Cálculo Numérico: Integrales numéricas

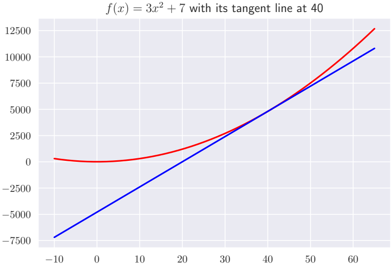
Aplicación de Métodos Numéricos al Ambiente Construido (CV1012)

Xavier Sánchez Díaz

Tecnológico de Monterrey

Outline

- Una derivada f' es una **operación** que toma como operando a una **función** f
- La derivada de una función f en un punto x_i, hace referencia a la recta **tangente** que pasa por x_i
- La derivada es la **pendiente** de la tangente de dicha curva en el punto x_i

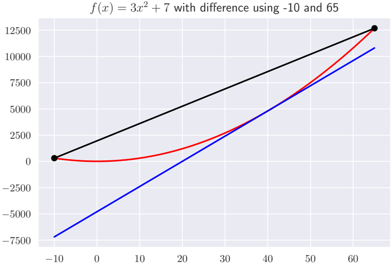


Derivada y Diferenciación

Repaso de Cálculo

Como la **derivada** hace referencia a la **pendiente** de la recta tangente, nos está dando una medida de cambio—cómo cambia la función en ese punto.

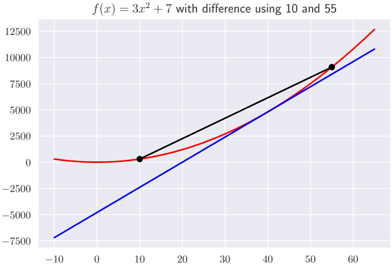
El cambio se puede **aproximar** usando diferencias.



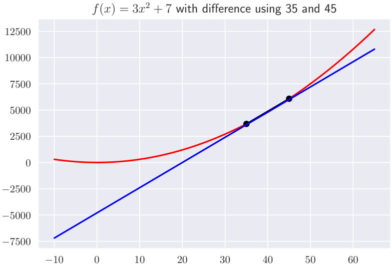
Derivada y Diferenciación

Repaso de Cálculo

A medida que la diferencia se hace más pequeña, la aproximación de la derivada es mejor.

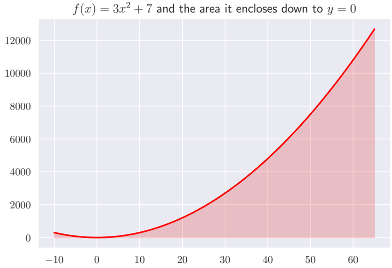


A medida que la diferencia se hace más pequeña, la aproximación de la derivada es mejor.



Integral
Repaso de Cálculo

- Una integral F es una **operación** que toma como operando a una **función** f
- La integral de una función f es también conocida como su **antiderivada**, pues es la operación inversa a la derivada
- La integral de una función f es la suma de todos los cambios que ocurren en una función f

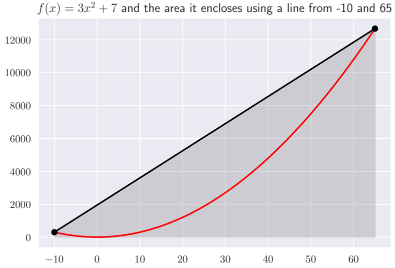


Integral y área bajo la curva

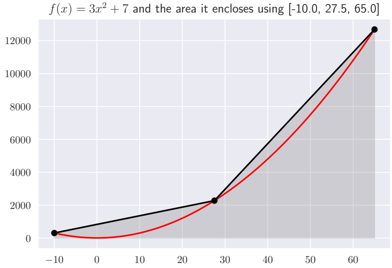
Repaso de Cálculo

Como la **integral** hace referencia a la suma de los cambios en cada uno de los puntos de la función, nos está dando una medida de agrupación—el área bajo la curva.

Esta suma se puede **aproximar** definiendo pequeñas *diferencias* y sumándolas.



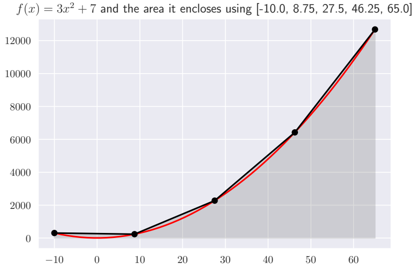
A medida que la diferencia se hace más pequeña, la aproximación del área bajo la curva es mejor.



Integral y área bajo la curva

Repaso de Cálculo

A medida que la diferencia se hace más pequeña, la aproximación del área bajo la curva es mejor.



Las *fórmulas* Newton-Cotes son esquemas de integración numérica ampliamente usados. La idea se basa en reemplazar una función *complicada* o datos tabulados con una función aproximada que sea más fácil de integrar. Por ejemplo:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b f_n(x)\,\mathrm{d}x$$

donde $f_n(x)$ es un **polinomio** de la forma

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

y n es el **orden** (o **grado**) del polinomio.

Regla del Trapecio

Newton-Cotes

La regla del trapecio se refiere a la primera de las reglas de Newton-Cotes en intervalos cerrados (de a a b, por ejemplo), y corresponde al caso donde el polinomio f_n es de primer orden f_1:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b f_1(x)\,\mathrm{d}x$$

que corresponde a la siguiente regla general

Regla del Trapecio

$$I = (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2} \tag{1}$$

Mejorando la aproximación

Newton-Cotes

Para poder mejorar la aproximación usando la **regla del trapecio** podemos aplicarla en repetidas ocasiones: en lugar de usar un segmento, usar múltiples segmentos.

En este caso, tendremos que la integral numérica definida entre dos puntos a y b se puede calcular con la regla general siguiente:

Aplicaciones múltiples de la regla del trapecio

$$I = (b-a)\frac{f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)}{2n} \tag{2}$$

Calculando el error de la regla del trapecio

Newton-Cotes

Para calcular el **error** en la integral obtenida por la regla del trapecio **aplicada una vez**, podemos emplear la ecuación

Error en la regla del trapecio

$$E_t = -\frac{1}{12} f''(\xi)(b-a)^3 \tag{3}$$

donde ξ es un valor dentro del intervalo entre a y b, y f'' es la segunda derivada de x. Después simplemente evaluamos en ξ.

Calculando el error de la regla del trapecio

Newton-Cotes

Si vamos a aplicarla múltiples veces, entonces necesitaremos sumar el error del intervalo en cada aplicación:

Error total en múltiples aplicaciones de la regla del trapecio

$$E_t = -\frac{(b-a)^3}{12n^3} \sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) \tag{4}$$

Se puede simplificar el cálculo si en lugar de sumar cada error, obtenemos el error para un intervalo promedio aunque esto genera pérdida de precisión:

Error aproximado en múltiples aplicaciones de la regla del trapecio

$$E_a = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} \bar{f}'' \tag{5}$$

Segunda derivada aproximada

Newton-Cotes

Para calcular el valor de la segunda derivada promedio cuando en lugar de tener mediciones discretas tenemos una función continua, podemos usar la siguiente aproximación:

Aproximación de la segunda derivada promedio

$$\bar{f}'' = \frac{\displaystyle\int_a^b f''(x)}{b - a} \tag{6}$$

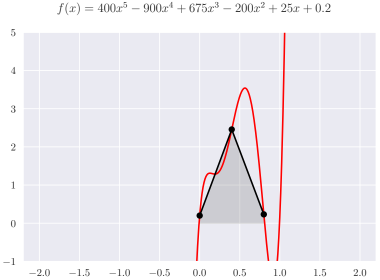
Ejercicio

Aplicación múltiple de la Regla del Trapecio

Utiliza la regla del trapecio usando **dos segmentos** para estimar la integral definida de la función

$$f(x) = 0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5$$

de $a = 0$ a $b = 0.8$

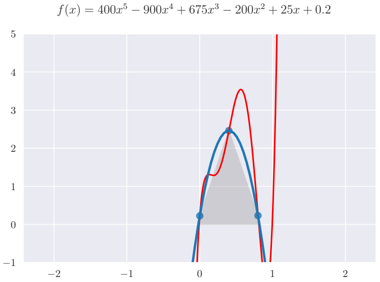


Integrando usando polinomios

Newton-Cotes

Otra opción para poder aproximar una integral es usar **polinomios de mayor orden** para conectar los puntos.

Por ejemplo, para unir 3 puntos, podemos usar una **parábola**



Regla de Simpson 1/3

Newton-Cotes

Específicamente, si usamos un polinomio de grado 2, es decir:

$$\int_{a}^{b} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_{a}^{b} f_2(x)\,\mathrm{d}x$$

entonces estamos aplicando la regla de Simpson 1/3, cuya ecuación general es:

Regla de Simpson 1/3

$$I = (b-a)\frac{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)}{6} \tag{7}$$

Múltiples aplicaciones de la regla de Simpson 1/3

Al igual que con la regla del trapecio, podemos aplicar varias veces la **regla de Simpson 1/3** para generar múltiples parábolas.

En este caso, la integral numérica definida entre los puntos a y b puede aproximarse como sigue:

Aplicaciones múltiples de la Regla de Simpson 1/3

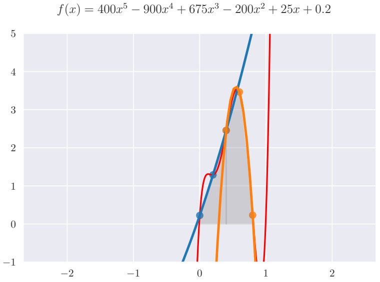
$$I = (b-a)\frac{f(x_0) + 4\sum_{i=1,3,5,\ldots}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{j=2,4,6,\ldots}^{n-2} f(x_j) + f(x_n)}{3n} \tag{8}$$

Múltiples aplicaciones de la regla de Simpson 1/3

Newton-Cotes

$$I = (b-a)\frac{f(x_0)+4\sum_{i=1,3,5}^{n-1} f(x_i)+2\sum_{j=2,4,6}^{n-2} f(x_j)+f(x_n)}{3n}$$

Viendo de cerca la fórmula, podemos inferir que esta regla se puede usar sólo cuando tenemos un número par de segmentos:



Calculando el error para la Regla de Simpson 1/3

El error lo podemos calcular con las siguientes ecuaciones:

Error total en aplicación singular de Regla de Simpson 1/3

$$E_t = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi) \tag{9}$$

donde ξ es un valor dentro del intervalo entre a y b, y $f^{(4)}$ es la cuarta derivada de $f(x)$. Después simplemente evaluamos en ξ.

Error aproximado en aplicación múltiple de Regla de Simpson 1/3

$$E_a = -\frac{(b-a)^5}{180n^4} \bar{f}^{(4)} \tag{10}$$

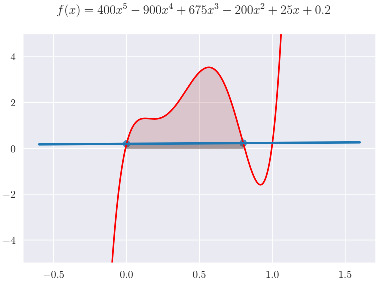
donde $\bar{f}^{(4)}$ es la cuarta derivada promedio del intervalo $[a, b]$.

Segmentos promedio

Cuadratura de Gauss

Tanto la **regla del trapecio** como la **regla de Simpson 1/3** utilizan tamaños *fijos* de cajas, porque asumimos que todas tienen un promedio de altura.

Esto genera segmentos de tamaños iguales. Por ejemplo, usando una sola aplicación de la regla del trapecio para aproximar una integral, tenemos algo así. . .

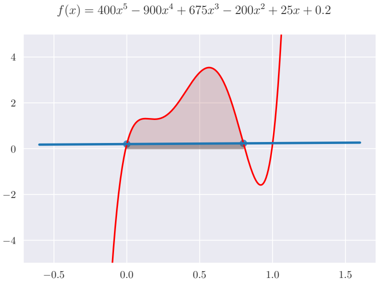


Segmentos promedio

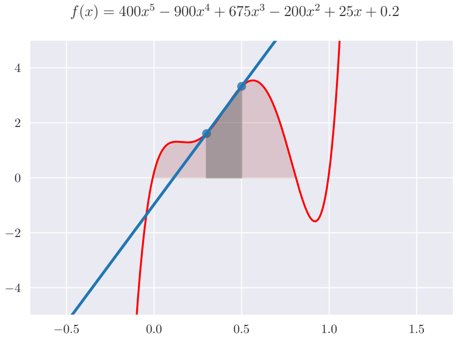
Cuadratura de Gauss

Tanto la **regla del trapecio** como la **regla de Simpson 1/3** utilizan tamaños *fijos* de cajas, porque asumimos que todas tienen un promedio de altura.

Esto genera segmentos de tamaños iguales. Por ejemplo, usando una sola aplicación de la regla del trapecio para aproximar una integral, tenemos algo así. . .



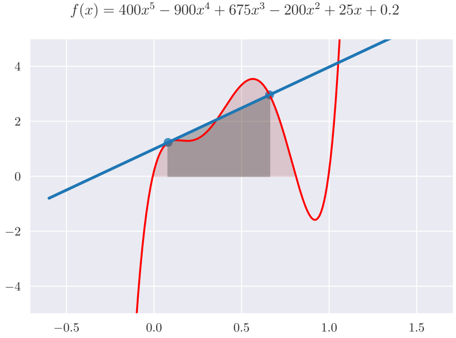
O bien, si partimos en un segmento de menor tamaño...



Segmentos de distinto tamaño

Cuadratura de Gauss

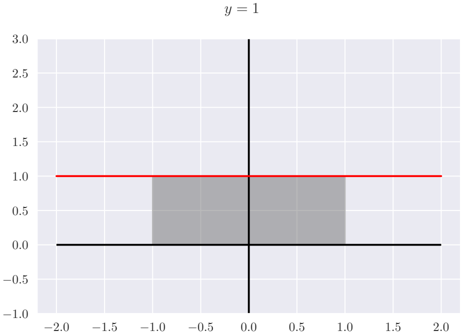
Por lo que escoger dónde poner los puntos es **sumamente importante**…



…lo que nos generará **segmentos de distintos tamaños**.

Casos de éxito de la regla del Trapecio

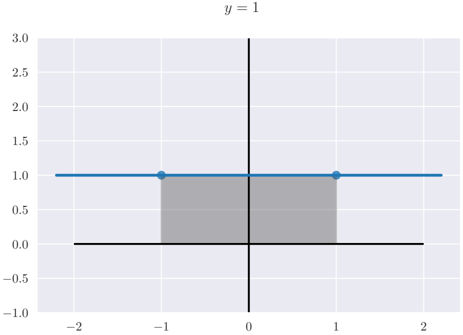
Sin embargo, es importante recalcar que existen algunos casos donde la **regla del trapecio** es exacta.
Por ejemplo, en una línea constante...



Casos de éxito de la regla del Trapecio

Cuadratura de Gauss

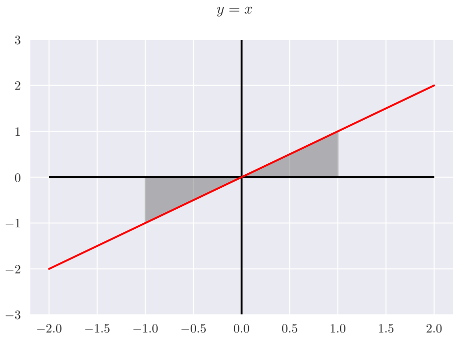
Incluso si usamos una sola aplicación de la **regla del trapecio**...



Casos de éxito de la regla del Trapecio

Cuadratura de Gauss

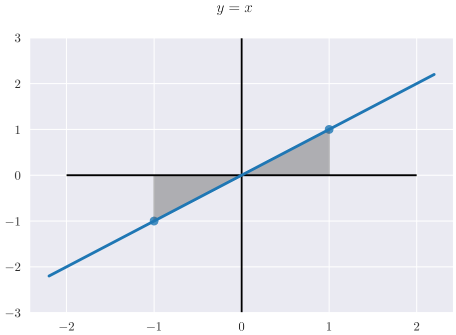
Otro caso donde la regla de trapecio no falla es en una línea **recta con pendiente 1**...



Casos de éxito de la regla del Trapecio

Cuadratura de Gauss

Incluso usando una sola aplicación:



Tomando en cuenta estos casos, se encontraron las mejores posiciones para aproximar **polinomios de *ciertos* grados**, así:

$$I \approx c_0 f(x_0) + c_1 f(x_1) + \ldots c_n f(x_n)$$

donde c_i son *ciertos* coeficientes desconocidos de los puntos x_i ...

Y se encontró que específicamente que con

- $c_0 = c_1 = 1$
- $x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \approx -0.5773503$
- $x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0.5773503$

podemos obtener la fórmula de Gauss-Legendre de dos puntos:

Gauss-Legendre de 2 puntos

$$I \approx f\left(\frac{-1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \tag{11}$$

que solo funciona si el límite de la integral es $[-1, 1]$.

Convirtiendo de un límite a otro

Cuadratura de Gauss

¿Entonces de qué nos sirve si no siempre voy a querer integrar en el intervalo $[-1, 1]$?

Podemos pensar que nuestro límite de integración dado por $b - a$ es una transformación lineal de ese intervalo mágico. Por ello, podemos **transformarlo** usando la siguiente ecuación:

Cambio de variable

$$x = \frac{(b + a) + (b - a)x_d}{2} \tag{12}$$

Y si la derivamos, obtenemos el diferencial...

Diferencial del cambio de variable

$$\mathrm{d}x = \frac{b - a}{2} \, \mathrm{d}x_d \tag{13}$$

Convirtiendo de un límite a otro

Cuadratura de Gauss

¿Entonces de qué nos sirve si no siempre voy a querer integrar en el intervalo $[-1, 1]$?

Podemos pensar que nuestro límite de integración dado por $b - a$ es una transformación lineal de ese intervalo mágico. Por ello, podemos **transformarlo** usando la siguiente ecuación:

Cambio de variable

$$x = \frac{(b + a) + (b - a)x_d}{2} \tag{12}$$

Y si la derivamos, obtenemos el diferencial...

Diferencial del cambio de variable

$$\mathrm{d}x = \frac{b - a}{2}\,\mathrm{d}x_d \tag{13}$$

Convirtiendo de un límite a otro

Cuadratura de Gauss

¿Entonces de qué nos sirve si no siempre voy a querer integrar en el intervalo $[-1, 1]$?

Podemos pensar que nuestro límite de integración dado por $b - a$ es una transformación lineal de ese intervalo mágico. Por ello, podemos **transformarlo** usando la siguiente ecuación:

Cambio de variable

$$x = \frac{(b+a) + (b-a)x_d}{2} \tag{12}$$

Y si la derivamos, obtenemos el diferencial...

Diferencial del cambio de variable

$$\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\,\mathrm{d}x_d \tag{13}$$

Ejemplo: Gauss-Legendre de dos puntos

Cuadratura de Gauss

Al igual que en el ejercicio pasado, vamos a integrar la función:

$$f(x) = 0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5$$

de $a = 0$ a $b = 0.8$

STOP!

Vamos paso por paso.

Al igual que en el ejercicio pasado, vamos a integrar la función:

$$f(x) = 0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5$$

de $a = 0$ a $b = 0.8$

STOP!

Vamos paso por paso.

Ejemplo: Gauss-Legendre de dos puntos

Cuadratura de Gauss

Habremos de reemplazar la x en la función, por nuestra *nueva* x. Entonces, primero hay que conseguir la *nueva* x usando la ecuación 12:

$$\begin{aligned} x_{new} &= \frac{(b+a)+(b-a)x_d}{2} \\ &= \frac{(0.8+0)+(0.8-0)x_d}{2} \\ &= 0.4+0.4x_d \quad \diamond \end{aligned}$$

Ahora simplemente reemplazamos a, b en la ecuación 13 (o bien, derivamos):

$$\begin{aligned} \mathrm{d}x_{new} &= \frac{b-a}{2}\,\mathrm{d}x_d \\ &= \frac{0.8-0}{2} \\ &= 0.4\,\mathrm{d}x_d \quad \diamond \end{aligned}$$

Ejemplo: Gauss-Legendre de dos puntos

Cuadratura de Gauss

Habremos de reemplazar la x en la función, por nuestra *nueva* x. Entonces, primero hay que conseguir la *nueva* x usando la ecuación 12:

$$\begin{aligned} x_{new} &= \frac{(b+a)+(b-a)x_d}{2} \\ &= \frac{(0.8+0)+(0.8-0)x_d}{2} \\ &= 0.4+0.4x_d \quad \diamond \end{aligned}$$

Ahora simplemente reemplazamos a, b en la ecuación 13 (o bien, derivamos):

$$\begin{aligned} \mathrm{d}x_{new} &= \frac{b-a}{2}\,\mathrm{d}x_d \\ &= \frac{0.8-0}{2} \\ &= 0.4\,\mathrm{d}x_d \quad \diamond \end{aligned}$$

Ahora reemplazamos nuestras nuevas x_{new} y $\mathrm{d}x_{new}$ en la integral que queremos obtener:

$$
\begin{aligned}
&\int_0^{0.8} \left(0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5\right) \\
&= \int_{-1}^{1} \big[0.2 + 25(0.4 + 0.4x_d) - 200(0.4 + 0.4x_d)^2 + 675(0.4 + 0.4x_d)^3 \\
&\qquad - 900(0.4 + 0.4x_d)^4 + 400(0.4 + 0.4x_d)^5\big] 0.4 \, \mathrm{d}x_d
\end{aligned}
$$

Y ahora, evaluamos en $-1/\sqrt{3} = 0.516741$, y en $1/\sqrt{3} = 1.305837$ usando la ecuación 11:

$$I \approx 0.516741 + 1.305837 = 1.822578 \quad \blacksquare$$

Ahora reemplazamos nuestras nuevas x_{new} y $\mathrm{d}x_{new}$ en la integral que queremos obtener:

$$\int_0^{0.8} \left(0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5\right)$$
$$= \int_{-1}^{1} \Big[0.2 + 25(0.4 + 0.4x_d) - 200(0.4 + 0.4x_d)^2 + 675(0.4 + 0.4x_d)^3$$
$$- 900(0.4 + 0.4x_d)^4 + 400(0.4 + 0.4x_d)^5\Big] 0.4 \, \mathrm{d}x_d$$

Y ahora, evaluamos en $-1/\sqrt{3} = 0.516741$, y en $1/\sqrt{3} = 1.305837$ usando la ecuación 11:

$$I \approx 0.516741 + 1.305837 = 1.822578 \quad \blacksquare$$

Resumen de ecuaciones I

Para no enloquecer

Voy a integrar una función, así que tengo tres opciones: Trapecio, Simpson 1/3 o Gauss-Legendre.

Si escogí Trapecio. . .

Si con una aplicación se arma:

- Calculo con **Eq. 1**
- Saco el error con **Eq. 3**

Si tengo que aplicarla varias veces, entonces:

- Calculo con **Eq. 2**
- Saco el error total con **Eq. 4** o bien con **Eq. 5** $\star$

Resumen de ecuaciones II

Para no enloquecer

Si escogí Simpson 1/3...

Si con una aplicación se arma:

- Calculo con **Eq. 7**
- Saco el error con **Eq. 9**

Si tengo que aplicarla varias veces, entonces:

- Calculo con **Eq. 8**
- Saco el error aproximado con **Eq. 10** $\star$

$\star$: En estos casos, podemos obtener la i-ésima derivada promedio usando la **Eq. 6** con la i necesaria: $i = 2$ si es segunda derivada, $i = 4$ si es cuarta derivada...

Resumen de ecuaciones III

Para no enloquecer

Si escogí Gauss-Legendre...

- Convierto al intervalo $[-1, 1]$ usando las **Eqs. 12 y 13**
- Reviso la tabla de coeficientes y argumentos[a] y evalúo dependiendo mis necesidades para calcular la integral.
- Calculo el error usando los datos de la tabla.

[a] https://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_quadrature