Integración Numérica

Métodos Numéricos

Prof. Juan Alfredo Gómez

Conferencia 21

Conferencia 21

Aspectos preliminares

Problema de Integración numérica

Encontrar una aproximación con error estimable de:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\max \Delta x_i \longrightarrow 0} \sum f(z_i)\Delta x_i$$

Teorema del valor medio (ponderado) de la integral

Supongamos que: $f \in C[a,b]$, $g(x)$ no cambia de signo en $[a,b]$ y la integral de $g(x)$ en $[a,b]$ existe, entonces hay un $\xi \in (a,b)$ tal que:

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi)\int_a^b g(x)dx$$

Metodología

Cuadratura

El método básico para aproximar $\int_a^b f(x)dx$ es usar una suma (cuadratura numérica) del tipo:

$$\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$$

Usando el polinomio de Lagrange

Dados $f \in C^{n+1}[a,b]$, $\{x_0, \dots, x_n\} \subset (a,b)$ se cumple para todo $x \in (a,b)$, que existe $\xi(x) \in [a,b]$:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)L_k(x) + \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x))$$

por lo tanto:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \int_a^b L_k(x)dx + \int_a^b \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x))dx$$

Deducción general

Cuadratura basada en los polinomios de Lagrange

De la expresión

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\int_a^b L_k(x)dx + \int_a^b \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x))dx$$

se obtiene la cuadratura

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} a_k f(x_k), \quad a_k = \int_a^b L_k(x)dx$$

con error

$$E(f) = \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b \prod_{i=0}^{n}(x-x_i) f^{(n+1)}(\xi(x))dx$$

Cuadratura basada dos puntos

Si $x_0 = a$, $x_1 = b$ y $h = b - a$, entonces

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = f(x_0)\int_{x_0}^{x_1} \frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)}dx + f(x_1)\int_{x_0}^{x_1} \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)}dx + \frac{1}{2}\int_{x_0}^{x_1} f''(\xi(x))(x - x_0)(x - x_1)dx$$

Por el Teorema de Valor medio ponderado

$$\int_{x_0}^{x_1} f''(\xi(x))(x - x_0)(x - (x_0 + h))dx = f''(\xi)\int_{x_0}^{x_1} [(x - x_0)^2 - (x - x_0)h]dx = -\frac{h^3}{6}f''(\xi)$$

luego

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = f(x_0)\left[\frac{(x - x_1)^2}{-2h}\right]_{x_0}^{x_1} + f(x_1)\left[\frac{(x - x_0)^2}{2h}\right]_{x_0}^{x_1} - \frac{h^3}{12}f''(\xi)$$

Regla del Trapecio ($x_0 = a$, $x_1 = b$, $h = b - a$)

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}[f(x_1) + f(x_0)] - \frac{h^3}{12}f''(\xi)$$

Regla de Simpson

Tres puntos equidistantes ($x_0 = a,\ x_1 = a + h,\ x_2 = b = a + 2h$)

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$$

Ejemplos

Trapecio y Simpson:

$$\int_0^2 f(x)dx \approx f(0) + f(2); \qquad \int_0^2 f(x)dx \approx \frac{1}{3}[f(0) + 4f(1) + f(2)]$$

$f(x)$	x^2	x^4	$\frac{1}{1+x}$	$\sqrt{1+x^2}$	$\sin x$	e^x
Valor exacto	2.667	6.400	1.099	2.958	1.416	6.389
Trapecio	4.000	16.000	1.333	3.326	0.909	8.389
Simpson	2.667	6.667	1.111	2.964	1.425	6.421

Definición de la Fórmula de Newton-Cotes

Definición

La fórmula de Newton-Cotes cerrada para los $(n+1)$ puntos $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, \ldots, n$, con $a = x_0$ y $b = x_n$ es la siguiente:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$$

donde

$$a_i = \int_{x_0}^{x_n} L_i(x)dx = \int_{x_0}^{x_n} \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} dx$$

Error de la Fórmula de Newton-Cotes

Teorema

Sea $\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$ la fórmula de Newton-Cotes para los $(n+1)$ puntos $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, \ldots, n$, con $a = x_0$ y $b = x_n$. Entonces existe $\xi \in (a, b)$ tal que:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) + \frac{h^{n+3} f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_0^n t^2(t-1)\cdots(t-n)dt$$

si n es par y $f \in C^{n+2}[a, b]$; y

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) + \frac{h^{n+2} f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt$$

si n es impar y $f \in C^{n+1}[a, b]$

$n = 1$ (Regla del Trapecio)

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}[f(x_1) + f(x_0)] - \frac{h^3}{12} f''(\xi)$$

$n = 2$ (Regla de Simpson)

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$$

$n = 3$

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{8}[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] - \frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi)$$

$n = 4$

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = \frac{2h}{45}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)] - \frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi)$$

Ejemplo

Ejercicio

Utilizando las fórmulas de Newton-Cotes calcule una aproximación de

$$\int_0^{\frac{\pi}{4}} \sin x dx = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \approx 0.29289322$$

Resultado

n	1	2	3	4
Newton-Cotes	0.27768018	0.29293264	0.29291070	0.29289318
Error	0.01521303	0.00003942	0.00001748	0.00000004

Motivación

Considere el problema $\in_0^4 e^x dx$. Usando la regla de Simpson con $h = 2$

$$\int_0^4 e^x dx \approx \frac{2}{3}(e^0 + 4e^2 + e^4) = 56.76958$$

Dado que la respuesta exacta es $e^4 - e^0 = 53.59815$, el error absoluto es 3.17143.

Dividamos $[0, 4]$ en $[0, 2]$ y en $[2, 4]$ y aplicamos la regla de Simpson 2 veces con $h = 1$

$$\begin{aligned}
\int_0^4 e^x dx &= \int_0^2 e^x dx + \int_2^4 e^x dx \\
&\approx \tfrac{1}{3}(e^0 + 4e + e^2) + \tfrac{1}{3}(e^2 + 4e^3 + e^4) \\
&= \tfrac{1}{3}(e^0 + 4e + 2e^2 + 4e^3 + e^4) \\
&= 53.86385
\end{aligned}$$

Con error absoluto de 0.26570

Regla del trapecio

Definición

Si en el intervalo de integración $[a, \ b]$ se hace una partición en n subintervalos como la siguiente:

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

en donde los puntos se encuentran equiespaciados de acuerdo con las expresiones:

$$\begin{aligned} x_i &= a + ih \quad (0 \leq i \leq n) \\ h &= (b-a)/n \end{aligned}$$

entonces se puede aplicar la regla del trapecio a cada uno de los subintervalos. Es así como se obtiene la

Regla del trapecio compuesta

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)\right] - \frac{(b-a)}{12}h^2 f^{(2)}(\xi)$$

Regla de Simpson compuesta

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-2}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + f(b)\right] - \frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi)$$

Ejemplo

Con la regla de Simpson compuesta, considere el problema de aproximar $\int_0^{\pi} \sin x dx$ con un error absoluto menor que 0.00002

Desarrollo

$$\int_0^{\pi} \sin x dx = \frac{h}{3}\left[2\sum_{i=1}^{n/2} \sin(x_{2i-2}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} \sin(x_{2i-1})\right] - \frac{\pi h^4}{180}\sin(\xi)$$

Dado que el error absoluto debe ser menor que 0.00002, la desigualdad

$$\left|\frac{\pi h^4}{180}\sin\xi\right| \leq \frac{\pi h^4}{180} = \frac{\pi^5}{180 n^4} < 0.00002$$

sirve para determinar n y h. Al hacer los cálculos tenemos que $n \geq 18$. Si $n = 20$ entonces $h = \pi/20$ y obtenemos

continuación...

$$\int_0^{\pi} \sin x dx = \frac{h}{3}\left[2\sum_{i=1}^{n/2} \sin\left(\frac{(i-1)\pi}{10}\right) + 4\sum_{i=1}^{n/2} \sin\left(\frac{(2i-1)\pi}{20}\right)\right] = 2.000006$$

Para asegurar el mismo grado de exactitud con la regla del trapecio, se requiere que

$$\left|\frac{\pi h^2}{12}\sin\xi\right| \leq \frac{\pi h^2}{12} = \frac{\pi^3}{12n^2} < 0.00002$$

que equivale a pedir que $n \geq 360$. Esto implica realizar un número de cálculos mucho mayor que los requeridos al aplicar la regla de compuesta de Simpson

Formulación

En la integración de Romberg se usa la regla compuesta del trapecio para obtener aproximaciones preliminares, y luego el proceso de extrapolación de Richardson para mejorar las aproximaciones. Primero Introduzcamos la siguiente notación:

$$
\begin{aligned}
R_{1,1} &= \tfrac{h_1}{2}[f(a)+f(b)] = \tfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\
R_{2,1} &= \tfrac{h_2}{2}[f(a)+f(b)+2f(a+h_2)] = \tfrac{1}{2}[R_{1,1}+h_1 f(a+h_2)] \\
R_{3,1} &= \tfrac{1}{2}\{R_{2,1}+h_2[f(a+h_3)+f(a+3h_3)]\} \\
\vdots\quad & \qquad \vdots \\
R_{k,1} &= \frac{1}{2}\left[R_{k-1,1}+h_{k-1}\sum_{i=1}^{2^{k-2}} f(a+(2i-1)h_k)\right]
\end{aligned}
$$

Extrapolación de Richardson

Se puede demostrar que si $f \in \mathcal{C}^{\infty}[a, b]$, entonces se puede escribir la regla del trapecio compuesto como

$$\int_a^b f(x)dx - R_{k,1} = \sum_{i=1}^{\infty} K_i h_k^{2i} = K_1 h_k^2 + \sum_{i=2}^{\infty} K_i h_k^{2i}$$

Podemos suprimir el término que contiene h_k^2 combinando esta ecuación reemplazada por $h_{k+1} = h_k/2$

$$\int_a^b f(x)dx - R_{k+1,1} = \sum_{i=1}^{\infty} K_i h_{k+1}^{2i} = \frac{K_1 h_k^2}{4} + \sum_{i=2}^{\infty} \frac{K_i h_k^{2i}}{4^i}$$

Al restar la primera ecuación a cuatro veces la segunda ecuación y simplificar se tiene

$$\int_a^b f(x)dx - \left[R_{k+1,1} + \frac{R_{k+1,1} - R_{k,1}}{3}\right] = \sum_{i=2}^{\infty} \frac{K_i}{3} \left(\frac{1 - 4^{i-1}}{4^{i-1}}\right) h_k^{2i}$$

Extrapolación de Richardson

Para simplificar la notación definimos

$$R_{k,2} = R_{k,1} + \frac{R_{k,1} - R_{k-1,1}}{3}$$

para cada $k = 2, 3, \ldots, n$ y podemos aplicar nuevamente la extrapolación a estos valores

$$R_{k,j} = R_{k,j-1} + \frac{R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}, \qquad j = 2, ..., k$$

Estos resultados generan la siguiente tabla

$$\begin{array}{cccccc}
\hline
R_{1,1} & & & & & \\
R_{2,1} & R_{2,2} & & & & \\
R_{3,1} & R_{3,2} & R_{3,3} & & & \\
R_{4,1} & R_{4,2} & R_{4,3} & R_{4,4} & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\
R_{k,1} & R_{k,2} & R_{4,3} & R_{k,4} & \cdots & R_{k,k} \\
\hline
\end{array}$$

El método de Romberg tiene la característica adicional de que permite calcular íntegramente una nueva fila de la tabla con sólo hacer una aplicación de la regla compuesta del trapecio.

Ejemplo $\int_0^{\pi} \sin x dx$

$$
\begin{aligned}
R_{1,1} &= \tfrac{\pi}{2}(\sin 0 + \sin \pi) = 0 \\
R_{2,1} &= \tfrac{1}{2}\left[R_{1,1} + \pi \sin \tfrac{\pi}{2}\right] = 1.57079633 \\
R_{3,1} &= \tfrac{1}{2}\left[R_{2,1} + \tfrac{\pi}{2}\left(\sin \tfrac{\pi}{4} + \sin \tfrac{3\pi}{4}\right)\right] = 1.89611890 \\
R_{4,1} &= \tfrac{1}{2}\left[R_{3,1} + \tfrac{\pi}{4}\left(\sin \tfrac{\pi}{8} + \sin \tfrac{3\pi}{8} + \sin \tfrac{5\pi}{8} + \sin \tfrac{7\pi}{8}\right)\right] = 1.97423160 \\
R_{5,1} &= 1.99357034 \\
R_{6,1} &= 1.99839336
\end{aligned}
$$

Usando la extrapolación

0					
1.57079633	2.09439511				
1.89611890	2.00455976	1.99857073			
1.97423160	2.00026917	1.99998313	2.00000555		
1.99357034	2.00001659	1.99999975	2.00000001	1.99999999	
1.99839336	2.00000103	2.00000000	2.00000000	2.00000000	2