.770049403$], sobresale nuevamente que el método de diferencias centradas tiene mejor desempeño para $f'(3)$.

En el caso de valores tabulados en los puntos x_0, x_1, \dots, x_k ; suponiendo que se desconoce la expresión analítica, la opción más práctica es obtener su polinomio de interpolación $P_k(x)$, bajo el supuesto de que tanto la función como sus derivadas de orden m sean aproximadamente iguales y así,

$$f^{[m]}(x) \approx P_k^{[m]}(x) \quad (k \geq m = 1),$$

en donde el error $R_k(x) = f(x) - P_k(x)$ se puede obtener mediante

$$R_k^{[m]}(x) = f(x)^{[m]} - P_k^{[m]}(x).$$

A manera de ejemplo, si se implementa el polinomio interpolante de Newton, dado por

$$\begin{aligned} P_k(x) = & f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots \\ & + f[x_0, x_1, x_2, x_3, \dots, x_k](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_{k-1}) \end{aligned}$$

entonces el error sería (ver teorema 4.3.2)

$$R_k(x) = \frac{f^{k+1}(\xi_x)}{(k+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_k)$$

y diferenciando con respecto a x y evaluando en el punto de interés (digamos x_0), se tendría que

$$\begin{aligned} P'_k(x_0) = & f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2](x_0 - x_1) + \dots \\ & + (x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdots (x_0 - x_{k-1}) f[x_0, x_1, x_2, x_3, \dots, x_k] \end{aligned}$$

se aproxima a $f'(x_0)$ con un error

$$R'_k(x_0) = (x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdots (x_0 - x_k) \frac{f^{k+1}(\xi_x)}{(k+1)!}$$

Cabe mencionar que en la práctica, este error es relativamente grande, incluso para $m = 1$ (primer derivada) y se incrementa significativamente en las derivadas de orden superior. Entonces, considerando el caso en que se tiene valores n puntos equidistantes

k	0	1	\dots	n
x	x_0	x_1	\dots	x_n
$f(x)$	y_0	y_1	\dots	y_n

para simplificar se puede cambiar x por t mediante $t = \frac{x - x_0}{h}$ (en donde $h = x_{k+1} - x_k$, de modo que: $2h = x_{k+2} - x_k$, $mh = x_{k+m} - x_k$) y con $\Delta^m f(x_k) = h^m f[x_0, x_1, \dots, x_k]$, el polinomio de Newton

$$P_k(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots \\ + f[x_0, x_1, x_2, x_3, \dots, x_k](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_{k-1})$$

se re-escribe como

$$P_k(x_0 + th) = f(x_0) + \frac{t\Delta f(x_0)}{1!} + \frac{t(t-1)\Delta^2 f(x_0)}{2!} + \dots + \frac{t(t-1)\cdots(t-(k-1))\Delta^k f(x_0)}{k!}$$

y diferenciando la función respecto a x (en forma equivalente, diferenciando el polinomio respecto a t) se tiene que

$$f'(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta f(x_0) + \frac{2t-1}{2} \Delta^2 f(x_0) + \frac{3t^2-6t+2}{6} \Delta^3 f(x_0) + \frac{4t^3-18t^2+22t-6}{24} \Delta^4 f(x_0) + \dots \right].$$

Calculando la derivada de la función, por ejemplo en el punto x_0 ($t = 0$) resulta

$$f'(x_0) = \frac{1}{h} \left[\Delta f(x_0) - \frac{1}{2} \Delta^2 f(x_0) + \frac{1}{3} \Delta^3 f(x_0) - \frac{1}{4} \Delta^4 f(x_0) + \dots + \frac{(-1)^{k-1}}{k} \Delta^k f(x_0) \right],$$

en tanto que, la medida del error que se comete al estimar la derivada de la función usando el polinomio está dada por

$$R'_k(x_0) = (x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdots (x_0 - x_k) \frac{f^{k+1}(\xi_x)}{(k+1)!} \approx \frac{\Delta^{k+1} f(x_0)}{(k+1)h}.$$

Así, particularizando para dos puntos (x_0, x_1 ; $O[h^2]$) se tendría que

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h},$$

para tres puntos (x_0, x_1, x_2 ; $O[h^3]$) se tendría que

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{h} \left[f(x_1) - f(x_0) - \frac{f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)}{2} \right] = \frac{-f(x_2) + 4f(x_1) - 3f(x_0)}{2h},$$

con la posibilidad de obtener la expresión adecuada para cualquier cantidad de puntos ($x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$).

Ejemplo 20. Considerando datos tabulados de la función revisada en el ejemplo 19, se tiene que

k	x_k	y_k
0	3.00	0.384848784009181
1	3.05	0.391683955017082
2	3.10	0.369412579839564

con dos puntos se tiene que (polinomio de grado 1)

$$f'(3) \approx P_1(x_0) = \frac{f(3.05) - f(3.00)}{0.05} = \frac{0.3917 - 0.369}{0.05} = -0.4454$$

mientras que con tres puntos resulta (polinomio de grado 2)

$$f'(3) \approx P_2(x_0) = \frac{-f(3.10) + 4f(3.05) - 3f(3.00)}{2(0.05)} = \frac{-0.0769}{0.10} = -0.7880$$

en donde se usa $h = 0.05$. Sin embargo, con $h = 10^{-7}$ resultan los datos tabulados

k	x_k	y_k
0	3	0.391683955017082
1	3.0000001	0.391710125453781
2	3.0000002	0.391736238908077

con dos puntos se tiene que

$$f'(3) \approx P_1(x_0) = \frac{f(3.0000001) - f(3.0)}{10^{-7}} = 261.704366998905$$

mientras que con tres puntos resulta

$$f'(3) \approx P_2(x_0) = \frac{-f(3.0000002) + 4f(3.0000001) - 3f(3.0)}{2(10^{-7})} = 261.9892790201029$$

y comparando con la mejor aproximación [$f'(3) \approx 261.9887539094844$] se puede observar la proximidad de ambas opciones, sobresaliendo que la mejor (como era de esperar) corresponde al caso de tres puntos.

En el caso en que se tenga la tabla de datos

k	x_k	y_k
0	2.9999999	0.391657727755753
1	3.0000000	0.391683955017082
2	3.0000001	0.391710125453781

para calcular una aproximación de $f'(3)$, se tendría entonces que el punto de interés es un punto central (no inicial), de modo que se replantea la tabla como

k	x_k	y_k	con	x_{-1}	f_{-1}		
-1	2.9999999	0.391657727755753		x_0	f_0	$\frac{f_0 - f_{-1}}{h}$	
0	3.0000000	0.391683955017082		x_1	f_1	$\frac{f_1 - f_0}{h}$	$\frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{2h^2}$
1	3.0000001	0.391710125453781					

para obtener, en el caso de tres puntos

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{h} \left[f(x_0) - f(x_{-1}) - \frac{f(x_1) - 2f(x_0) + f(x_{-1}))}{2} \right] = \frac{-f(x_1) + 4f(x_0) - 3f(x_{-1}))}{2h}$$

y así,

$$f'(3) \approx P_2(3) = \frac{-f(3.0000002) + 4f(3) - 3f(2.9999999)}{2(10^{-7})} = 262.5567364278325$$

5.2 Fórmulas compuestas de Newton-Cotes

En el caso de integración numérica, las *fórmulas de Newton-Cotes*, *reglas de cuadratura de Newton-Cotes* o simplemente *reglas de Newton-Cotes* agrupan los métodos definidos sobre puntos igualmente espaciados, es decir, se estima la integral de una función sobre un intervalo $I = (a, b)$ y sobre él n tramos con la misma longitud $h = \frac{b-a}{n}$ (conocida como el *tamaño de paso*) de modo que

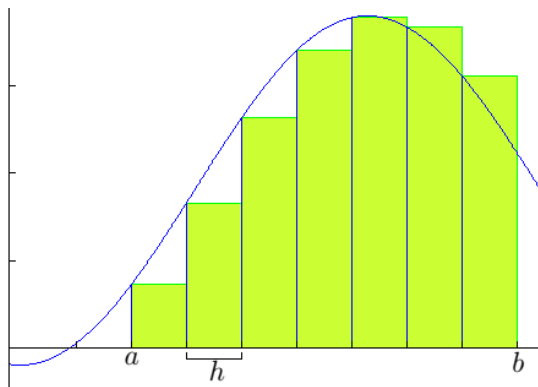
$$\int_a^b f(x) \, dx \approx \sum_{k=0}^n \omega_k f(x_k)$$

en donde $x_k = hk + a$ y los ω_k son los pesos definidos a partir de cada de la metodología propuesta en cada algoritmo, para los $f(x_k)$.

Partiendo del caso más simple, se puede hacer referencia a las sumas de Riemann y definir $\omega_k = h$ (longitud de la base los rectángulos), para establecer los métodos de **rectángulos interiores**, dado por

$$\int_a^b f(x) \, dx \approx \sum_{k=0}^{n-1} h f(x_k),$$

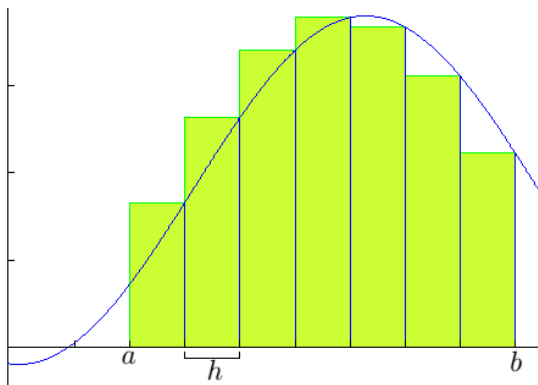
en donde las alturas de los rectángulos quedan establecidas por el valor de la función en el lado izquierdo de cada rectángulo, razón por la cual se les suele llamar rectángulos “interiores”, como se puede apreciar en la siguiente figura.



los **rectángulos exteriores** dados por

$$\int_a^b f(x) \, dx \approx \sum_{k=1}^n h f(x_k)$$

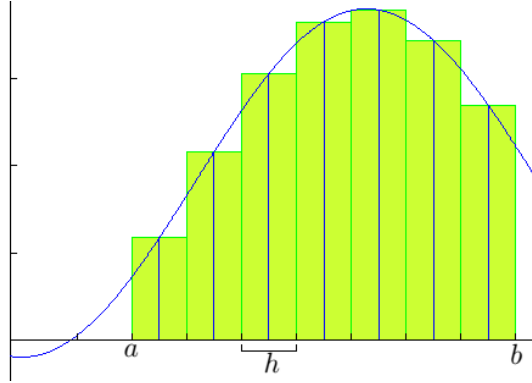
en donde la altura de los rectángulos es ahora al lado derecho



o bien los **rectángulos medios** con

$$\int_a^b f(x) \, dx \approx \sum_{k=1}^n h f\left(\frac{x_{k+1} - x_k}{2}\right)$$

en donde la altura del rectángulo corresponde a la función evaluada en el punto medio del tramo de longitud h .



Evidentemente no son la mejor opción para aproximar la integral bajo una curva y como siempre, se pretende establecer la opción que tenga el menor error.

5.2.1 Fórmula de trapecios

De forma similar al caso de la derivada numérica se pueden implementar polinomios de interpolación e iniciando por uno de primer orden en el intervalo (x_k, x_{k+1}) se tiene que

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx = \int_{x_k}^{x_{k+1}} P_1(x)dx + \int_{x_k}^{x_{k+1}} R_1(x)dx$$

y usando, por ejemplo, los polinomios de Newton, se tiene que

$$P_1(x) = f(x_k) + (x - x_k)f[x_k, x_{k+1}] \quad \text{y} \quad R_1(x) = (x - x_k)(x - x_{k+1})\frac{f''(\xi(x))}{2}$$

es decir

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx = \frac{h}{2} \left(f(x_k) + f(x_{k+1}) \right) - \frac{h^3}{12} f''(\xi(x)) \quad \text{para } x_k < \xi(x) < x_{k+1}.$$

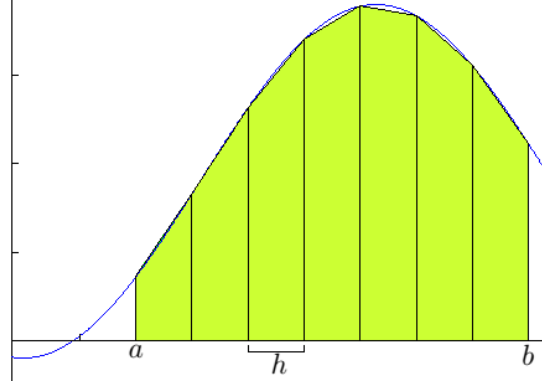
De modo que,

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2} \left(f(x_k) + f(x_{k+1}) \right)$$

es una aproximación de orden $O[h^3]$, en donde $\frac{h}{2} \left(f(x_k) + f(x_{k+1}) \right)$ se conoce como la *regla trapezoidal elemental* y para el rango completo (a, b) se obtiene

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2} \left(f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n) \right),$$

conocida como la *fórmula compuesta de trapecios*. Geométricamente corresponde a la figura



y en este caso, el error está dado por $R_{tot} = \frac{h^3}{12} \max_{\xi \in [a,b]} |f''(\xi)|$.

5.2.2 Fórmula de Simpson 1/3

De forma similar, el caso de la regla de Simpson se implementan polinomios de orden dos en cada tres puntos, utilizando ahora x_k, x_{k+1} y x_{k+2} , de modo que

$$\int_{x_k}^{x_{k+2}} f(x)dx = \frac{h}{3} \left(f(x_k) + 4f(x_{k+1}) + f(x_{k+2}) \right) - \frac{h^5}{90} f^{iv}(\xi) \quad \text{para } x_k < \xi < x_{k+1}.$$

De modo que, sobre toda la región de integración se obtiene

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3} \left(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n) \right)$$

con $R_{tot} = \frac{h^5}{90} \max_{\xi \in [a,b]} |f^{iv}(\xi)|$.

5.2.3 Fórmula de Simpson 3/8

En el caso en el que se implementan polinomios de tercer orden con los puntos x_k, x_{k+1}, x_{k+2} y x_{k+3} , se tiene la fórmula de Simpson de 3/8 mediante

$$\int_{x_k}^{x_{k+3}} f(x)dx = \frac{3h}{8} \left(f(x_k) + 3f(x_{k+1}) + 3f(x_{k+2}) + f(x_{k+3}) \right) - \frac{3h^5}{80} f^{iv}(\xi) \quad \text{para } x_k < \xi < x_{k+1}.$$

De modo que, sobre toda la región de integración se obtiene

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{3h}{8} \left(f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + 2f(x_3) + 3f(x_4) + \cdots + 3f(x_{n-1}) + f(x_n) \right)$$

en donde n es múltiplo de 3 y en este caso $R_{tot} = -\frac{3h^5}{80} \max_{\xi \in [a,b]} |f^{iv}(\xi)|$, $a < \xi < b$.

Ejemplo 21. Obtenga el valor aproximado de la integral de $f(x) = x^3 - \frac{11}{6}x^2 + x + \frac{11}{6}$ en el intervalo $\left[0, \frac{11}{10}\right]$.

Resp. Evidentemente es un ejercicio de práctica ya que el valor exacto se puede obtener directamente resolviendo la integral

$$\int_0^{\frac{11}{10}} f(x) dx = \frac{782749}{360000} \approx 2.174302777777778,$$

entonces, implementando cada uno de los métodos se obtiene

n	6	12	54
h	0.18333333333333	0.09166666666667	0.02037037037037
<i>Rec.Int.</i>	2.15367862654321	2.16427312885802	2.17212278139765
<i>Rec.Ext.</i>	2.19266751543209	2.18376757330247	2.17645488016308
<i>Rec.Med.</i>	2.17486763117284	2.17444399112654	2.17430975127648
<i>Trapecios</i>	2.17317307098765	2.17402035108024	2.17428883078037
<i>Simp.1/3</i>	2.17430277777777	2.17430277777777	2.17430277777777
<i>Simp.3/8</i>	2.17430277777777	2.17430277777777	2.17430277777777

de los resultados obtenidos, sobresale el desempeño de las reglas de Simpson 1/3 y 3/8 ya que desde seis tramos (mínimo posible para comparar los métodos) ambos métodos proporcionan la mejor aproximación al valor exacto.

Ejemplo 22. Obtenga el valor aproximado de la integral de $f(x) = e^{-x^2}$ en el intervalo $[-2, 2]$. **Resp.**

Este ejercicio es más interesante, ya que no se puede integrar directamente y no se tiene el valor exacto; sin embargo, una buena aproximación sería

$$\int_{-2}^2 f(x) dx \approx 1.764162781524843,$$

entonces, implementando cada uno de los métodos se obtiene

n	6	12	54
h	0.66666666666667	0.33333333333333	0.07407407407407
<i>Rec.Int.</i>	1.75913536437385	1.76283120352554	1.76409584457566
<i>Rec.Ext.</i>	1.75913536437385	1.76283120352554	1.76409584457566
<i>Rec.Med.</i>	1.76652704267723	1.76481914378764	1.76419622702190
<i>Trapecios</i>	1.75913536437385	1.76283120352554	1.76409584457566
<i>Simp.1/3</i>	1.76743541216573	1.76406314990944	1.76416253638993
<i>Simp.3/8</i>	1.72444837519839	1.76392578881228	1.76416222988207

nuevamente sobresale el desempeño de las reglas de Simpson 1/3 y 3/8 porque proporcionan la mejor aproximación. Más aún, en todos los casos destaca que conforme se reduce el tamaño de h , se mejora el valor de aproximación.

5.3 Cuadratura Gaussiana

La regla de cuadratura Gaussiana (en honor a Carl Friedrich Gauss) se construye para obtener el resultado exacto de la integral de polinomios de grado $2n + 1$ o menor, seleccionando adecuadamente los puntos x_k y los pesos ω_k , con $k = 1, 2, \dots, n$ en el dominio de integración $[-1, 1]$, es decir

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n \omega_k f(x_k)$$

Lo que no es un problema, ya que la solución numérica de una integral arbitraria sobre el rango $[a, b]$ se puede representar, mediante el cambio de variables $x = \frac{(b-a)t + (b+a)}{2}$ (si $t = -1$ se tiene que $x = a$ y con $t = 1$ resulta $x = b$) como

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{(b-a)}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right) dt \approx \frac{(b-a)}{2} \sum_{k=1}^n \omega_k f\left(\frac{b-a}{2}t_k + \frac{b+a}{2}\right).$$

En el caso particular en que las abscisas (t_k) son las raíces de polinomios de Legendre de grado n , la suma de funciones se conoce como la regla de cuadratura de Legendre-Gauss y tanto pesos como abscisas se proporcionan en forma tabular en <http://mathworld.wolfram.com/Legendre-GaussQuadrature.html>

n	x_k	ω_k
2	$\pm \frac{\sqrt{3}}{3}$	1
3	0 $\pm \frac{\sqrt{15}}{5}$	$\frac{8}{9}$ $\frac{5}{9}$
4	$\pm \frac{1}{35} \sqrt{525 - 70\sqrt{30}}$ $\pm \frac{1}{35} \sqrt{525 + 70\sqrt{30}}$	$\frac{1}{36}(18 + \sqrt{30})$ $\frac{1}{36}(18 - \sqrt{30})$
5	0 $\pm \frac{1}{21} \sqrt{245 - 14\sqrt{70}}$ $\pm \frac{1}{21} \sqrt{245 + 14\sqrt{70}}$	$\frac{128}{225}$ $\frac{1}{900}(322 + 13\sqrt{70})$ $\frac{1}{900}(322 - 13\sqrt{70})$

Ejemplo 23. Como ejemplo, resolviendo la integral

$$\int_0^{\frac{11}{10}} f(x) dx = \frac{782749}{360000} \approx 2.174302777777778,$$

con $f(x) = x^3 - \frac{11}{6}x^2 + x + \frac{11}{6}$; para $n = 2$ se tiene que

$$\int_0^{\frac{11}{10}} f(x) dx \approx \frac{11}{20} \left[f\left(\frac{11}{20} \left\{ \frac{\sqrt{3}}{3} \right\} + \frac{11}{20}\right) + f\left(\frac{11}{20} \left\{ -\frac{\sqrt{3}}{3} \right\} + \frac{11}{20}\right) \right] = \frac{782749}{360000}$$

que corresponde a la solución exacta.

Ejemplo 24. Considerando ahora, la integral

$$\int_{-2}^2 e^{-x^2} dx \approx 1.764162781524843,$$

con $n = 4$ se tiene que

$$\omega_k = \left[\frac{18 + \sqrt{30}}{36}, \frac{18 + \sqrt{30}}{36}, \frac{18 - \sqrt{30}}{36}, \frac{18 - \sqrt{30}}{36} \right],$$

$$t_k = \left[\frac{\sqrt{525 - 70\sqrt{30}}}{35}, -\frac{\sqrt{525 - 70\sqrt{30}}}{35}, \frac{\sqrt{525 + 70\sqrt{30}}}{35}, -\frac{\sqrt{525 + 70\sqrt{30}}}{35} \right]$$

y por lo tanto,

$$\int_{-2}^2 e^{-x^2} dx \approx 2 \sum_{k=1}^4 \omega_k f(2t_k) \approx 1.714546066821417,$$

lo que puede considerarse como una aproximación de baja calidad (error ≈ 0.05).

Verificando para $n = 5$, se tiene que

$$\omega_k = \left[\frac{128}{225}, \frac{322 + 13\sqrt{70}}{900}, \frac{322 + 13\sqrt{70}}{900}, \frac{322 - 13\sqrt{70}}{900}, \frac{322 - 13\sqrt{70}}{900} \right],$$

$$t_k = \left[0, \frac{\sqrt{245 - 14\sqrt{70}}}{21}, -\frac{\sqrt{245 - 14\sqrt{70}}}{21}, \frac{\sqrt{245 + 14\sqrt{70}}}{21}, -\frac{\sqrt{245 + 14\sqrt{70}}}{21} \right]$$

y la aproximación es

$$\int_{-2}^2 e^{-x^2} dx \approx 2 \sum_{k=1}^4 \omega_k f(2t_k) \approx 1.773568875635861.$$

5.3.1 Resolviendo la cuadratura Gaussiana

Los valores de la tabla que se utilizó en los ejemplos previos, se calcularon desde 1956-1960 y se han ido extendiendo en fechas más recientes para más valores de n ; pero en general, puede implementarse con cualquier conjunto de polinomios (deben ser ortogonales) y en rasgos muy generales, se puede reducir al siguiente teorema.

Teorema 5.3.1. Sea $q(x)$ un polinomio de grado $n + 1$ tal que

$$\int_{-1}^1 x^k q(x) dx = 0 \quad \text{para } k = 0, 1, \dots, n.$$

Sean x_0, x_1, \dots, x_n los ceros del polinomio $q(x)$; entonces

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n \omega_k f(x_k) \quad \text{con} \quad \omega_k = \int_{-1}^1 L_k(x)dx$$

en donde $L_k(x)$ es el polinomio de Lagrange calculado sobre los ceros $x_k \in (-1, 1)$ y si f es un polinomio, la aproximación es exacta para grados $2n + 1$ o menor.

Ejemplo 25. A manera de ejemplo, supongamos que se quiere implementar un polinomio de tercer grado, digamos $q(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$; por tanto, del teorema se debe tener que ($n = 2$)

$$\int_{-1}^1 q(x)dx = \int_{-1}^1 xq(x)dx = \int_{-1}^1 x^2q(x)dx = 0$$

por lo que, se debe tener el sistema (integrando)

$$\frac{2a_2 + 6a_0}{3} = \frac{6a_3 + 10a_1}{15} = \frac{2a_2 + 10a_0}{15} = 0$$

es decir, de la primera y última fracción de concluye que $a_0 = a_2 = 0$, mientras que de la expresión restante,

$$\frac{6a_3 + 10a_1}{15} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad 3a_3 + 5a_1 = 0$$

de modo que, una posible solución sería $a_1 = -3$, $a_3 = 5$ y por tanto el polinomio $q(x) = 5x - 3x^3$ tiene las raíces $x_0 = -\sqrt{5/3}$, $x_1 = 0$, $x_2 = \sqrt{5/3}$ y así

$$\begin{aligned} \omega_0 &= \int_{-1}^1 L_0(x)dx = \int_{-1}^1 \frac{3}{10}x \left(x - \sqrt{\frac{5}{3}} \right) dx && \Longleftrightarrow \quad \omega_0 = \frac{1}{5} \\ \omega_1 &= \int_{-1}^1 L_1(x)dx = \int_{-1}^1 -\frac{3}{5} \left(x - \sqrt{\frac{5}{3}} \right) \left(x + \sqrt{\frac{5}{3}} \right) dx && \Longleftrightarrow \quad \omega_1 = \frac{8}{5} \\ \omega_2 &= \int_{-1}^1 L_2(x)dx = \int_{-1}^1 -\frac{3}{10} \left(x + \sqrt{\frac{5}{3}} \right) dx && \Longleftrightarrow \quad \omega_2 = \frac{1}{5} \end{aligned}$$

y así, se puede implementar la cuadratura Gaussiana usando $x = \left[-\sqrt{\frac{5}{3}}, 0, \sqrt{\frac{5}{3}} \right]$ y $\omega = \left[\frac{1}{5}, \frac{8}{5}, \frac{1}{5} \right]$ y sólo

para verificar, aplicando a la integral $I = \int_0^{\frac{11}{10}} \left[x^3 - \frac{11x^2}{6} + x + \frac{11}{6} \right] dx$ se obtiene el valor exacto

$$I = \frac{11}{20} \left[f \left(-\frac{11}{20}\sqrt{\frac{5}{3}} + \frac{11}{20} \right) + f \left(\frac{11}{20} \right) + f \left(\frac{11}{20}\sqrt{\frac{5}{3}} + \frac{11}{20} \right) \right] = \frac{782749}{360000}$$

6

Solución numérica de EDO (~ 12 hrs.)

Las ecuaciones diferenciales ordinarias (**EDO**) se presentan con mucha frecuencia en problemas de ingeniería (casi todas), ciencias, economía y más; destacando que sistemas de EDO's, EDO's no lineales, entre otros muchos casos, no cuentan con solución cerrada (analítica o simbólica), de modo que una aproximación numérica es la alternativa práctica que permite sobrellevar muchos casos de aplicación.

Como casi todos los textos, en esta unidad temática se inicia con los métodos de Euler y Runge-Kutta, que se pueden obtener utilizando las Series de Taylor, pero no se debe perder de vista que en la literatura pueden encontrar algoritmos mucho más avanzados como el método de Adams, método predictor–corrector, de Adams-Moulton, métodos de Milne, de Adams-Bashforth, por mencionar algunos.

6.1 Introducción

Recordando algunas definiciones, una EDO es una expresión de la forma

$$y' = f(t, y), \quad (6.1)$$

en donde y' representa la derivada de una función real $y(t)$ respecto a $t \in \mathbb{R}$ y $f(t, y)$ es alguna expresión que incorpora a t , su función $y(t)$ y el problema consiste en obtener una $y(t)$ que satisfice la EDO. Además, para los números $t_0, y_0 \in \mathbb{R}$, el problema descrito en (6.1) puede limitarse a la solución $y(t)$ para valores de $t > t_0$, es decir, se busca la solución que satisfice la *condición inicial*

$$y(t_0) = y_0 \quad (6.2)$$

y la EDO (6.1) sujeto a (6.2) se conoce como *problema de valor inicial* y este es el problema que se enfrenta en esta unidad.

6.2 Método de Euler

Partiendo del concepto más elemental, como se revisó en la unidad anterior, se tiene que

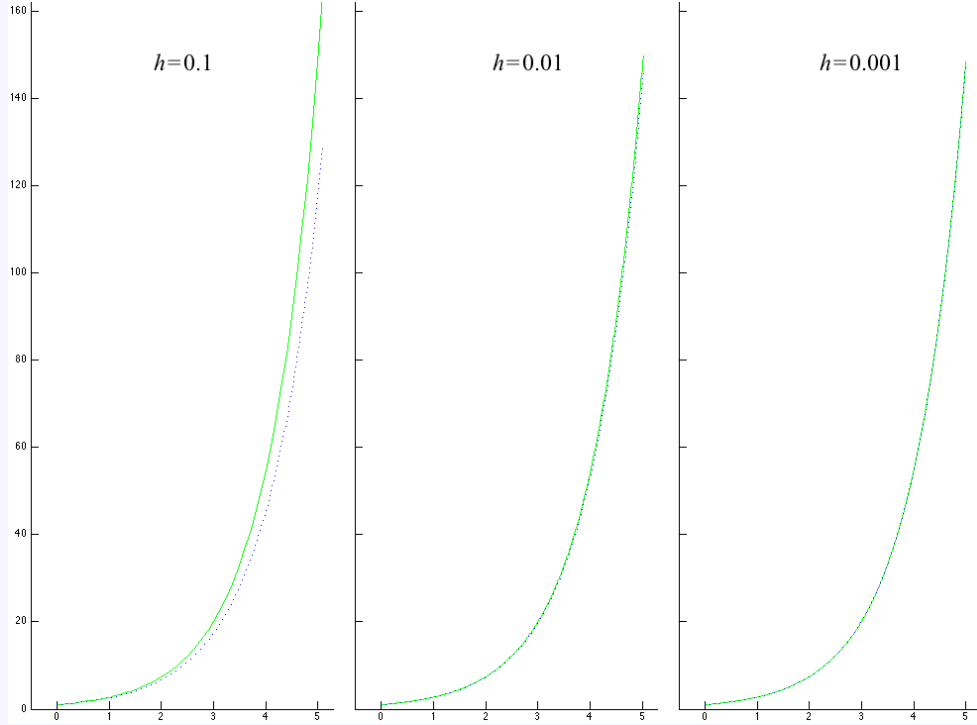
$$f'(t) \approx \frac{f(t+h) - f(t)}{h},$$

extendiendo esta alternativa a la solución de la EDO (6.1), se tendría que

$$\frac{y_{x+1} - y_n}{h} \approx f(t_n, y_n) \iff y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n)$$

se conoce como el método de Euler (o método implícito de Euler, ~ 1768) con $y_n = y(t_n)$ y $t_n = t_0 + nh$

Ejemplo 26. A manera de ejemplo, consideremos la EDO $y'(t) = y(t)$ sujeta a $y(0) = 1$. **Resp.** Es evidente que la solución exacta está dada por $y(t) = e^t$ y suponiendo que no se conoce esta solución, en forma numérica (usando el método de Euler), se tendría que $f(t_n, y_n) = y_n$ y resolviendo para el intervalo $0 \leq t \leq 5$, con el valor inicial $t_0 = 0$, $y_0 = y(t_0) = 1$ resulta



6.3 Método de Euler modificado

Desde un enfoque diferente, se puede ver que

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) \iff dy = \int f(t, y) dt \iff y(t_{n+1}) - y(t_n) \approx \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt$$

e implementar alguno de los métodos de integración, por ejemplo usando el método de trapecios, resulta que

$$y(t_{n+1}) \approx y(t_n) + \frac{h}{2} [f(t_n, y(t_n)) + f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))]$$

usando el método de Euler para la expresión $y(t_{n+1})$, es decir

$$y(t_{n+1}) \approx y(t_n) + \frac{h}{2} [f(t_n, y(t_n)) + f(t_{n+1}, y_n + hf(t_n, y_n))]$$

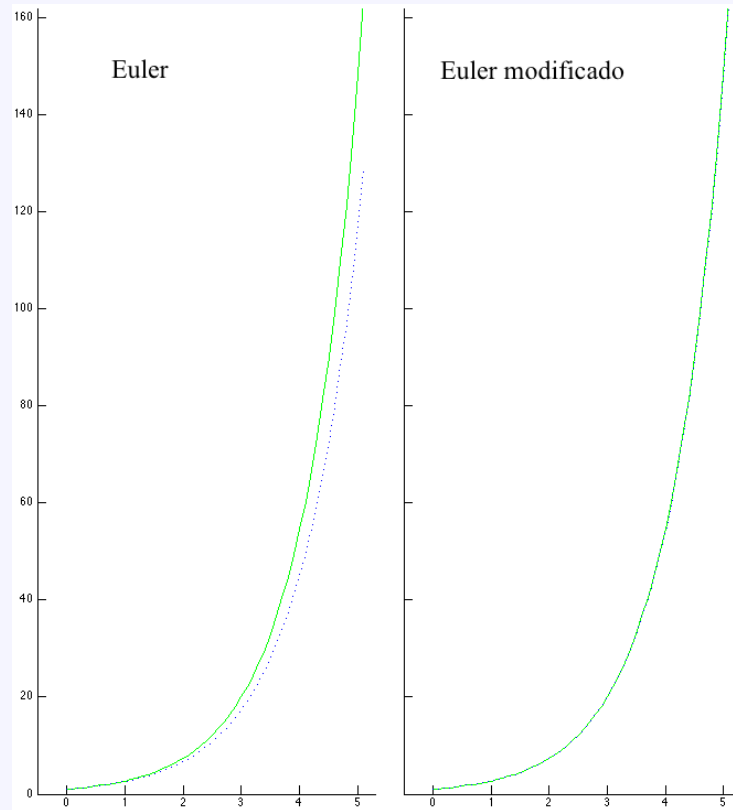
en donde el método de Euler modificado se puede describir como

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [k_1 + k_2]$$

en donde

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(t_n, y_n), \\ k_2 &= hf(t_n + h, y_n + k_1) \end{aligned}$$

Ejemplo 27. Resolviendo el mismo ejemplo para comparar el desempeño de los métodos de Euler y Euler modificado, con $h = 0.1$ se obtiene



6.4 Método de Runge-Kutta de cuarto Orden

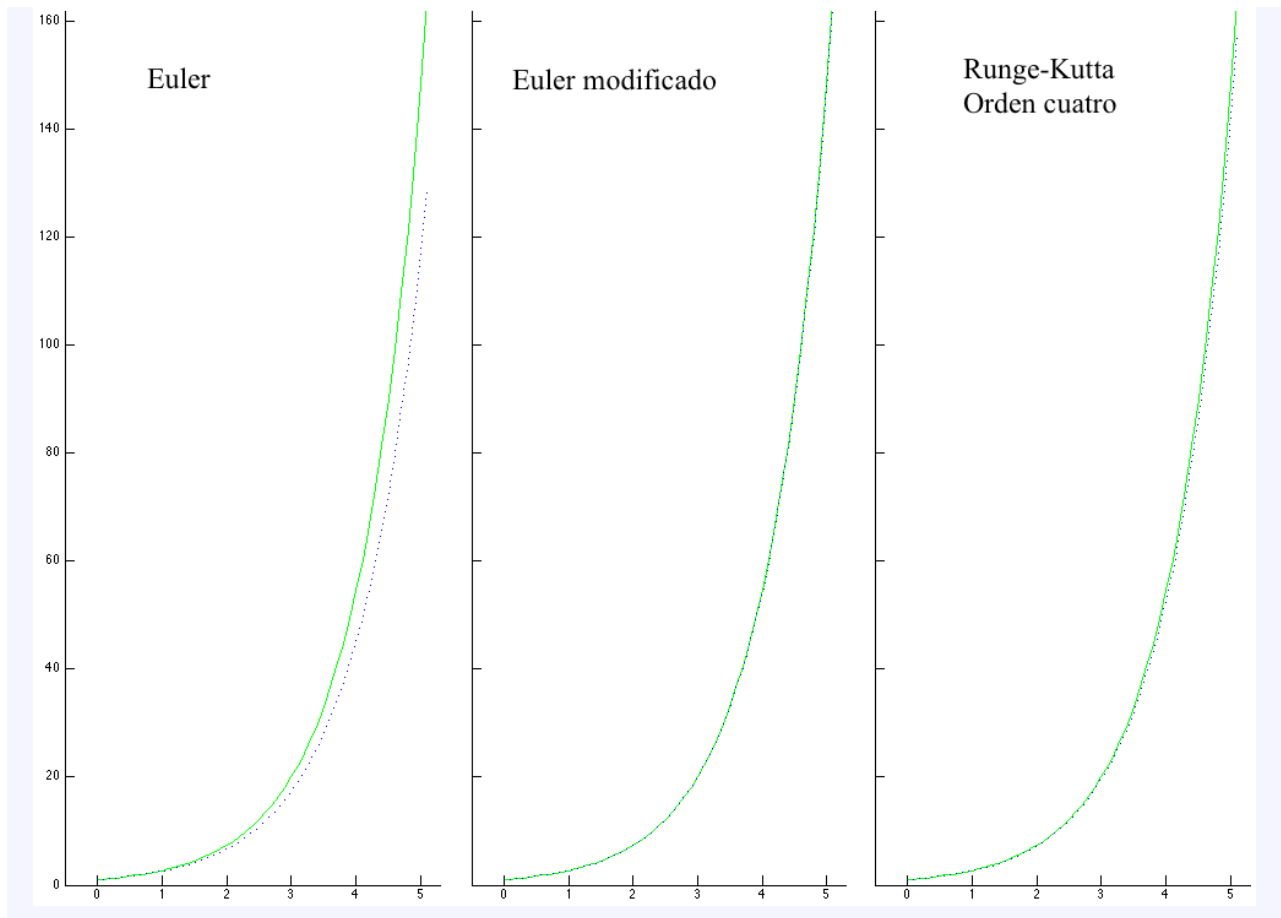
Siguiendo una notación similar a la de Euler modificado para k_1 y k_2 , el método de Runge-Kutta de orden cuatro se puede escribir como

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4]$$

en donde

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(t_n, y_n), \\ k_2 &= hf(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1), \\ k_3 &= hf(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2), \\ k_4 &= hf(t_n + h, y_n + k_3), \end{aligned}$$

Ejemplo 28. Nuevamente para comparar con el mismo ejemplo, ahora Euler, Euler modificado y Runge-Kutta de orden cuatro, con $h = 0.1$ se obtiene



Ejemplo 29. Obtenga la solución de la EDO $y' = y - t^2 - 1$ sujeto a $y'(0) = \frac{27}{10}$

6.5 Obteniendo la expresión del método de Runge-Kutta

La teoría con la que se deduce el algoritmo del método de Runge-Kutta es el polinomio de Taylor univariado aplicado a $y(t)$

$$y(t+h) = y(t) + hy'(t) + \frac{h^2}{2}y''(t) + \dots$$

en donde se puede reemplazar $y' = f(t, y)$ y $y'' = f_t(t, y) + y'f_y(t, y)$ o bien $y'' = f_t(t, y) + f(t, y)f_y(t, y)$, obteniendo

$$y(t+h) = y(t) + hf(t, y) + \frac{h^2}{2} \left[f_t(t, y) + f(t, y)f_y(t, y) \right] + \dots$$

y el polinomio de Taylor bivariada para $f(t, y(t))$ dado por

$$f(t+h, y+\Delta y) = f(t, y) + hf_t(t, y) + hf(t, y)f_y(t, y) + \dots$$

A manera de ejemplo, para el Runge-Kutta de segundo orden se debe proponer una solución del tipo

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(t_n, y_n) \\ k_2 &= hf(t_n + ah, y_n + bk_1) \\ y_{n+1} &= y_n + \alpha k_1 + \beta k_2 \end{aligned}$$

en donde se deben obtener los valores de a, b, k_1 y k_2 sustituyendo estas expresiones en los polinomios Taylor, es decir

$$f(t_n + ah, y_n + bhf(t_n, y_n)) = f(t_n, y_n) + a\Delta t f_t(t_n, y_n) + bhf(t_n, y_n)f_y(t_n, y_n)$$

y

$$y_{n+1} = y_n + (\alpha + \beta)hf(t_n, y_n) + h^2 \left[a\beta f_t(t_n, y_n) + b\beta f(t_n, y_n)f_y(t_n, y_n) \right]$$

de modo que, igualando ambas expresiones se concluye que

$$\begin{aligned} \alpha + \beta &= 1 \\ a\beta &= 1/2 \\ b\beta &= 1/2 \end{aligned}$$

de donde se puede ver que $a = b = 1$ y $\alpha = \beta = 1/2$; obteniendo el método de Runge-Kutta de segundo orden como

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(t_n, y_n) \\ k_2 &= hf(t_n + h, y_n + k_1) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2}[k_1 + k_2] \end{aligned}$$

que coincide con el esquema del método de Euler modificado.