Unidad 4 - Aproximación Polinomial Parte II

Integración y derivación

Cecilia Rapelli   Marcos Prunello

Año 2018

- Dada la función $y = f(x)$ definida en forma tabular con a través de $n+1$ valores de x equiespaciados $x_0, x_1 = x_0 + h, \cdots, x_n = x_0 + nh$, se desea hallar una aproximación de la integral definida:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \tag{1}$$

- Para esto, aproximaremos a $f(x)$ con el polinomio de Newton:

$$f(x) \cong y_0 + k\Delta y_0 + \frac{k(k-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{k(k-1)(k-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \cdots \tag{2}$$

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

- En (1) la variable es x, mientras que en (2) la variable está expresada como $k = (x - x_0)/h$, por lo tanto para poder reemplazar (2) en (1) se debe realizar un cambio de variables:

$$k = \frac{x - x_0}{h} \implies \begin{cases} x = x_0 + hk \\ dx = hdk \\ x = x_0 \implies k = \frac{x_0 - x_0}{h} = 0 \\ x = x_n \implies k = \frac{x_n - x_0}{h} = \frac{x_0 + nh - x_0}{h} = n \end{cases}$$

- Luego:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx$$

$$\cong \int_0^n \left(y_0 + k\Delta y_0 + \frac{k(k-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{k(k-1)(k-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \cdots\right) h\, dk$$

$$= h \int_0^n \left[y_0 + k\Delta y_0 + \left(\frac{k^2}{2} - \frac{k}{2}\right)\Delta^2 y_0 + \left(\frac{k^3}{6} - \frac{k^2}{2} + \frac{k}{3}\right)\Delta^3 y_0 + \cdots\right] dk$$

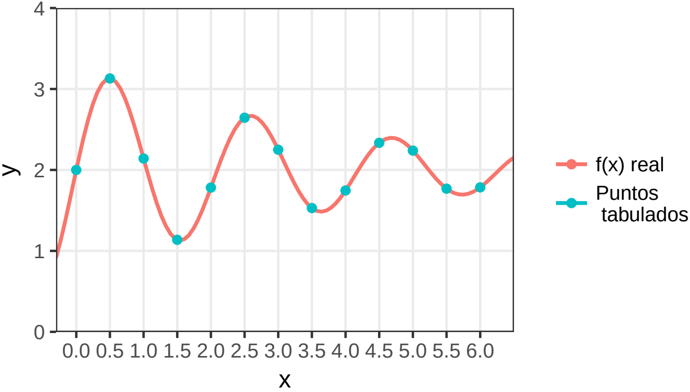
$$= h\left[\ y_0 k + \frac{k^2}{2}\Delta y_0 + \left(\frac{k^3}{6} - \frac{k^2}{4}\right)\Delta^2 y_0 + \left(\frac{k^4}{24} - \frac{k^3}{6} + \frac{k^2}{6}\right)\Delta^3 y_0 + \cdots\right]\Bigg|_0^n$$

$$= h\left[y_0 n + \frac{n^2}{2}\Delta y_0 + \left(\frac{n^3}{6} - \frac{n^2}{4}\right)\Delta^2 y_0 + \left(\frac{n^4}{24} - \frac{n^3}{6} + \frac{n^2}{6}\right)\Delta^3 y_0 + \cdots\right]$$

Integración numérica

Ejemplo. Se tienen los siguientes valores tabulados de $f(x)$ y se desea hallar su integral entre 0 y 6.

x	$y = f(x)$
0.0	2.00
0.5	3.13
1.0	2.14
1.5	1.14
2.0	1.78
2.5	2.64
3.0	2.25
3.5	1.53
4.0	1.75
4.5	2.34
5.0	2.24
5.5	1.77
6.0	1.78



La curva roja es la verdadera función $f(x)$ que originó la tabla, la cual suponemos desconocida o difícil de integrar.

- Si la interpolación se limita al primer orden y la integral sólo se calcula entre los dos primeros valores de x, se obtiene:

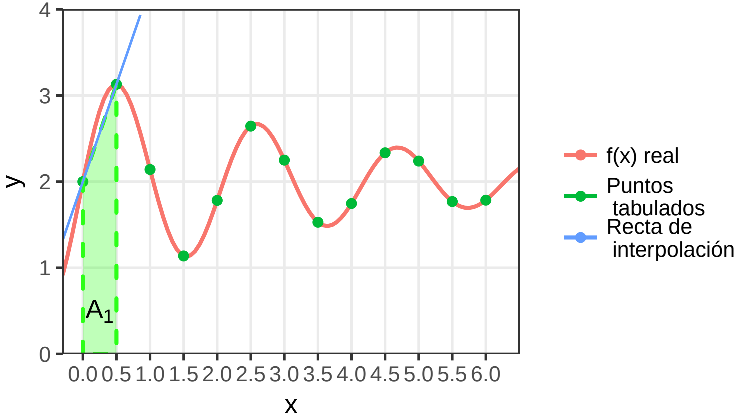
$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \cong \int_0^1 \Big(y_0 + k\Delta y_0\Big) h dk = h\left(y_0 k + \frac{k^2}{2}\Delta y_0\right)\Big|_0^1$$
$$= h\Big(y_0 + \frac{\Delta y_0}{2}\Big) = h\Big(y_0 + \frac{y_1 - y_0}{2}\Big) = \frac{h}{2}(y_0 + y_1)$$

- En el ejemplo:

$$\int_0^{0,5} f(x)dx \cong \frac{0,5}{2}(3,13 + 2) = 1,2825$$

- Geométricamente, esto equivale al área A_1 del trapecio formado por la recta de interpolación y el eje de las abscisas, entre x_0 y x_1:

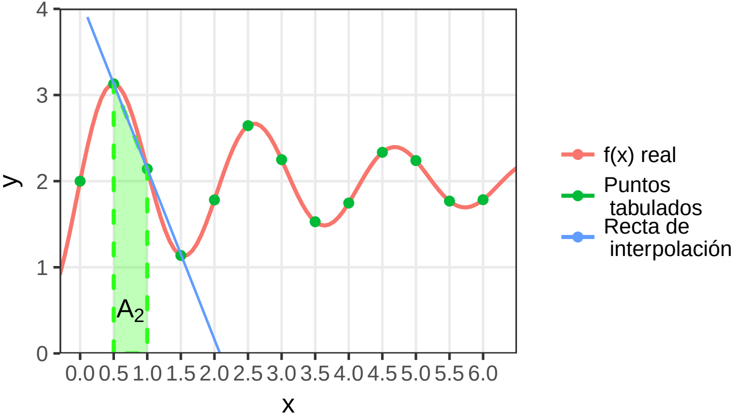
$$A_2 = 1{,}2825$$



- De manera semejante, se puede emplear la interpolación lineal de Newton para obtener una aproximación de la integral entre x_1 y x_2:

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)dx \cong A_2 = \frac{h}{2}(y_1 + y_2)$$

$A_2 = 1{,}3175$



Integración numérica: fórmula trapecial

- Y sucesivamente para todos los intervalos:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \cong A_i = \frac{h}{2}(y_{i-1} + y_i) \quad i = 1, \cdots, n$$

- De modo que la suma de las áreas de los trapecios A_i resulta ser la aproximación para la integral entre x_0 y x_n:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \cong \sum_{i=1}^{n} A_i = \sum_{i=1}^{n} \frac{h}{2}(y_{i-1} + y_i) = \frac{h}{2}\left(y_0 + y_n + 2\sum_{i=1}^{n-1} y_i\right)$$

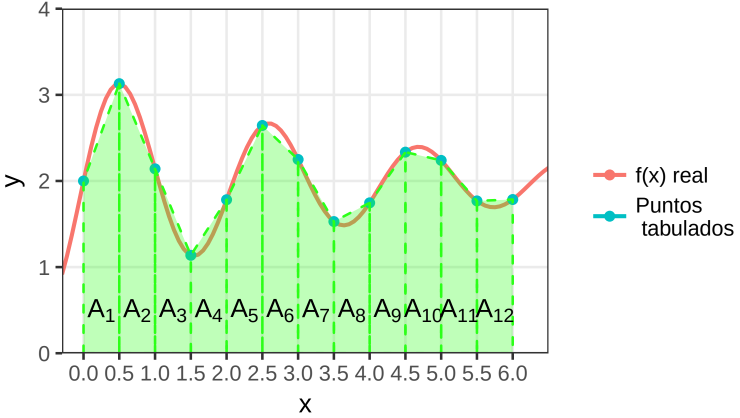
- La fórmula hallada se conoce como **fórmula trapecial** y se la simboliza con:

$$A_{1/2} = \frac{h}{2}\left(y_0 + y_n + 2\sum_{i=1}^{n-1} y_i\right)$$

- Cuanto menor sea el ancho de los intervalos h y más se acerque $f(x)$ a una recta, mejor será la aproximación así obtenida.

Integración numérica: fórmula trapecial

- Gráficamente:



- En el ejemplo: $A_{1/2} = 12{,}3000$.
- El valor exacto es: $\int_0^6 f(x)dx = 12{,}2935$, con lo cual el error relativo de la aproximación con la fórmula trapecial fue: $0{,}05\,\%$.

Integración numérica: fórmula de Simpson de 1/3

- Si la interpolación es de segundo orden y la integral sólo se calcula entre los tres primeros valores de x, se obtiene:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \cong \int_0^2 \left[y_0 + k\Delta y_0 + \left(\frac{k^2}{2} - \frac{k}{2}\right)\Delta^2 y_0\right] hdk$$

$$= h\left[y_0 k + \frac{k^2}{2}\Delta y_0 + \left(\frac{k^3}{6} - \frac{k^2}{4}\right)\Delta^2 y_0\right]\Bigg|_0^2$$

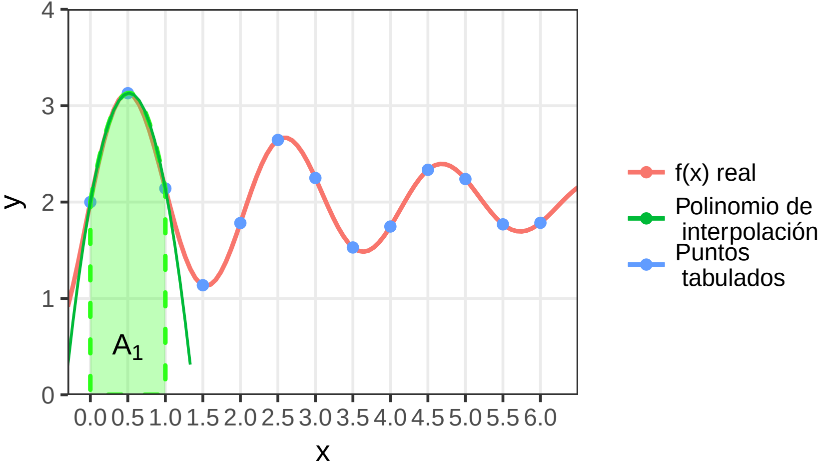
$$= h\Big[2y_0 + 2\Delta y_0 + \frac{1}{3}\Delta^2 y_0\Big]$$

- Dado que $\Delta y_0 = y_1 - y_0$ y $\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0 = y_2 - 2y_1 + y_0$, nos queda:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \cong h\Big[2y_0 + 2(y_1 - y_0) + \frac{1}{3}(y_2 - 2y_1 + y_0)\Big]$$

$$= \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2)$$

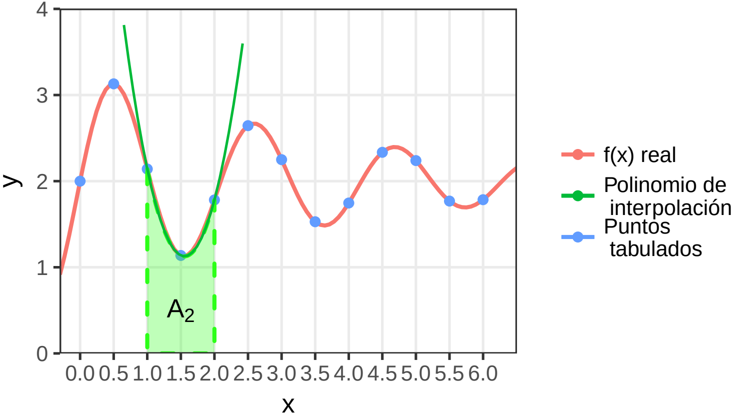
- Geométricamente, esto equivale al área A_1 encerrada entre el eje de las abscisas, x_0 y x_2 y el polinomio integrador que pasa por (x_0, y_0), (x_1, y_1) y (x_2, y_2): $A_1 = 2{,}7766$



- De manera semejante, se puede emplear la interpolación cuadrática de Newton para obtener una aproximación de la integral entre x_2 y x_4:

$$\int_{x_2}^{x_4} f(x)dx \cong A_2 = \frac{h}{3}(y_2 + 4y_3 + y_4)$$

$A_2 = 1{,}4133$



- Y sucesivamente para todos los intervalos:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx \cong \frac{h}{3}(y_{i-1} + 4y_i + y_{i+1}) \quad i = 1, 3, 5, \cdots, n-1$$

- De modo que la suma de estas áreas resulta ser la aproximación para la integral entre x_0 y x_n:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \cong \sum_{\substack{i=1 \\ i \ impar}}^{n-1} \frac{h}{3}(y_{i-1}+4y_i+y_{i+1}) = \frac{h}{3}\Big(y_0+y_n+2\sum_{\substack{i=2 \\ i \ par}}^{n-2} y_i+4\sum_{\substack{i=1 \\ i \ impar}}^{n-1} y_i\Big)$$

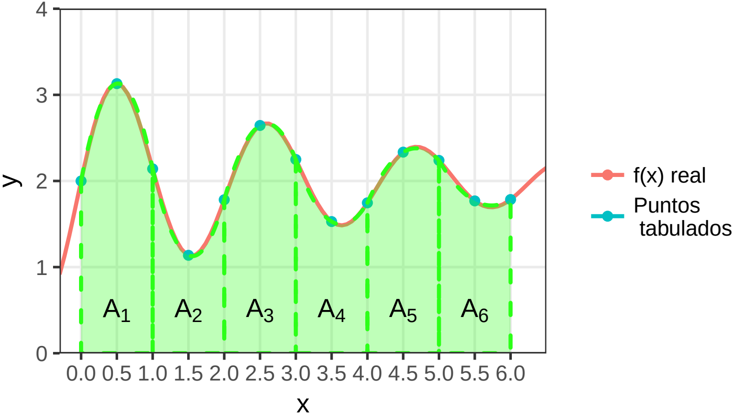
- La fórmula hallada se conoce como **fórmula de Simpson de 1/3** y se la simboliza con:

$$A_{1/3} = \frac{h}{3}\left(y_0 + y_n + 2\sum_{\substack{i=2 \\ i \ par}}^{n-2} y_i + 4\sum_{\substack{i=1 \\ i \ impar}}^{n-1} y_i\right)$$

- Para poder aplicarla, es necesario que la cantidad de puntos tabulados sea impar, es decir que la tabla tenga una cantidad par de intervalos.

Integración numérica: fórmula de Simpson de 1/3

- Gráficamente:



- En el ejemplo: $A_{1/3} = 12{,}3833$.
- El valor exacto es: $\int_0^6 f(x)dx = 12{,}2935$, con lo cual el error relativo de la aproximación con la fórmula trapecial fue: $7{,}3\,\%$.

Integración numérica: fórmula de Simpson de 3/8

- Si la interpolación es de tercer orden y la integral sólo se calcula entre los 4 primeros valores de x, se obtiene:

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx \cong \int_0^3 \left[y_0 + k\Delta y_0 + \left(\frac{k^2}{2} - \frac{k}{2}\right)\Delta^2 y_0 + \left(\frac{k^3}{6} - \frac{k^2}{2} + \frac{k}{3}\right)\Delta^3 y_0\right] hdk$$

$$= h\left[y_0 k + \frac{k^2}{2}\Delta y_0 + \left(\frac{k^3}{6} - \frac{k^2}{4}\right)\Delta^2 y_0 + \left(\frac{k^4}{24} - \frac{k^3}{6} + \frac{k^2}{6}\right)\Delta^3 y_0\right]\Bigg|_0^3$$

$$= h\left[3y_0 + \frac{9}{2}\Delta y_0 + \frac{9}{4}\Delta^2 y_0 + \frac{3}{8}\Delta^3 y_0\right]$$

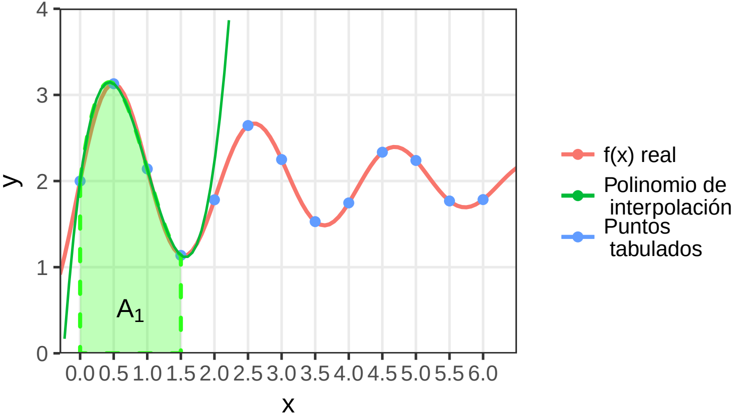
- Dado que $\Delta y_0 = y_1 - y_0$, $\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0 = y_2 - 2y_1 + y_0$, y $\Delta^3 y_0 = \Delta^2 y_1 - \Delta^2 y_0 = y_3 - 3y_2 - 3y_1 + y_0$ nos queda:

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx \cong \frac{3}{8}h(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3)$$

Integración numérica: fórmula de Simpson de 3/8

- Geométricamente, esto equivale al área A_1 encerrada entre el eje de las abscisas, x_0 y x_3 y el polinomio integrador que pasa por (x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2) y (x_3, y_3):

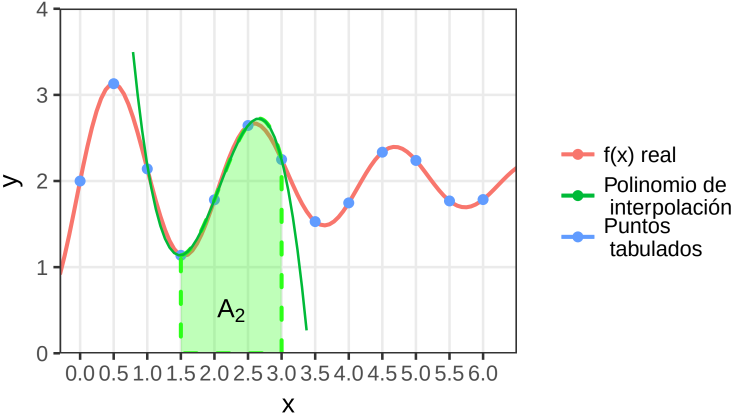
$A_1 = 3{,}5531$



- De manera semejante, se puede emplear la interpolación cúbica de Newton para obtener una aproximación de la integral entre x_3 y x_6:

$$\int_{x_3}^{x_6} f(x)dx \cong A_2 = \frac{3}{8}h(y_3 + 3y_4 + 3y_5 + y_6)$$

$A_1 = 3{,}1219$



Integración numérica: fórmula de Simpson de 3/8

- Y sucesivamente para todos los intervalos:

$$\int_{x_i}^{x_{i+3}} f(x)dx \cong \frac{3}{8}h(y_i + 3y_{i+1} + 3y_{i+2} + y_{i+3}) \quad i = 0, 3, 6, \cdots, n-3$$

- De modo que la suma de estas áreas resulta ser la aproximación para la integral entre x_0 y x_n:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \cong \sum_{\substack{i=0 \\ \text{ó } i \text{ múltiplo de } 3}}^{n-3} \frac{3}{8}h(y_i + 3y_{i+1} + 3y_{i+2} + y_{i+3})$$

$$= \frac{3}{8}h\Big(y_0 + y_n + 2\sum_{\substack{i=3 \\ i \text{ múltiplo de } 3}}^{n-3} y_i + 3\sum_{\substack{i=1 \\ i \text{ no múltiplo de } 3}}^{n-1} y_i\Big)$$

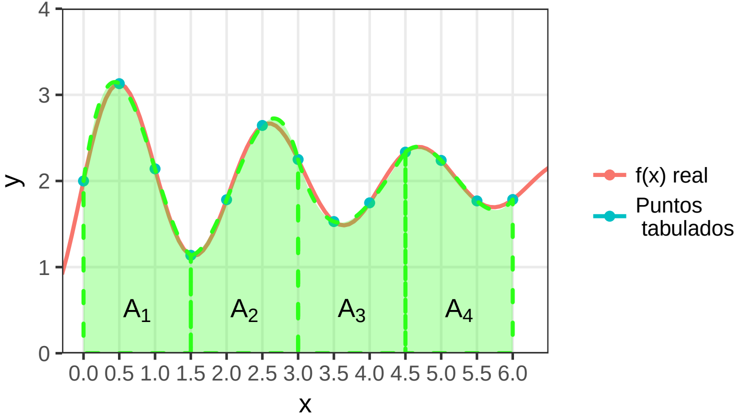
Integración numérica: fórmula de Simpson de 3/8

- La fórmula hallada se conoce como **fórmula de Simpson de 3/8** y se la simboliza con:

$$A_{3/8} = \frac{3}{8} h \left(y_0 + y_n + 2 \sum_{\substack{i=3 \\ i \ múltiplo \ de \ 3}}^{n-3} y_i + 3 \sum_{\substack{i=1 \\ i \ no \ múltiplo \ de \ 3}}^{n-1} y_i \right)$$

- Para poder aplicarla, es necesario que la cantidad de intervalos en la tabla sea múltiplo de 3.

- Gráficamente:



- En el ejemplo: $A_{3/8} = 12{,}4088$.
- El valor exacto es: $\int_0^6 f(x)dx = 12{,}2935$, con lo cual el error relativo de la aproximación con la fórmula trapecial fue: $9{,}4\,\%$.

Derivación numérica

- Para aproximar la derivada de una función en un punto, nuevamente haremos uso del polinomio interpolador de Newton:

$$
\begin{aligned}
f(x) &\cong y_0 + k\Delta y_0 + \frac{k(k-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{k(k-1)(k-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \cdots \\
&= y_0 + k\Delta y_0 + \left(\frac{k^2}{2} - \frac{k}{2}\right)\Delta^2 y_0 + \left(\frac{k^3}{6} - \frac{k^2}{2} + \frac{k}{3}\right)\Delta^3 y_0 + \cdots
\end{aligned}
$$

- Se debe derivar con respecto a x el miembro derecho de la expresión anterior, aplicando la Regla de la Cadena ya que $k = (x - x_0)/h$.
- Por simplicidad, lo mostraremos sólo con el polinomio interpolador cuadrático.

- Aproximación de la derivada con el polinomio interpolador cuadrático de Newton:

$$f(x) \cong y_0 + k\Delta y_0 + \frac{k^2}{2}\Delta^2 y_0 - \frac{k}{2}\Delta^2 y_0$$

$$k = \frac{x - x_0}{h} \implies \frac{\partial k}{\partial x} = \frac{1}{h}$$

$$f'(x) \cong \Delta y_0 \frac{1}{h} + \Delta^2 y_0 \; k \; \frac{1}{h} - \frac{\Delta^2 y_0}{2}\frac{1}{h}$$

$$= \frac{1}{h}\Big[\Delta y_0 + \Big(k - \frac{1}{2}\Big)\Delta^2 y_0\Big]$$

Derivación numérica

Retomando el Ejemplo 1 de la Parte 1 de la Unidad 4: vamos a aproximar el valor de $f'(3{,}4)$.

x_k	y_k	Δy_k	$\Delta^2 y_k$	$\Delta^3 y_k$	$\Delta^4 y_k$	$\Delta^5 y_k$
2	0,3010	0,1761	-0,0511	0,0230	-0,0127	0,0081
3	0,4771	0,1250	-0,0281	0,0103	-0,0046	-
4	0,6021	0,0969	-0,0178	0,0057	-	-
5	0,6990	0,0791	-0,0121	-	-	-
6	0,7781	0,0670	-	-	-	-
7	0,8451	-	-	-	-	-

- $x = 3,4$
- $x_0 = 3$
- $h = 1$
- $k = \frac{x - x_0}{h} = \frac{3{,}4 - 3}{1} = 0{,}4$
- $\Delta y_0 = 0{,}1250$;
  $\Delta^2 y_0 = -0{,}0281$

$$f'(x) \cong \frac{1}{h}\left[\Delta y_0 + \left(k - \frac{1}{2}\right)\Delta^2 y_0\right] = 0{,}1250 + (-0{,}1)(-0{,}0281) = 0{,}12781$$

Nota: esta fórmula se conoce como *aproximación por diferencias hacia adelante*, pero se pueden lograr aproximaciones más precisas de otras formas, por ejemplo, haciendo que el punto de interés x esté en el centro del rango del polinomio interpolador (*aproximación por diferencias centrales*).