Centro de Investigación en Matemáticas, A.C.
Métodos Numéricos

CIMAT

Tarea 11

José Miguel Saavedra Aguilar

Resumen

En esta tarea se presentan y comparan los métodos de integración por el método de Newton-Cotes, de cuadratura de Richardson y de Romberg.

1. Metodología

1.1. Cuadratura de Newton-Cotes

Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ integrable en $[a, b]$, y sea $Q(f)$ la integral de f en $[a, b]$:

$$Q(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$

las cuadraturas de interpolación consisten en aproximar $Q(f)$ por $Q_n(f)$:

$$Q_n(f) := \sum_{k=0}^{n} a_{k,n} f(x_k)$$

por $n+1$ puntos de cuadratura $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ y pesos de cuadratura $a_0, \ldots, a_n \in \mathbb{R}$. En el caso que $x_k = a + kh$, para $h = \frac{b-a}{n}$, es decir, puntos equidistantes, la cuadratura por polinomios de interpolación de orden n se conoce como la *cuadratura de Newton-Cotes* de orden n. Los pesos de cuadratura de Newton-Cotes están dados por[2]:

$$a_{k,n} = h\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\int_0^n \prod_{j\neq k}(z-j)\,\mathrm{d}z, \qquad k = 0, \ldots, n$$

Los casos $n = 1, 2, 3, 4$ son los más habituales, teniendo el nombre de *regla del trapecio*, *regla de Simpson*, *regla de tres octavos de Newton* y *regla de Milne* respectivamente. A continuación se presentan los pesos de cuadratura para estas reglas: Ahora, suponga que tenemos $m+1$ puntos $x_0, \ldots, x_m$ equidistantes, entonces podemos aproximar la integral por $mn+1$ puntos utilizando la cuadratura de Newton-Cotes de orden n por la propiedad:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{m} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,\mathrm{d}x$$

Aproximando la integral $\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,\mathrm{d}x$ por Newton-Cotes de orden n.

n	$a_{0,n}$	$a_{1,n}$	$a_{2,n}$	$a_{3,n}$	$a_{4,n}$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
2	$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{1}{3}$		
3	$\frac{3}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{3}{8}$	
4	$\frac{14}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{24}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{14}{45}$

Tabla 1: Pesos de cuadratura de Newton-Cotes

1.2. Extrapolación de Richardson

El *método de extrapolación de Richardson* es un proceso para obtener una buena aproximación de un valor a_0 por una combinación de varias aproximaciones previas de a_0. Suponga que $\mathcal{A}(h)$ es un método de aproximar a_0 computable para todo $h \neq 0$ tal que para algún $k \in \mathbb{N}$,

$$\mathcal{A}(h) = a_0 + a_1 h + \ldots + a_k h^k + \mathcal{R}_{k+1}(h),$$

donde $|\mathcal{R}_{k+1}(h)| \leq C_{k+1} h^{k+1}$ y $a_0, \ldots, a_k, C_{k+1} \in \mathbb{R}$ son constantes independientes de h. Evaluando $\mathcal{A}(\delta h)$, tenemos:

$$\mathcal{A}(\delta h) = a_0 + a_1 \delta h + \ldots + a_k \delta^k h^k + \mathcal{R}_{k+1}(\delta h),$$

de forma que

$$\mathcal{B}(h) = \frac{\mathcal{A}(\delta h) - \delta \mathcal{A}(h)}{1 - \delta}$$
$$\mathcal{B}(h) = a_0 + \alpha_2 h^2 + \ldots + \alpha_k h^k + \tilde{\mathcal{R}}_{k+1}(h)$$

Donde $\alpha_i = \frac{a_i(\delta^i - \delta)}{1-\delta}$ y $\tilde{\mathcal{R}}_{k+1}(h) = \frac{\mathcal{R}_{k+1}(\delta h) - \delta \mathcal{R}_{k+1}(h)}{1-\delta}$. Procediendo inductivamente, tenemos que la extrapolación de Richarson genera la secuencia[3]:

$$\mathcal{A}_0^m = \mathcal{A}(\delta^m h)$$
$$\mathcal{A}_{n+1}^m = \frac{\mathcal{A}_n^m - \delta^{n+1} \mathcal{A}_n^{m-1}}{1 - \delta^{n+1}}, n = 1, 2, \ldots$$

En ocasiones se conoce por extrapolación de Richardson al caso $\delta = \frac{1}{2}$, de forma que tenemos[1]:

$$\mathcal{A}_0^m = \mathcal{A}\left(\frac{h}{2^m}\right)$$
$$\mathcal{A}_n^m = \frac{2^n \mathcal{A}_{n-1}^m - \mathcal{A}_{n-1}^{m-1}}{2^n - 1}$$

1.3. Extrapolación de Romberg

El método de extrapolación de Romberg se basa en la extrapolación de Richardson con $\delta = \frac{1}{2}$ para obtener una mejor aproximación a partir de la regla del trapecio de f con tamaño de paso h, $T(f,h)$, basados en la expresión de Euler-Maclaurin del error de esta regla:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = T(f,h) + \gamma_1 h^2 + \mathcal{O}(h^4)$$
$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = T(f,h/2) + \gamma_1 \frac{h^2}{4} + \mathcal{O}(h^4)$$

Si multiplicamos la primer ecuación por $-\frac{1}{3}$ y la segunda por $\frac{4}{3}$ y las sumamos, tenemos:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{3}\left(4T_{2n}^1(f) - T_n^1(f)\right) + \mathcal{O}(h^4)$$

De forma general, se define la m-ésima cuadratura de Romberg con n intervalos equidistantes para f por[2]:

$$T_0^m = T\left(f, \frac{b-a}{2^m}\right)$$
$$T_n^m = \frac{4^n T_{n-1}^m - T_{n-1}^{m-1}}{4^n - 1}, m = 1, 2, 3, \ldots$$

2. Pseudocódigo

Algoritmo 1: Integral por el método de Newton-Cotes.

Entrada: f, a, b, n, m
Salida: $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$

$h \leftarrow \frac{b-a}{mn}$;
$I \leftarrow 0$;
para $i = 0$ ***hasta*** $m - 1$ **hacer**
  para $k = 0$ ***hasta*** n **hacer**
    $I \leftarrow I + a_{k,n} f(a + (k + ni)h)$;
  fin
fin
$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \leftarrow I$;

Algoritmo 2: Integral por extrapolación de Richardson.

Entrada: f, a, b, n, m
Salida: $\int_D f(x)\,\mathrm{d}x$

inicializar $A = 0 \in \mathbb{R}^{m\times m}$;
para $i = 1$ ***hasta*** m **hacer**
  $A_{i,1} \leftarrow$ `integralNewtonCotes`$(f, a, b, n, 2^{i-1})$;
  para $j = 2$ ***hasta*** i **hacer**
    $A_{i,j} \leftarrow \frac{2^{j-1} A_{i,j-1} - A_{i-1,j-1}}{2^{j-1} - 1}$
  fin
fin
$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \leftarrow A_{m,m}$;

Algoritmo 3: Integral por extrapolación de Romberg.

Entrada: f, a, b, m

Salida: $\int_D f(x)\,\mathrm{d}x$

inicializar $A = 0 \in \mathbb{R}^{m \times m}$;

para $i = 1$ ***hasta*** m **hacer**

  $A_{i,1} \leftarrow$`integralNewtonCotes`$(f, a, b, n = 1, 2^{i-1})$;

  para $j = 2$ ***hasta*** i **hacer**

    $A_{i,j} \leftarrow \frac{4^{j-1} A_{i,j-1} - A_{i-1,j-1}}{4^{j-1}-1}$

  fin

fin

$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \leftarrow A_{m,m}$;

3. Algoritmos

Para ejecutar los algoritmos simplemente se debe correr la siguiente linea desde la Terminal:

```
julia main.jl
```

desde la carpeta del problema. A continuación se muestra la ejecución de los algoritmos para los problemas de la tarea.

```
PS D:\Documents\Julia\Tarea11\Ejercicio1> julia main.jl
Se considera el método de Newton-Cotes con h=0.001667
Para Newton-Cotes con n=1
El valor aproximado de la integral es de 1.285398
El error absoluto de integración es de 2.314814e-07
El error relativo de integración es de 1.800854e-07
Para Newton-Cotes con n=2
El valor aproximado de la integral es de 1.285398
El error absoluto de integración es de 9.814372e-14
El error relativo de integración es de 7.635277e-14
Para Newton-Cotes con n=3
El valor aproximado de la integral es de 1.285398
El error absoluto de integración es de 2.595701e-13
El error relativo de integración es de 2.019375e-13
Para Newton-Cotes con n=4
El valor aproximado de la integral es de 1.285398
El error absoluto de integración es de 3.042011e-14
El error relativo de integración es de 2.366591e-14
```

Figura 1: Ejecución del algoritmo 1 para (1) con $h = 1/600$.

```
PS D:\Documents\Julia\Tarea11\Ejercicio2> julia main.jl
Se considera la extrapolación de Richardson con m=8
Para Newton-Cotes con n=1
El valor aproximado de la integral es de 1.285398
El error absoluto de integración es de 4.744953e-10
El error relativo de integración es de 3.691427e-10
Para Newton-Cotes con n=2
El valor aproximado de la integral es de 1.285398
El error absoluto de integración es de 1.559939e-10
El error relativo de integración es de 1.213584e-10
Para Newton-Cotes con n=3
El valor aproximado de la integral es de 1.285398
El error absoluto de integración es de 5.934631e-11
El error relativo de integración es de 4.616959e-11
Para Newton-Cotes con n=4
El valor aproximado de la integral es de 1.285398
El error absoluto de integración es de 9.80438e-12
El error relativo de integración es de 7.627504e-12
```

Figura 2: Ejecución del algoritmo 2 para (1) con $m = 8$.

```
PS D:\Documents\Julia\Tarea11\Ejercicio3> julia main.jl
Se considera la extrapolación de Richardson con m=10
El valor aproximado de la integral es de 1.285398
El error absoluto de integración es de 2.220446e-16
El error relativo de integración es de 1.727438e-16
```

Figura 3: Ejecución del algoritmo 3 para (1) con $m = 10$.

4. Resultados

Se considera la función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

$$f(x) = \frac{1}{(1+x^2)^2}$$

en el dominio $[-1, 1]$, cuya integral está dada por:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{\pi + 2}{4} \tag{1}$$

Se aproximó la integral de f en $[-1, 1]$ por el método de Newton-Cotes para distintos valores de h y $n = 1, 2, 3, 4$. Los resultados obtenidos se encuentran en la tabla 2, los errores absolutos de aproximación en la tabla 3 y los errores relativos en la tabla 4. Así mismo, se aproximó

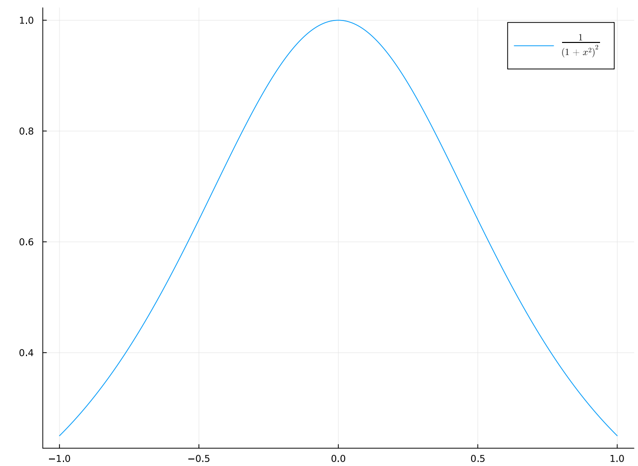

Figura 4: $f(x)$ evaluada en $[-1, 1]$

h	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$
1/6	1.283087	1.285384	1.285347	1.285341
1/60	1.285375	1.285398	1.285398	1.285398
1/600	1.285398	1.285398	1.285398	1.285398

Tabla 2: Valor encontrado de $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ por el método de Newton-Cotes para diferentes valores de n y h

h	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$
1/6	2.31156E-03	1.37874E-05	5.07322E-05	5.71958E-05
1/60	2.31478E-05	1.28686E-09	2.89735E-09	2.70872E-12
1/600	2.31481E-07	9.81437E-14	2.59570E-13	3.04201E-14

Tabla 3: Errores absolutos de aproximación para los resultados presentados en 2

h	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$
1/6	1.79832E-03	1.07262E-05	3.94681E-05	4.44966E-05
1/60	1.80083E-05	1.00114E-09	2.25405E-09	2.10730E-12
1/600	1.80085E-07	7.63528E-14	2.01938E-13	2.36659E-14

Tabla 4: Errores relativos de aproximación para los resultados presentados en 2

la integral de f en $[-1, 1]$ por extrapolación de Richardson con el método de Newton-Cotes para distintos valores de m y $n = 1, 2, 3, 4$, así como por el método de extrapolación de Romberg para distintos valores de m. Los resultados obtenidos se encuentran en la tabla 5, los errores absolutos de aproximación en la tabla 6 y los errores relativos en la tabla 7.

m	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	Romberg
5	1.285707	1.285291	1.28536	1.285407	1.285382
8	1.285398	1.285398	1.285398	1.285398	1.285398
10	1.285398	1.285398	1.285398	1.285398	1.285398

Tabla 5: Valor encontrado de $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ por extrapolación de Richardson para diferentes valores de n y extrapolación de Romberg para m =5, 8 y 10

m	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	Romberg
5	3.09278E-04	1.07659E-04	3.83539E-05	8.37258E-06	1.59940E-05
8	4.74495E-10	1.55994E-10	5.93463E-11	9.80438E-12	2.65121E-13
10	1.06581E-14	9.10383E-15	7.99139E-13	1.55431E-14	2.22045E-16

Tabla 6: Errores absolutos de aproximación para los resultados presentados en 5

m	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	Romberg
5	2.40608E-04	8.37554E-05	2.98381E-05	6.51361E-06	1.24428E-05
8	3.69143E-10	1.21358E-10	4.61696E-11	7.62750E-12	2.06256E-13
10	8.29170E-15	7.08250E-15	6.21705E-13	1.20921E-14	1.72744E-16

Tabla 7: Errores relativos de aproximación para los resultados presentados en 5

5. Conclusiones

Notamos que para h pequeño, el método de Newton-Cotes tiene resultados similares para $n = 2, 3, 4$, por lo que en la práctica $n = 2$ ofrece el mejor balance entre error relativo y número de evaluaciones de f. Para los métodos de extrapolación, el método de Romberg es el mejor, pues tiene menor error de aproximación, pues si f es $2m$ veces continuamente diferenciable, el error de aproximación es de orden $\left(\frac{h}{2^n}\right)^{2m}$[2]:

$$\left| \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - T_n^m(f) \right| \leq C_m \left\| f^{(2m)} \right\|_\infty \left(\frac{h}{2^n} \right)^{2m}$$

En general los métodos de extrapolación resultan en mejores aproximaciones, pues mejoran las aproximaciones obtenidas por los métodos de Newton-Cotes, y en particular el método de extrapolación de Romberg que está diseñado especialmente para mejorar el método del trapecio, con bajo costo computacional y la mejor precisión de los comparados en esta tarea.

Referencias

[1] J.-P. Corriou, *Numerical Methods and Optimization.* Springer International Publishing, 2021. [Online]. Available: https://doi.org/10.1007/978-3-030-89366-8

[2] R. Kress, *Numerical Analysis.* Springer New York, 1998. [Online]. Available: https://doi.org/10.1007/978-1-4612-0599-9

[3] A. Quarteroni, R. Sacco, and F. Saleri, *Numerical Mathematics.* Springer New York, 2007. [Online]. Available: https://doi.org/10.1007/b98885