Integración numérica

Lección 16

Dr. Pablo Alvarado Moya

CE3102 Análisis Numérico para Ingeniería
Área de Ingeniería en Computadores
Tecnológico de Costa Rica

II Semestre 2017

Contenido

Derivada

- Matemáticamente la tasa de cambio de una función $f(x)$ se determina por medio de su derivada:

$$f'(x) = \frac{d}{dx} f(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

  y está asociada al concepto de "*pendiente*" de $f(x)$

- La tasa de cambio de la tasa de cambio de $f(x)$ es la segunda derivada denotada como:

$$f''(x) = \frac{d^2}{dx^2} f(x) = \frac{d}{dx} f'(x) = \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} f(x) \right)$$

  y asociada con el concepto de "*curvatura*".

Derivadas parciales

- El concepto derivadas parciales extiende el concepto anterior a funciones de múltiples variables

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x, y) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x, y) - f(x, y)}{\Delta x}$$
$$\frac{\partial}{\partial y} f(x, y) = \lim_{\Delta y \to 0} \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x, y)}{\Delta y}$$

Integración

- El operador inverso a la derivación es la integración:

$$v(t) = \frac{d}{dt}y(t)$$
$$y(t) = \int_0^t v(t)\,dt$$

- La integral se asocia con el área bajo la curva $v(t)$

Relevancia

- La integración y derivación se encuentran presentes en todas las ramas de la ingeniería
- Relaciones entre carga, corriente, tensión en elementos eléctricos pasivos
- Relaciones entre velocidades y posiciones
- Relaciones entre densidades y masas
- Cálculos de longitudes y valores promedio
- $\cdots$

Integración numérica

Fórmulas de Newton-Cotes

Fórmulas de Newton-Cotes

- Típos de integración numérica más comunes
- Reemplazan una función complicada o datos tabulados por polinomio de aproximación fácil de integrar:

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b f_n(x)\,dx$$

  con el polinimio $f_n(x)$ de orden n

$$f_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots a_{n-1}x^{n-1} + a_n x^n$$

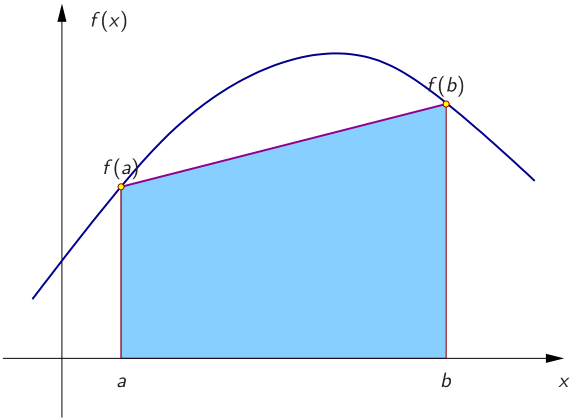
- El polinomio puede aproximar todo el rango $[a, b]$ o dicho rango puede particionarse en "barras" de menor tamaño.

Fórmulas abiertas y cerradas

- Hay fórmulas **cerradas** y **abiertas**
- En fórmulas **cerradas** se conocen los datos en los extremos del intervalo de integración
- En fórmulas **abiertas** el intervalo de integración va más allá de los datos disponibles.

Regla del trapecio (1)

- La regla del trapecio utiliza un polinomio de primer orden (línea recta) para aproximar área entre a y b.



Regla del trapecio (2)

- La línea entre a y b es

$$f_1(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a)$$

- El área está dada por

$$I = \int_a^b \left[f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a) \right] dx = \underbrace{(b - a)\frac{f(a) + f(b)}{2}}_{\text{Regla del trapecio}}$$

- Observe que

$$\begin{aligned} I &= \text{ancho} \times \text{altura promedio} \\ &= (b - a) \times \text{altura promedio} \end{aligned}$$

Un paréntesis para preparar cálculo del error

Repaso: Interpolación polinomial de Newton (1)

Diferencias divididas finitas se denotan con paréntesis cuadrados:

$$f[x_i, x_j] = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j}$$

$$f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_i, x_j] - f[x_j, x_k]}{x_i - x_k}$$

$$f[x_i, x_j, x_k, x_l] = \frac{f[x_i, x_j, x_k] - f[x_j, x_k, x_l]}{x_i - x_l}$$

$$\vdots$$

$$f[x_n, x_{n-1}, \ldots, x_1, x_0] = \frac{f[x_n, x_{n-1}, \ldots, x_1] - f[x_{n-1}, x_{n-2}, \ldots, x_0]}{x_n - x_0}$$

Repaso: Interpolación polinomial de Newton (2)

El polinomio de interpolación de Newton en diferencias divididas es

$$\begin{aligned} f_n(x) = & f(x_0) + (x - x_0)f[x_1, x_0] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_2, x_1, x_0] \\ & + \cdots + (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})f[x_n, x_{n-1}, \ldots, x_1, x_0] \end{aligned}$$

El cálculo de las diferencias divididas finitas es recursivo

i	x_i	$f(x_i)$	1era	2da	3ra
0	x_0	$f(x_0)$	$f[x_1, x_0]$	$f[x_2, x_1, x_0]$	$f[x_3, x_2, x_1, x_0]$
1	x_1	$f(x_1)$	$f[x_2, x_1]$	$f[x_3, x_2, x_1]$	
2	x_2	$f(x_2)$	$f[x_3, x_2]$		
3	x_3	$f(x_3)$			

Fórmula hacia adelante de Newton-Gregory (1)

Interpolación de datos equiespaciados

- **Newton-Gregory**: datos equiespaciados
- Asúmase una secuencia de $n+1$ datos equiespaciados

$$
\begin{aligned}
& x_0 \\
& x_1 = x_0 + h \\
& x_2 = x_0 + 2h \\
& \vdots \\
& x_n = x_0 + nh
\end{aligned}
$$

- Con esto se simplifican las diferencias divididas finitas

Fórmula hacia adelante de Newton-Gregory (2)

Interpolación de datos equiespaciados

- La segunda diferencia dividida hacia adelante es

$$
\begin{aligned}
f[x_0, x_1, x_2] &= \frac{\dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0} \\
&= \frac{f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)}{2h^2} \\
&= \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2h^2}
\end{aligned}
$$

con $\Delta^2 f(x_0)$ la segunda diferencia hacia adelante.

Fórmula hacia adelante de Newton-Gregory (3)

Interpolación de datos equiespaciados

- La tercer diferencia dividida hacia adelante es

$$f[x_0, x_1, x_2, x_3] =$$

$$= \frac{\dfrac{f(x_3) - 2f(x_2) + f(x_1)}{2h^2} - \dfrac{f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)}{2h^2}}{x_3 - x_0}$$

$$= \frac{f(x_3) - 3f(x_2) + 3f(x_1) - f(x_0)}{6h^3}$$

$$= \frac{\Delta^3 f(x_0)}{6h^3}$$

con $\Delta^3 f(x_0)$ la tercera diferencia hacia adelante.

Fórmula hacia adelante de Newton-Gregory (4)

Interpolación de datos equiespaciados

- En general, utilizando la n-ésima diferencia dividida hacia adelante

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_n] = \frac{\Delta^n f(x_0)}{n!h^n}$$

se puede reexpresar el polinomio de interpolación de Newton como

$$\begin{aligned}f_n(x) = & f(x_0) + \frac{\Delta f(x_0)}{h}(x - x_0) + \\ & \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2!h^2}(x - x_0)(x - x_0 - h) + \cdots + \\ & \frac{\Delta^n f(x_0)}{n!h^n}(x - x_0)(x - x_0 - h)\cdots(x - x_0 - [n-1]h) + R_n\end{aligned}$$

Fórmula hacia adelante de Newton-Gregory (5)

Interpolación de datos equiespaciados

- Introduciendo α como distancia normalizada a x_0 en "pasos" h

$$\alpha = \frac{x - x_0}{h}$$

entonces

$$\begin{aligned}
x - x_0 &= \alpha h & &= h\alpha \\
x - x_0 - h &= \alpha h - h & &= h(\alpha - 1) \\
x - x_0 - 2h &= \alpha h - 2h & &= h(\alpha - 2) \\
x - x_0 - 3h &= \alpha h - 3h & &= h(\alpha - 3) \\
&\vdots \\
x - x_0 - (n-1)h &= \alpha h - (n-1)h & &= h(\alpha - n + 1)
\end{aligned}$$

Fórmula hacia adelante de Newton-Gregory (6)

Interpolación de datos equiespaciados

- Sustituyendo en la fórmula hacia adelante de Newton-Gregory

$$f_n(x) = f(x_0) + \Delta f(x_0)\alpha + \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2!}\alpha(\alpha-1) + \cdots + \frac{\Delta^n f(x_0)}{n!}\alpha(\alpha-1)\cdots(\alpha-[n-1]) + R_n$$

- con el residuo R_n

$$R_n = \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}h^{n+1}\alpha(\alpha-1)\cdots(\alpha-n)$$

Error en regla del trapecio (1)

- Tómese la interpolación hacia adelante de Newton-Gregory de primer orden:

$$I = \int_a^b \left[f(a) + \Delta f(a)\alpha + \frac{f''(\xi)}{2}\alpha(\alpha-1)h^2 \right] dx$$

con $h = b - a$, $\alpha = \dfrac{(x-a)}{h}$ y $dx = h\,d\alpha$

$$I = h\int_0^1 \left[f(a) + \Delta f(a)\alpha + \frac{f''(\xi)}{2}\alpha(\alpha-1)h^2 \right] d\alpha$$

si h es lo suficientemente pequeño entonces $f''(\xi) \approx$ cte y

$$I = h\left[\alpha f(a) + \frac{\alpha^2}{2}\Delta f(a) + \left(\frac{\alpha^3}{6} - \frac{\alpha^2}{4}\right) f''(\xi)h^2 \right]_0^1$$

Error en regla del trapecio (2)

- Finalmente

$$I = h\left[f(a) + \frac{\Delta f(a)}{2}\right] - \frac{1}{12}f''(\xi)h^3$$

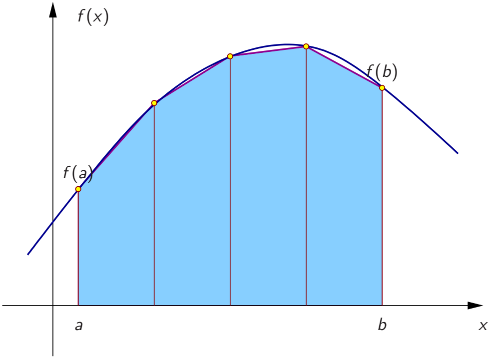
y con $\Delta f(a) = f(b) - f(a)$ entonces

$$I = \underbrace{(b-a)\frac{f(b)+f(a)}{2}}_{\text{Regla del trapecio}} - \underbrace{\frac{1}{12}f''(\xi)(b-a)^3}_{\text{Error de truncamiento}}$$

- Nótese que si $f''(x) = 0$ no hay error de truncamiento!
- $\Rightarrow$ rectas no tienen error

Regla del trapecio de aplicación múltiple (1)

- Para mejorar precisión, intervalo de integración se divide en varios segmentos



Regla del trapecio de aplicación múltiple (2)

- Se utilizan $n+1$ puntos $x_0, x_1, \ldots, x_n$ equiespaciados con distancia $h = \dfrac{b-a}{n}$

Regla del trapecio de aplicación múltiple (3)

- Si $a = x_0$ y $b = x_n$ la integral completa es

$$I = \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\,dx$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx$$

- Utilizando la regla del trapecio

$$I = \sum_{i=1}^{n} h \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2}$$

Regla del trapecio de aplicación múltiple (4)

y agrupando términos

$$I = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right]$$

- Con $h = (b-a)/n$

$$I = \underbrace{(b-a)}_{\text{Ancho}} \cdot \underbrace{\frac{1}{2n}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right)}_{\text{Altura promedio}}$$

- A esta regla de **aplicación múltiple** se le conoce además como **compuesta**

Regla del trapecio de aplicación múltiple (5)

- Sumando los errores de cada intervalo se obtiene:

$$E_t = -\frac{(b-a)^3}{12n^3}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i)$$

y utilizando el promedio de la segunda derivada

$$\bar{f}'' \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) \qquad \Rightarrow \qquad \sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) = n\bar{f}''$$

Regla del trapecio de aplicación múltiple (6)

- El error se reescribe como

$$E_a = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}\bar{f}''$$

- Si se duplica el número de segmentos, el error de truncamiento se divide entre cuatro

Conclusiones de la regla del trapecio

- Para funciones con primera derivada casi constante, la regla del trapecio de múltiples segmentos es suficientemente exacta
- Si se requiere alta exactitud, se debe aumentar el número de segmentos. Esto es desventajoso si
    1. se evalúan numerosas integrales
    2. la evaluación de la función misma es costosa en tiempo de cómputo
- errores de redondeo limitan precisión de procesos de integración

Regla de Simpson

- Precisión se puede mejorar utilizando polinomios de orden superior para aproximar función.
- Las fórmulas que utilizan polinomios por puntos equiespaciados se denominan **Reglas de Simpson**

Regla de Simpson 1/3 (1)

- La regla de Simpson 1/3 utiliza un polinomio de segundo grado

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b f_2(x)\,dx$$

- con $a = x_0$, $b = x_2$, $h = (b-a)/2$ y utilizando un polinomio de Lagrange de segundo orden

$$I = \int_{x_0}^{x_2} \left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2) \right] dx$$

Regla de Simpson 1/3 (2)

- Integrando se obtiene

$$I \approx h\frac{1}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]$$

- El factor 1/3 da origen al nombre de esta regla particular que se denomina **regla de Simpson 1/3**

Regla de Simpson 1/3 (3)

- Con $h = (b-a)/2$ se obtiene

$$I \approx \underbrace{(b-a)}_{\text{ancho}} \cdot \underbrace{\frac{1}{6}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]}_{\text{altura promedio}}$$

Error de la Regla de Simpson 1/3 (1)

- El error de la regla de Simpson 1/3 se obtiene del polinomio de interpolación de Newton-Gregory

$$I = \int_{x_0}^{x_2} \left[f(x_0) + \Delta f(x_0)\alpha + \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2}\alpha(\alpha-1) + \frac{\Delta^3 f(x_0)}{6}\alpha(\alpha-1)(\alpha-2) + \frac{f^{(4)}(\xi)}{24}\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)(\alpha-3)h^4 \right] dx$$

donde se han usado 4 términos del polinomio en vez de tres, por una razón que se comprenderá en los siguientes pasos.

Error de la Regla de Simpson 1/3 (2)

- Integrando se obtiene

$$
\begin{aligned}
I = h \Bigg[& \alpha f(x_0) + \frac{\alpha^2}{2}\Delta f(x_0) + \left(\frac{\alpha^3}{6} - \frac{\alpha^2}{4}\right)\Delta^2 f(x_0) \\
& + \left(\frac{\alpha^4}{24} - \frac{\alpha^3}{6} + \frac{\alpha^2}{6}\right)\Delta^3 f(x_0) \\
& + \left(\frac{\alpha^5}{120} - \frac{\alpha^4}{16} + \frac{11\alpha^3}{72} - \frac{\alpha^2}{8}\right) f^4(\xi) h^4 \Bigg]_0^2
\end{aligned}
$$

- Evaluando en los límites se obtiene

$$
I = h\left[2f(x_0) + 2\Delta f(x_0) + \frac{\Delta^2 f(x_0)}{3} + 0 \cdot \Delta^3 f(x_0) - \frac{1}{90} f^4(\xi) h^4\right]
$$

Error de la Regla de Simpson 1/3 (3)

- Evaluando y simplificando se obtiene

$$I = \underbrace{\frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]}_{\text{Regla de Simpson } 1/3} - \underbrace{\frac{1}{90} f^{(4)}(\xi) h^5}_{\text{Error de truncamiento}}$$

- Si h se reduce entre dos, el error se reduce por un factor 32
- Sustituyendo $h = (b-a)/2$ se reescribe el error como

$$E_t = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi)$$

- Observe proporcionalidad a la **cuarta** derivada, en vez de la tercera $\Rightarrow$ el resultado será exacto para polinomios cúbicos aún cuando se obtienen aproximaciones parabólicas.

Regla de Simpson 1/3 de aplicación múltiple (1)

- Similar a caso del trapecio, se mejora precisión dividiendo intervalo $[a, b]$ en n segmentos iguales
- El número total de segmentos será entonces par (pues en cada segmento se utiliza un punto en su centro)
- La integral total es entonces

$$I = \int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)\,dx + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)\,dx$$

Regla de Simpson 1/3 de aplicación múltiple (2)

- Sustituyendo la regla de Simpson 1/3 en cada integral y simplificando se obtiene

$$I \approx \underbrace{(b-a)}_{\text{ancho}} \cdot \underbrace{\frac{1}{3n}\left[f(x_0) + 4\sum_{i=1,3,5,\ldots}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{j=2,4,6,\ldots}^{n-2} f(x_j) + f(x_n)\right]}_{\text{altura promedio}}$$

- Factor "4" proviene de la regla de Simpson directamente
- Factor "2" indica que los puntos se usan en dos segmentos adyacentes

Error de la regla de Simpson 1/3 de aplicación múltiple

El error estimado para la regla de Simpson de aplicación múltiple es

$$E_a = -\frac{(b-a)^5}{180n^4}\bar{f}^{(4)}(x)$$

con $\bar{f}^{(4)}(x)$ el promedio de la cuarta derivada en el intervalo

Limitaciones de la regla de Simpson

- Si solo se cuentan con puntos discretos disponibles para la integral, la regla de Simpson es aplicable si los puntos son equidistantes y se cuenta con un número par de segmentos (número impar de puntos)
- Si se cuenta con un número impar de segmentos (número par de puntos) se usa la regla de Simpson 3/8

Regla de Simpson 3/8

- Regla de Simpson 3/8 se obtiene ajustando un polinomio de tercer grado a cuatro puntos e integrando

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b f_3(x)\,dx$$

para obtener

$$I \approx \frac{3}{8}h\left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)\right]$$

donde $h = (b-a)/3$.

- El factor 3/8 da nombre a esta regla, que también se presenta:

$$I \approx \underbrace{(b-a)}_{\text{Ancho}}\underbrace{\frac{1}{8}\left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)\right]}_{\text{Altura promedio}}$$

Error de regla de Simpson 3/8

- El error de la regla 3/8 es

$$E_t = -\frac{3}{80} h^5 f^{(4)}(\xi)$$

- con $h = (b - a)/3$

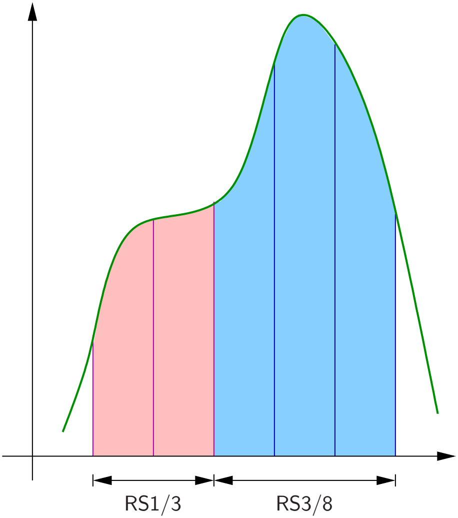
$$E_t = -\frac{(b-a)^5}{6480} f^{(4)}(\xi)$$

- Esta regla es por tanto más exacta que la 1/3.

Cuándo utilizar regla 3/8 (1)

- Se prefiere usualmente regla de Simpson 1/3 sobre la 3/8 pues alcanza exactitud de tercer orden con solo tres puntos, en vez de cuatro
- La regla 3/8 es útil si se cuenta con un número de segmentos impar
- Para múltiples intervalos, se prefiere utilizar la regla 1/3, y de ser necesario complementarla con la regla 3/8 si el número de segmentos es impar.

Cuándo utilizar regla 3/8 (2)



Implementaciones (1)

```
template<typename T>
T trapezoid(T h,T f0, T f1) {
  return h*(f0+f1)/T(2);
}

template<typename T>
T trapezoid(T h,const vector<T>& f) {
  int n=f.size(); // número de puntos
  T sum = f[0];
  for (int i=1;i<n-1;++i) {
    sum += T(2)*f[i];
  }
  sum += f[n-1];
  return h*sum/T(2);
}
```

Implementaciones (2)

```
template<typename T>
T simpson13(T h,T f0,T f1,T f2) {
  return 2*h*(f0+T(4)*f1+f2) / T(6);
}

template<typename T>
T simpson13(T h,int n,const vector<T>& f) {
  assert(n<=f.size());   // n es el número de puntos
  T sum = f[0];
  for (int i=1;i<n-1;i+=2) {
    sum += T(4)*f[i] + 2*f(i+1);
  }
  sum += 4*f[n-1] + f[n];
  return h*sum/T(3);
}
```

Implementaciones (3)

```
template<typename T>
T simpson38(T h,T f0,T f1,T f2,T f3) {
  return 3*h*(f0+T(3)*(f1+f2)+f3) / T(8);
}
```

Implementaciones (4)

```
template<typename T>
T simpson(T a, T b, const vector<T>& f) {
  int n=f.size()-1; // número de segmentos
  T h = (b-a)/n;
  T sum(0);
  if (n==1) {
    sum = trapezoid(h,f[n-1],f[n]);
  } else {
    int m = n;
    bool odd = ( (n % 2) != 0 );
    if (odd && (n > 1)) {
      sum += simpson38(h,f[n-3],f[n-2],f[n-1],f[n]);
      m = n-3;
    }
    if (m>1) {
      sum += simpson13(h,m,f);
    }
  }
  return sum;
}
```

Implementaciones (5)

Integración con segmentos desiguales

- Hasta ahora, reglas de Newton-Cotes han usado datos equiespaciados
- La regla del trapecio es fácilmente modificable a datos separados arbitrariamente tomando pares:

$$I = h_1 \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} + h_2 \frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \cdots + h_n \frac{f(x_{n-1}) + f(x_n)}{2}$$

  con h_i el ancho del segmento i.
- La exactitud anterior puede mejorarse si se verifica la aplicabilidad de las reglas de Simpson

Algoritmo para segmentos desiguales (1)

```
template<typename T>
T integral(const vector<T>& x, const vector<T>& f) {
  T h=x[1]-x[0];
  int k = 1;
  int n = x.size()<f.size() ? x.size() : f.size();
  T sum = T(0);
  for (j=1;j<n;++j) {
    T hf= (j<n-1) ? x[j+1] - x[j] : -1;
    if (abs(h-hf) < std::limits<T>::epsilon()) {
      if (k == 3) {
        sum += simpson13(h,f[j-3],f[j-2],f[j-1]);
        --k;
      } else {
        ++k;
      }
    } else {
      if (k==1) {
        sum += trapezoid(h,f[j-1],f[j]);
      } else {
```

Algoritmo para segmentos desiguales (2)

```
          if (k == 2) {
            sum += simpson13(h,f[j-2],f[j-1],f[j]);
          } else {
            sum += simpson38(h,f[j-3],f[j-2],f[j-1],f[j]);
          }
          k=1;
        }
      }
      h = hf;
    }
    return sum;
  }
```

Resumen

1. Introducción
2. Fórmulas de Newton-Cotes
   - Regla del trapecio
   - Regla de Simpson 1/3
   - Regla de Simpson 3/8
   - Integración con segmentos desiguales

Este documento ha sido elaborado con software libre incluyendo LaTeX, Beamer, GNUPlot, GNU/Octave, XFig, Inkscape, LTI-Lib-2, GNU-Make y Subversion en GNU/Linux