Computació Numèrica

Tema 5.2 -Integració Numèrica

M. Àngela Grau Gotés

Departament de Matemàtiques
Universitat Politècnica de Catalunya · BarcelonaTech.

3 de maig de 2020

Drets d'autor

"Donat el caràcter i la finalitat exclusivament docent i eminentment il·lustrativa de les explicacions a classe d'aquesta presentació, l'autor s'acull a l'article 32 de la Llei de propietat intel·lectual vigent respecte de l'ús parcial d'obres alienes com ara imatges, gràfics o altre material contingudes en les diferents diapositives"

Índex

Introducció

La integració numèrica ens proporciona valors aproximats de $\int_a^b f(t)\,dt$ que ens seran d'utilitat

- Quan la funció $f(t)$ no tingui primitiva:

$$F(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{z} e^{\frac{-t^2}{2}}\,dt$$

- Quan la primitiva necessita molt esforç de càlcul.
- Quan no es coneix l'expressió analítica de $f(x)$.

Fórmula de integració

Els mètodes que es consideren són de la forma

$$\int_a^b f(t)\,dt = \sum_{i=0}^{n} W_i f(x_i) + E_n(f).$$

- On W_i són els coeficients o pesos la fórmula.
- On $Q_n(f) = \sum_{i=0}^{n} W_i f(x_i)$ és una fórmula de quadratura de $n+1$ punts.
- On $E_n(f)$ és l'error de truncament de la integració.

Grau d'una fórmula de quadratura

Una fórmula de quadratura de $n+1$ punts, per a una funció f en un interval $[a, b]$ es diu que té **grau de precisió k** si i només si tots els monomis de grau menor o igual que k són integrats de forma exacta amb la fórmula

$$\int_a^b f(t)\,dt \simeq \sum_{i=0}^{n} W_i f(x_i)$$

Exercici

Per a quins coeficients a, b i c la fórmula d'integració:

$$\int_0^1 f(t)\,dt = a\,f(0) + b\,f(1/2) + c\,f(1).$$

és exacte per a polinomis de grau més petit o igual que dos?

Fórmules de Newton-Côtes

Fórmules de Newton-Côtes

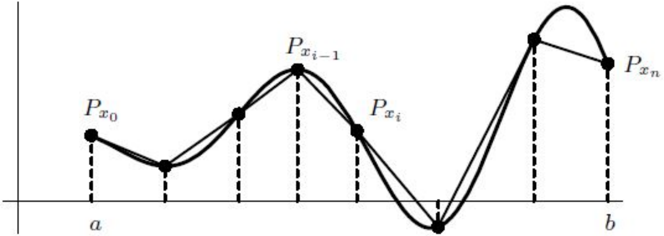


Figura: mètode dels trapezis i polinomi interpolador

Fórmules de Newton-Côtes

Si $f : [a, b] \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ una funció real de variable real contínua, sigui $P_n(x)$ el polinomi interpolador de f en els nodes $a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n = b$, llavors

$$\int_a^b f(t)\,dt \simeq \int_a^b P_n(t)\,dt.$$

L'expresssió que s'obté de $\displaystyle\int_a^b P_n(t)\,dt$ s'anomena **fórmula de Newton-Côtes** de $n+1$ punts.

Té grau de precisió **almenys** n.

Expressions genèriques

Fent ús del polinomi interpolador en forma de Lagrange en abscises equiespaides i el canvi $x = a + t\,h$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{j=0}^{n} \left(\int_a^b L_j(x) \right) f(x_j) = h \cdot \sum_{j=0}^{n} \alpha_j\, f(x_j)\,,$$

on els nombres α_j depenen només del nombre de punts escollits i vénen definits per

$$\alpha_j = \int_0^n \varphi_j(t)\,dt\,, \qquad \varphi_j(t) = \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{t-k}{j-k}\,.$$

Exercici

Deduïu la fórmula de Newton-Côtes per a:

- $\displaystyle\int_a^b f(x)dx$ i nodes a, b.
- $\displaystyle\int_a^b f(x)dx$ i nodes a, $\frac{a+b}{2}$, b.
- $\displaystyle\int_0^1 f(x)dx$ i nodes 0, 1/3, 2/3, 1.

Fórmules de Newton-Côtes

Fórmulas abiertas y cerradas

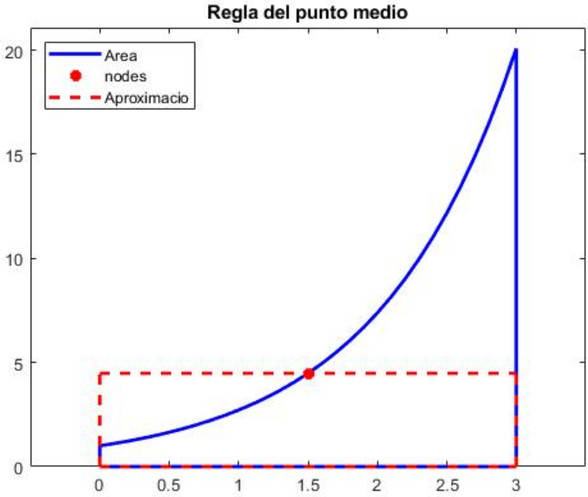
- Se llama abierta a una fórmula de integración numérica que no evalúa la función integrando en uno o en los dos extremos del intervalo.

- Las fórmulas abiertas son útiles cuando no se conoce la función en un extremo o tiene un valor infinito (integrales impropias).

Fórmules de Newton-Côtes

Punt mig, Trapezis i Simpson

Fórmula del punt mig (simple).



Fórmula del Rectangle o punt mig.

$$\int_a^b f(x)\,dx = \underbrace{h \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right)}_{R(f,h)} + \overbrace{\frac{(b-a)}{24} h^2\, f''(\xi)}^{E\{f\}},$$

$$h = b - a\,, \qquad a < \xi < b\,.$$

És una fórmula oberta, els nodes no contenen els extrems de l'interval.

Fórmula del Rectangle o punt mig.

Per a $f : [a, b] \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ una funció real de variable real amb derivada segona contínua:

1. $$\int_a^b f(x)\, dx = h \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{24} h^3\, f''(\xi), \quad a < \xi < b, \quad h = b - a.$$

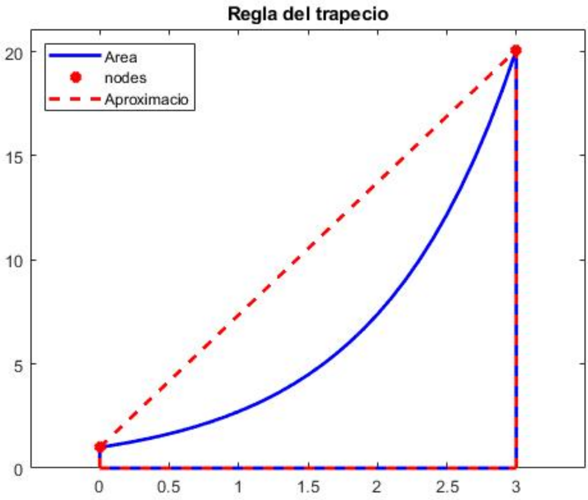
2. Per $a = x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n = b$, i $h_k = x_{k+1} - x_k$ s'obté

$$\int_a^b f(x)\, dx = \sum_{k=1}^{n} \left(h_k \cdot f\left(\frac{x_{k-1} + x_k}{2}\right) + \frac{1}{24} h_k^3\, f''(\xi_k) \right), \; a < \xi_k < b.$$

3. Si partició equiespaida, $h_k = h$ per a tot k,

$$\int_a^b f(x)\, dx = h \cdot \sum_{k=1}^{n} f\left(\frac{x_{k-1} + x_k}{2}\right) + \frac{1}{24} h^2 (b - a)\, f''(\xi), \; a < \xi < b.$$

Fórmula del trapezi (simple).



Fórmula del trapezi.

$$\int_a^b f(x)\,dx = \underbrace{\frac{h}{2}\cdot\left(f(a)+f(b)\right)}_{T(f,h)} - \underbrace{\frac{(b-a)}{12}h^2\, f''(\xi)}_{E\{f\}},$$

$$h = b - a\,, \qquad a < \xi < b\,.$$

És una fórmula tancada, els nodes contenen els extrems de l'interval.

Fórmula del trapezi (simple).

Para analizar el método del trapecio, usemos una interpolación entre el punto a y b usando el polinomio de Lagrange y su error. En este caso tenemos que

$$f(x) = f(a)\frac{x-b}{a-b} + f(b)\frac{x-a}{b-a} + f''(\xi)\frac{(x-a)(x-b)}{2}.$$

Integremos el polinomio obtenido; así nos queda

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \frac{f(a)}{a-b}\int_a^b (x-b)\mathrm{d}x + \frac{f(b)}{b-a}\int_a^b (x-a)\mathrm{d}x + f''(\xi)\int_a^b \frac{(x-a)(x-b)}{2}\mathrm{d}x \\
&= \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a) + f''(\xi)\frac{(b-a)^3}{12} \\
&= \frac{f(a)+f(b)}{2}h + f''(\xi)\frac{h^3}{12},
\end{aligned}$$

nuevamente con $\xi \in [a;b]$. Ahora lo que hemos obtenido es un método cuyo error es proporcional a la derivada segunda, y, en consecuencia, mejoramos nuestra aproximación. Analicemos ahora

Fórmules dels trapezis.

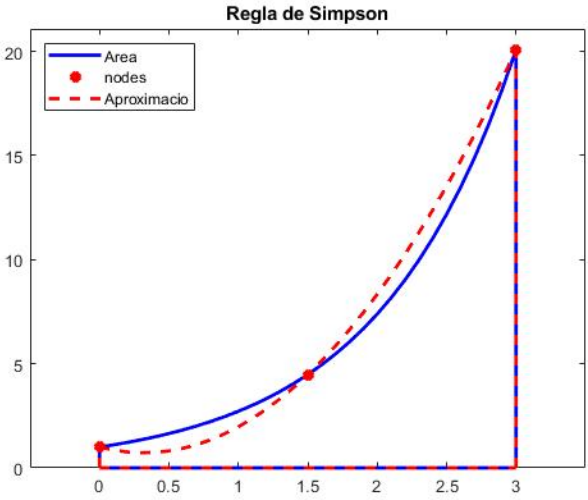
Sigui $f : [a, b] \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ una funció real de variable real amb derivada segona contínua:

1. $$\int_a^b f(x)\, dx = \frac{h}{2} \cdot (f(a) + f(b)) - \frac{1}{12} h^3\, f''(\xi), \;\; a < \xi < b, \;\; h = b - a.$$

2. Per $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$, i $h_k = x_{k+1} - x_k$ s'obté
$$\int_a^b f(x)\, dx = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{h_k}{2} \cdot (f(x_{k-1}) + f(x_k)) - \frac{1}{12} h_k^3\, f''(\xi_k) \right), \;\; a < \xi_k < b.$$

3. Si partició equiespaida, $h_k = h$ per a tot k,
$$\int_a^b f(x)\, dx = \frac{h}{2} \left(f(a) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) \right) - \frac{(b-a)}{12} h^2\, f''(\xi), \;\; a < \xi < b.$$

Fórmula de Simpson (simple).



Fórmula de Simpson (simple).

$$\int_a^b f(x)\,dx = \underbrace{\frac{h}{3}\cdot\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right)}_{S(f,h)} \underbrace{-\frac{(b-a)}{180}h^4 f^{iv}(\xi)}_{E\{f\}},$$

$$h=\frac{b-a}{2}, \qquad a<\xi<b\,.$$

Dóna el resultat exacte per funcions del tipus ....

Fórmules de Simpson.

Per a $f : [a, b] \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ una funció real de variable real amb derivada segona contínua, $a < \xi < b$, $h = \frac{(b-a)}{2}$:

1. $$\int_a^b f(x)\, dx = \frac{h}{3} \cdot \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) - \frac{h^5}{90}\, f^{(4)}(\xi).$$

2. Per $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$, i $h_k = \dfrac{x_{k+1} - x_k}{2}$ i $y_k = \dfrac{x_{k+1} + x_k}{2}$ s'obté

$$\int_a^b f(x)\, dx = \sum_{k=0}^{n-1} \left(\frac{h_k}{3} \cdot \left(f(x_{k+1}) + 4f(y_k) + f(x_k)\right) - \frac{h_k^5}{90}\, f^{(4)}(\xi_k) \right)$$

3. Si partició equiespaida, $h_k = h$ per a tot k, $y_k = \dfrac{x_{k+1} + x_k}{2}$ i $a < \xi < b$ es té

$$\int_a^b f(x)\, dx = \frac{h}{3} \cdot \left(f(a) + 4\sum_{k=1}^{n-1} f(y_k) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) \right) - \frac{(b-a)}{180} h^4\, f^{(4)}(\xi).$$

Comparació de mètodes
Exactitud, Error de Truncament i Grau de Precisió

	Exacte Polinomi	Error truncament	Grau precisió
Punt mig	0	$\frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi_0)$	1
Trapezi	1	$\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi_1)$	1
Simpson	2	$\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi_2)$	3

Taula: Exactitud, Error de Truncament i Grau de Precisió

Exercicis

Exercici

Comproveu que:

$$\text{a) } S(f,h) = \frac{2}{3}R(f,h) + \frac{1}{3}T(f,h)$$

$$\text{b) } S(f,h) = \frac{4}{3}T\left(f,\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3}T(f,h)$$

Exercici

Trobeu la distàcia que ha recorregut un mòvil a partir de les dades de la següent taula:

t min	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
v m/s	1	8	4	3.5	5	1	0

a) Representa gràficament les dades de la taula.
b) Explica l'estratègia i dona el resultat pel mètode del punt mig.
c) Explica l'estratègia i dona el resultat pel mètode dels trapezis.
d) Explica l'estratègia i dona el resultat pel mètode de Simpson.

Exercici

Calculeu fent ús de fórmules compostes del punt mig

$$\int_0^1 \frac{\sin t}{t}\, dt \approx 0.946083070367 \pm 0.5e{-}12$$

Mètode de Romberg

Mètode de Romberg

Fent ús de la extrapolació de Richardson, millora recursivament l'aproximació de las fórmules compostes amb poc cost computacional

Mètode de Romberg

Per $h = (b-a)/n$, $x_k = a + kh$ i $k = 0 \div n$ calculem

$$T(h),\ T\left(\frac{h}{2}\right),\ T\left(\frac{h}{4}\right),\ \cdots,T\left(\frac{h}{2^p}\right)$$

llavors, l'esquema d'extrapolació de Richardson per $\mathrm{L} \geq 1$, és:

$$T_{\mathrm{L}+1}(h) = T_{\mathrm{L}}(h) + \frac{T_{\mathrm{L}}(h) - T_{\mathrm{L}}(2h)}{4^{\mathrm{L}} - 1}$$

$$T_1(h) = T(h)\,.$$

Taula d'extrapolació

$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^4)$	$\mathcal{O}(h^6)$	$\mathcal{O}(h^8)$
$\mathbf{1}: T_1(h)$			
$\mathbf{2}: T_1(h/2)$	$\mathbf{3}: T_2(h/2)$		
$\mathbf{4}: T_1(h/4)$	$\mathbf{5}: T_2(h/4)$	$\mathbf{6}: T_3(h/4)$	
$\mathbf{7}: T_1(h/8)$	$\mathbf{8}: T_2(h/8)$	$\mathbf{9}: T_3(h/8)$	$\mathbf{10}: T_4(h/8)$
$\vdots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$

Taula: Mètode de Romberg

Exemple

$$\int_0^{0.8} \frac{\sin t}{t}\, dt \approx 0.772095 \pm 0.0000005$$

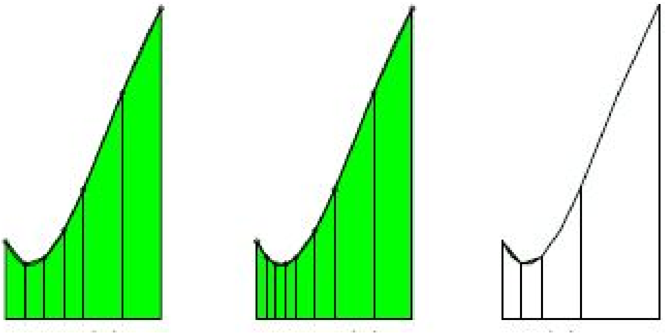
h	T_1	T_2	T_3
0.8	0.758680		
0.4	0.768760	0.772120	
0.2	0.771262	0.772096	0.772095
0.1	0.771887	0.772095	0.772095

Taula: Mètode de Romberg

Integració Adaptativa

Integració Adaptativa

Els mètodes que es consideren són de la forma



$$\Delta_4 = \left\{0, \frac{1}{16}, \frac{1}{8}, \frac{3}{16}, \frac{1}{4}, \frac{3}{8}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1\right\}$$

Integració Adaptativa

Es divideix l'interval $[a, b]$ en dos subintervals igual, i fent ús de la fórmula de Simpson per $h = (b - a)/2$ es calcula l'aproximació I_1, el mateix càlcul amb $h/2$ per l'interval de l'esquerra $[a, m]$ i l'interval de la dreta $[m, b]$ per $m = (b + a)/2$ obtenint I_D i I_E, llavors $I_2 = I_D + I_R$ i per extrapolació calculem $I_3 = I_2 + (I_2 - I_1)/15$.

Si

$$|I_1 - I_2| < 15 \cdot tol \,,$$

en aquest cas retorna el valor extrapolat I_3 com a valor, altrement es divideixen els dos subintervals $[a, m]$ i $[m, b]$ en dos cadascun fins que s'arrivi a la precisió desitjada.

S'aplica la tècnica del "divide y vencerás" subdividint l'interval d'integració.

Mètodes de MonteCarlo

per Integració aproximada

Mètodes de Montecarlo

És un mètode que utilitza nombres aleatoris per a calcular numèricament expressions matemàticament complexes i difícils d'avaluar amb exactitud, o que no poden resoldre analíticament.

Es fonamenta en dos resultats:

- Si X és una variable aleatòria i funció de densitat f i $g:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ és una funció qualsevol, llavors el valor esperat de la v.a. $g(X)$ és

$$E(g(X)) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)f(x)dx$$

- LLei forta dels grans nombres

- Si X_1,X_2,X_3,$\ldots X_n$és una successió de v.a.i.i.i, totes de mitja μ, llavors

$$\lim_{n\to\infty} \frac{X_1+X_2+X_3+\cdots+X_n}{n} = \mu$$

Exercici

Integració de Montecarlo

a) Calculeu $\displaystyle\int_0^1 x^2\,dx$.

b) Calculeu $\displaystyle\int_0^1 (1-x^2)^{(3/2)}\,dx$,

c) Com s'ha de pendre la mostra de gran per obtenir la mateixa exactitud que amb la fórmula dels trapezis?

Per trapezis useu $h = 0.1$, $h = 0.05$. Per MonteCarlo, la mostra de mida prou gran ($N > 1000$)

Integració Gaussiana

Fórmula de quadratura GAUSSIANA

S'escullen els nodes $x_1, \ldots, x_m$ i els pesos $W_1, \ldots, W_m$ de la fórmula d'aproximació:

$$\int_a^b f(t)\,dt \simeq \sum_{i=0}^{m} W_i f(x_i).$$

de tal manera que l'error d'integració sigui *"petit"*:

$$E_m\{f\} = \int_a^b \frac{f^{m)}(c)}{m!}(x - x_0)\ldots(x - x_n)\,dx.$$

Nodes no equiespaiats

Fórmula de quadratura GAUSSIANA

Si $f(x)$ és un polinomi de grau més petit o igual que $m-1$, llavors $E_m\{f\}=0$ i si a més

$$\int_a^b p_m(x)\,\mathbf{x^r}\,dx = 0 \quad r = 0, 1, \ldots k \tag{1}$$

el grau d'exactiud de la fórmula serà almenys $m+r$.
La condició (1) es pot interpretar com una condició d'ortogonalitat en $[a,b]$ del polinomi $p_m(x)$ a tots els polinomis de grau màxim k.
De fet, si prenem $p_m(x)$ com el $m-$è polinomi ortogonal, llavors (1) es compleix per a $k=m-1$.

Nodes no equiespaiats

Fórmula de quadratura GAUSSIANA

La fórmula d'integració:

$$\int_a^b f(t)\,dt = \sum_{i=0}^{m} W_i f(x_i) + E_m\{f\}$$

pot tenir grau de precisió igual a $\mathbf{2m-1}$ si els m nodes $x_1, \ldots, x_m$ són els zeros del polinomi ortogonal en $[a,b]$ de grau m. Donats els nodes, $x_1, \ldots, x_m$ els pesos $W_1, \ldots, W_m$ són sempre positius i es calculen per

$$W_j = \int_a^b l_j(x)\,dx \quad j = 0, \ldots, m\,.$$

Polinomis ortogonals de Legendre, Laguerre, TXebysxev, Hermitte, ...

Integració Gauss-Legendre

La fórmula d'integració és:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \sum_{j=1}^{m} \beta_i f(x_i) + E_m\{f\}$$

amb els nodes $\mathbf{x_1}, \ldots, \mathbf{x_m}$ els zeros del polinomi de Legendre de grau m i $W_j = \int_{-1}^{1} l_j(x)\,dx$ per $l_j(x)$ els polinomis interpoladors de lagrange desl nodes escollits.

Integració Gauss-Legendre

n	nodos x_i	coeficientes c_i
2	$-\sqrt{1/3} = -0{,}57735026918963$	$1 = 1{,}00000000000000$
	$\sqrt{1/3} = 0{,}57735026918963$	$1 = 1{,}00000000000000$
3	$-\sqrt{3/5} = -0{,}77459666924148$	$5/9 = 1{,}5555555555555$
	$0 = 0{,}00000000000000$	$8/9 = 1{,}8888888888888$
	$\sqrt{3/5} = -0{,}77459666924148$	$5/9 = 1{,}5555555555555$
4	$-\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}} = -0{,}86113631159405$	$\frac{90-5\sqrt{3}}{180} = 0{,}34785484513745$
	$-\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}} = -0{,}33998104358486$	$\frac{90+5\sqrt{3}}{180} = 0{,}65214515486255$
	$\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}} = 0{,}33998104358486$	$\frac{90+5\sqrt{3}}{180} = 0{,}65214515486255$
	$\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}} = 0{,}86113631159405$	$\frac{90-5\sqrt{3}}{180} = 0{,}34785484513745$
5	$-0{,}93246951420315$	$0{,}17132449237917$
	$-0{,}66120938646626$	$0{,}36076157304814$
	$-0{,}23861918608320$	$0{,}46791393457269$
	$0{,}23861918608320$	$0{,}46791393457269$
	$0{,}66120938646626$	$0{,}36076157304814$
	$0{,}93246951420315$	$0{,}17132449237917$

Integració Gauss-Txebixev

La fórmula d'integració és:

$$\int_{-1}^{1} \frac{g(t)}{\sqrt{1-t^2}}\, dt = \frac{\pi}{m} \sum_{i=1}^{m} g(t_i) + E_m\{g\}$$

amb els m nodes $t_1, \ldots, t_m$ els zeros del polinomi de Txebixev de grau m, els zeros són $t_k = \cos\left[\frac{(2k-1)\pi}{2m}\right]$.

En particular l'error és:

$$E_m\{g\} = \frac{g^{2m)}(\xi)}{(2m)!} \frac{2\pi}{2^{2m}}$$

Fórmules de Lobatto

Són les fórmules que s'obtenen d'integrar l'interpolant de grau m en els nodes $x_0 = -1 < x_1 < \cdots < x_m = 1$, on els nodes interiors $x_1, \ldots, x_{m-1}$ són els zeros de la derivada del polinomi de Legendre de grau m. Tenen grau d'exactitud $2m - 1$.

Per exemple, per $m = 3$:

$$\int_{-1}^{1} f(t)\,dt = \frac{1}{6}\left(f(-1) + 5f\left(\frac{-\sqrt{5}}{5}\right) + 5f\left(\frac{\sqrt{5}}{5}\right) + f(1)\right).$$

$$\int_{0}^{1} f(x)\,dx = \frac{1}{12}\left(f(0) + 5f\left(\frac{5-\sqrt{5}}{10}\right) + 5f\left(\frac{5+\sqrt{5}}{10}\right) + f(1)\right).$$

Gauss – Lobatto Quadrature

An Extension of Gaussian Quadrate

How is Gauss-Lobatto different than Gaussian Quadrature?

- The integration points INCLUDE the endpoints of the integration interval
- Accurate for polynomials up to degree 2n-3

The Lobatto Quadrature of the function f(x) on the interval [-1,1] is

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \frac{2}{n(n-1)}[f(1)+f(-1)] + \sum_{i=2}^{n-1} w_i f(x_i) + R_n$$

with weights
$$w_i = \frac{2}{n(n-1)[P_{n-1}(x_i)]^2}, \qquad x_i \neq \pm 1$$

and remainder
$$R_n = \frac{-n(n-1)^3 2^{2n-1}[(n-2)!]^4}{(2n-1)[(2n-2)!]^3} f^{(2n-2)}(\xi), \qquad -1 < \xi < 1.$$

q = quadl(fun,a,b) approximates the integral of the function fun from a to b, to within an error of 10^{-6} using adaptive Lobatto quadrature. (Limits a and b must be finite.)

Altres ..

- Integració Gauss-Laguerre: $\displaystyle\int_0^{\infty} g(x)e^{-x}dx$
- Integració Gauss-Hermite: $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} g(x)e^{-x^2}dx$

Canvi d'interval

- La relació $x = a + t(b-a)$ aplica l'interval $[a,b]$ en l'interval $[0,1]$:

$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a)\int_0^1 f(a+t(b-a))\,dt$$

- La relació $x = (a+b+t(b-a))/2$ aplica l'interval $[a,b]$ en l'interval $[-1,1]$:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \left(\frac{b-a}{2}\right)\int_{-1}^1 f\left(\frac{(b+a)+t(b-a)}{2}\right)\,dt$$