

Integración Numérica con el Método quad y Cambios de Variable en Integrales Impropias

1 Introducción

La integración numérica de funciones en intervalos infinitos o con comportamientos singulares requiere técnicas especiales. Una de las herramientas más utilizadas en Python es la función `quad` de SciPy, basada en los algoritmos de QUADPACK, una biblioteca de

2 Funcionamiento del Método quad

2.1 Introducción

La cuadratura de Gauss-Kronrod es una extensión de la cuadratura de Gauss que permite estimar simultáneamente la integral de una función y el error de la aproximación. Se basa en agregar nodos adicionales a los nodos de Gauss para obtener una evaluación más precisa de la integral.

2.2 Cómo funciona

Partimos de una cuadratura de Gauss con n nodos, que es exacta para polinomios de grado hasta $2n - 1$. La extensión de Kronrod introduce $2n + 1$ nodos en total, incluyendo los n nodos originales de Gauss, y es exacta para polinomios de grado hasta $3n + 1$ aproximadamente.

El método Gauss-Kronrod utiliza los mismos nodos de Gauss más nodos adicionales intercalados. Esto permite calcular dos aproximaciones de la integral:

- Una aproximación de orden más bajo (Gauss).
- Una aproximación de orden más alto (Kronrod).

Comparando estas dos aproximaciones, se estima el error local de la integral sobre un subintervalo dado. Si el error es mayor que una tolerancia dada, se subdivide el intervalo y se repite el procedimiento.

2.3 ¿Por qué funciona?

La clave está en que la cuadratura de Gauss proporciona una estimación muy eficiente para funciones suaves, y la extensión de Kronrod mejora dicha estimación sin requerir evaluaciones adicionales de la función en los nodos ya existentes.

Además, al calcular dos integrales de diferente orden de exactitud, podemos estimar el error de la integral de manera efectiva sin necesitar información adicional sobre la derivada de la función.

2.4 Pseudocódigo y código en Python

El Pseudocódigo del algoritmo de integración adaptativa Gauss-Kronrod es el siguiente:

Algorithm 1 Integración adaptativa Gauss-Kronrod

```
1: Entrada: Función  $f$ , intervalo  $[a, b]$ , tolerancias  $\varepsilon_{\text{abs}}, \varepsilon_{\text{rel}}$ 
2: Inicializar pila de intervalos con  $[a, b]$ 
3: Inicializar total  $\leftarrow 0$ 
4: while pila no vacía do
5:   Extraer intervalo  $[a_1, b_1]$ 
6:   Calcular  $I_G$  (integral Gauss) y  $I_K$  (integral Kronrod) en  $[a_1, b_1]$ 
7:   Calcular error estimado  $e = |I_G - I_K|$ 
8:   Calcular tolerancia local  $\tau = \max(\varepsilon_{\text{abs}}, \varepsilon_{\text{rel}} \times |I_K|)$ 
9:   if  $e < \tau$  then
10:    total  $\leftarrow$  total +  $I_K$ 
11:   else
12:     Subdividir intervalo en dos partes
13:     Agregar ambos subintervalos a la pila
14:   end if
15: end while
16: Salida: total
```

Su implementación en python puede encontrarse en el archivo adjunto y en la siguiente sección.

2.5 Implementación en Python

```
import numpy as np #Aunque no es necesario, se recomienda importar numpy
                    para el manejo de arrays y funciones matematicas.
import warnings # Para manejar advertencias de convergencia

# Valores para cuadratura de Gauss-Kronrod 10-21 puntos (G10-K21)
oficiales
xgauss = np.array([
    -9.739065285171717200779640120844521e-01,
    -8.650633666889845107320966884234930e-01,
    -6.794095682990244062343273651148736e-01,
    -4.333953941292471907992659431657842e-01,
    -1.488743389816312108848260011297200e-01,
    1.488743389816312108848260011297200e-01,
    4.333953941292471907992659431657842e-01,
    6.794095682990244062343273651148736e-01,
    8.650633666889845107320966884234930e-01,
    9.739065285171717200779640120844521e-01
])

wgauss = np.array([
    6.667134430868813759356880989333179e-02,
    1.494513491505805931457763396576973e-01,
    2.190863625159820439955349342281632e-01,
    2.692667193099963550912269215694694e-01,
    2.955242247147528701738929946513383e-01,
    2.955242247147528701738929946513383e-01,
    2.692667193099963550912269215694694e-01,
    2.190863625159820439955349342281632e-01,
    1.494513491505805931457763396576973e-01,
    6.667134430868813759356880989333179e-02
])

xkronrod = np.array([
    -9.956571630258080807355272806890028e-01,
    -9.739065285171717200779640120844521e-01,
    -9.301574913557082260012071800595083e-01,
```

```

-8.650633666889845107320966884234930e-01,
-7.808177265864168970637175783450424e-01,
-6.794095682990244062343273651148736e-01,
-5.627571346686046833390000992726941e-01,
-4.333953941292471907992659431657842e-01,
-2.943928627014601981311266031038656e-01,
-1.488743389816312108848260011297200e-01,
0.0000000000000000000000000000000000e+00,
1.488743389816312108848260011297200e-01,
2.943928627014601981311266031038656e-01,
4.333953941292471907992659431657842e-01,
5.627571346686046833390000992726941e-01,
6.794095682990244062343273651148736e-01,
7.808177265864168970637175783450424e-01,
8.650633666889845107320966884234930e-01,
9.301574913557082260012071800595083e-01,
9.739065285171717200779640120844521e-01,
9.956571630258080807355272806890028e-01
])

wkronrod = np.array([
    1.169463886737187427806439606219205e-02,
    3.255816230796472747881897245938976e-02,
    5.475589657435199603138130024458018e-02,
    7.503967481091995276704314091619001e-02,
    9.312545458369760553506546508336634e-02,
    1.093871588022976418992105903258050e-01,
    1.234919762620658510779581098310742e-01,
    1.347092173114733259280540017717068e-01,
    1.427759385770600807970942731387171e-01,
    1.477391049013384913748415159720680e-01,
    1.494455540029169056649364683898212e-01,
    1.477391049013384913748415159720680e-01,
    1.427759385770600807970942731387171e-01,
    1.347092173114733259280540017717068e-01,
    1.234919762620658510779581098310742e-01,
    1.093871588022976418992105903258050e-01,
    9.312545458369760553506546508336634e-02,
    7.503967481091995276704314091619001e-02,
    5.475589657435199603138130024458018e-02,
    3.255816230796472747881897245938976e-02,
    1.169463886737187427806439606219205e-02
])

def gauss_kronrod(f, a, b):
    mid = 0.5 * (a + b)
    half_length = 0.5 * (b - a)

    nodes = mid + half_length * xkronrod
    f_nodes = f(nodes)
    integral = half_length * np.sum(wkronrod * f_nodes)

    nodes_gauss = mid + half_length * xgauss
    f_nodes_gauss = f(nodes_gauss)
    integral_gauss = half_length * np.sum(wgauss * f_nodes_gauss)

    error_estimate = np.abs(integral - integral_gauss)

    return integral, error_estimate

```

```

def adaptive_integrate(f, a, b, epsabs=1e-15, epsrel=1e-15, limit=10000,
record_intervals=True):
    if np.isinf(a) or np.isinf(b):
        if np.isinf(a) and not np.isinf(b): #Manejo de limites infinitos
            mediante el cambio de variable
            g = lambda t: f(t/(1-t)) * (1 / (1-t)**2)
            return adaptive_integrate(g, 0.0, 1, epsabs, epsrel, limit)
        elif not np.isinf(a) and np.isinf(b):
            g = lambda t: f(t/(1-t)) * (1 / (1-t)**2)
            return adaptive_integrate(g, 0.0, 1, epsabs, epsrel, limit)
        else:
            raise ValueError("Cannot integrate from -inf to +inf with
this mapping.")

    stack = [(a, b)]
    total = 0.0
    iterations = 0

    intervals = [(a, b)] # Para almacenar los intervalos evaluados
    while stack:
        iterations += 1
        if iterations > limit:
            warnings.warn("Too many iterations, adding last evaluated
interval.")
            a1, b1 = stack.pop()
            integral, _ = gauss_kronrod(f, a1, b1)
            total += integral
            break

        a1, b1 = stack.pop()
        if a1 == b1:
            continue

        integral, error = gauss_kronrod(f, a1, b1)
        tolerance = max(epsabs, epsrel * np.abs(integral))

        if np.isnan(error) or np.isnan(integral):
            continue

        if error < tolerance:
            total += integral
        else:
            mid = 0.5 * (a1 + b1)
            stack.append((mid, b1))
            stack.append((a1, mid))
            if record_intervals:
                intervals.append((a1, mid))
                intervals.append((mid, b1))

    if record_intervals:
        print("Intervalos evaluados:", intervals)
        print("Numero de intervalos:", len(intervals))
        print("Numero de iteraciones:", iterations)
        return total, intervals
    else:
        return total

```

Listing 1: Implementación de la integración adaptativa con cuadratura Gauss-Kronrod

3 Cambio de Variable para Intervalos Infinitos

Uno de los problemas más comunes en la integración numérica es el tratamiento de las integrales impropias. Una de las técnicas más utilizadas es tener en cuenta la biyección de la semirrecta $[0, \infty)$ con el intervalo $[0, 1]$. Esto permite transformar la integral impropia en una integral definida en un intervalo finito. Dicha biyección viene dada por:

$$x = \frac{t}{1-t}, \quad t \in (0, 1). \quad (1)$$

Como vemos, x toma todos los valores de $[0, \infty)$ cuando t varía de 0 a 1. La diferencial asociada a este cambio de variable es,

$$dx = \frac{1}{(1-t)^2} dt.$$

De modo que:

$$\int_0^\infty f(x) dx = \int_0^1 f\left(\frac{t}{1-t}\right) \frac{dt}{(1-t)^2}.$$

Como se ha comentado en reuniones anteriores, el cambio de variable propuesto aquí no es el único (aunque sí parece el más extendido en las diferentes bibliotecas que se han comentado), aunque en general parecen mejorar la precisión de la integración. También existe la posibilidad de programar este método a mano, aumentando el número de puntos y nodos de la integración. Sin embargo, esto puede ser más costoso computacionalmente y no siempre es necesario. En este caso, se ha optado por utilizar la función `quad` de SciPy, que ya implementa este cambio de variable de manera interna.

4 Resultados Numéricos

En el estudio práctico se analizaron funciones de dos tipos. Las primeras de tipo exponencial*potencia son funciones "similares" a las que encontramos en la construcción de las densidades atómicas. Estudiaremos el caso,

$$f(x) = Nx^a e^{-bx}, \quad x \in [0, \infty), \quad a > -1, \quad b > 0 \quad a, b \in \mathbb{R}, \quad (2)$$

con N una constante de normalización $N = \frac{b^{a+1}}{\Gamma(a+1)}$, donde Γ es la función gamma. Aunque las distribuciones de probabilidad reales de los átomos (sobretudo de los más pesados) tienen una estructura más rica que esta función, aquí nos limitamos a estudiar la convergencia de la integral impropia en el intervalo $[0, \infty)$, que es el que nos interesa.

Por otro lado, se estudian funciones de tipo potencia que decaen muy lentamente a infinito, mucho más lentamente de lo que decaen las funciones anteriores. Aquí solamente queremos "forzar la máquina" ver En este caso, se estudia la función:

$$f(x) = \frac{p-1}{(1+x)^p}, \quad p > 1$$

que decaen lentamente a infinito. Se realizaron integraciones:

- Sin cambio de variable.
- Con cambio de variable.
- Usando `trapz`, `quad` y `fixed_quad`.

4.1 Resultados para la función $f(x) = Nx^a e^{-bx}$

Como vemos es una función $f(x) = Nx e^{-0.01x}$ que decae relativamente rápido a infinito. Es algo similar al tipo de funciones con las que se construyen las bases de Slater. Como era de esperar, el método `quad` proporciona resultados muy precisos a la integral de esta función (recordemos que el método `quad` realiza el cambio de variable (1) de forma automática). Algo más sorprendente es el método `trapz`, que proporciona los segundos mejores resultados en este cálculo cuando se aplica el

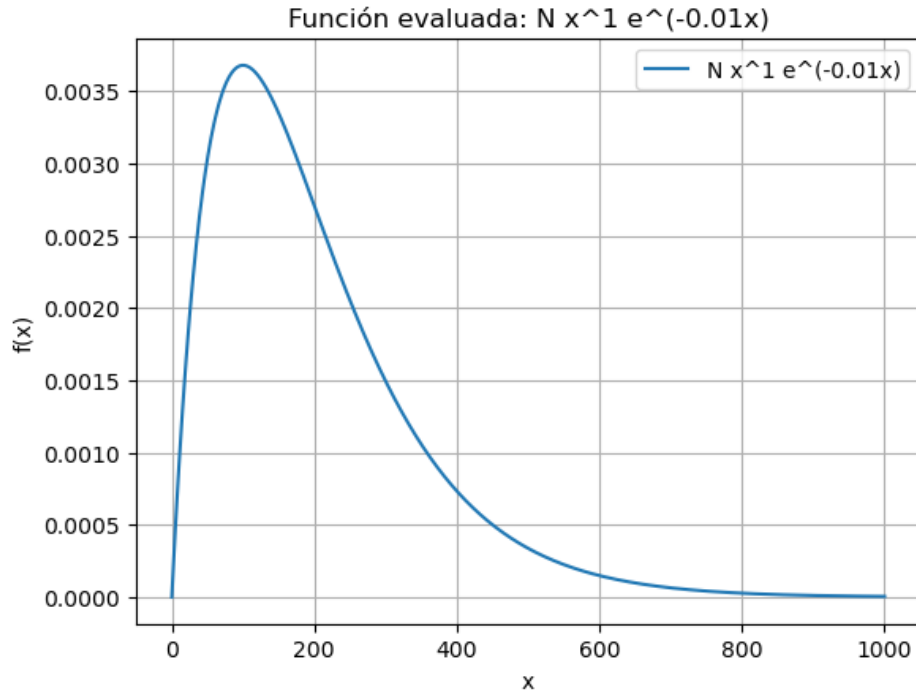


Figure 1: Comparación de la función $f(x) = Nx^a e^{-bx}$ $[0, 1000]$

cambio de variable mencionado en 1. Sin embargo, el metodo `fixed_quad` proporciona de los peores resultados (y aun peores resultados cuando realizamos el cambio de variable). Esto puede deberse a las dificultades que tiene el método `quad` para evaluar cerca de singularidades, de ahí que la función sin transformar proporcione mejores resultados.

Método	Resultado	Error absoluto	Tiempo (s)
Adaptativo (propio)	1.0000000000000001	1×10^{-15}	0.000687
quad	1.0000000000000000	0	0.000223
trapz (0-100)	0.999500517388558	4.9948×10^{-4}	0.000037
trapz (cambio var)	0.999999999999800	2.00×10^{-13}	0.000021
fixed_quad (0-100)	0.999500600772616	4.9939×10^{-4}	0.000023
fixed_quad (cambio var)	1.038522182629414	3.8522×10^{-2}	0.000014

Table 1: Comparación de precisión y rendimiento entre distintos métodos de integración para $f(x) = \frac{0.01^2}{\Gamma(2)} x e^{-0.01x}$

Graficar las funciones nos puede ayudar a enter los resultados expuestos en la tabla.

El método adaptativo realizado por mi proporciona resultados similares al método `quad`, aunque algo más lentos. Esto se debe a que el método `quad` utiliza menos puntos de Gauss-Kronrod en intervalos infinitos (al hacer el cambio de variable). Además de que `quad` es más rápido que el método adaptado por mi, también es más preciso debido a procesos internos mucho más optimizados que los usados por mí. Digamos que `quad` tiene la mejor relación precisión/velocidad.

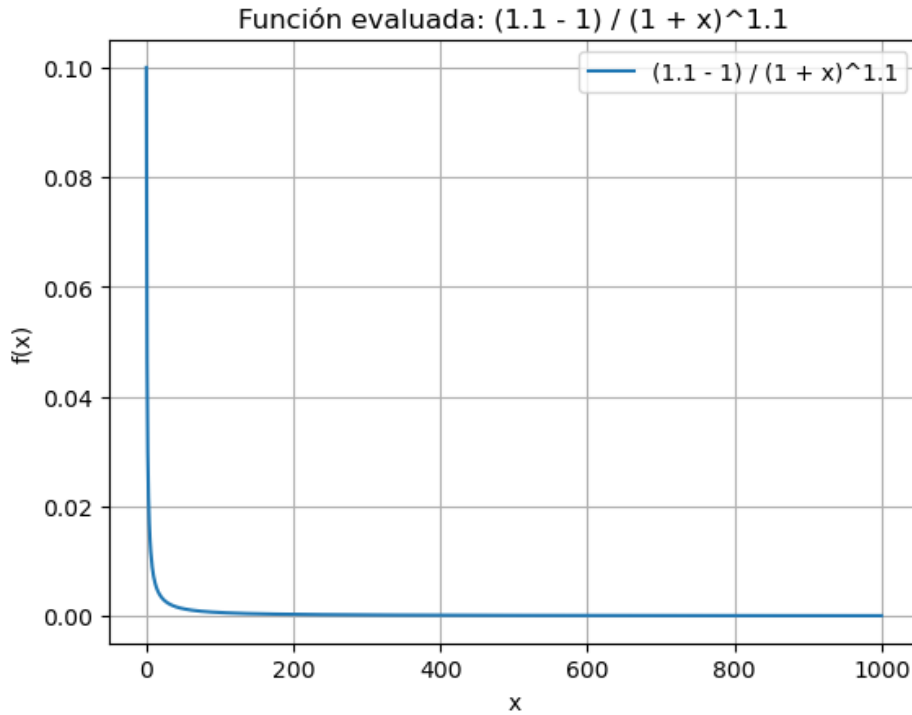


Figure 2: Comparación de la función $f(x) = \frac{p-1}{(1+x)^p}$ $[0, 100]$

4.2 Resultados para la función $f(x) = \frac{p-1}{(1+x)^p}$

Método	Resultado	Error absoluto	Tiempo (s)
Adaptativo (propio)	0.924142187135658	0.075857812864342	0.206181
quad	1.000000000000013	0.000000000000013	0.000101
trapz (0-100)	0.498954443499032	0.501045556500968	0.000069
trapz (cambio var)	0.776819826552289	0.223180173447711	0.000038
fixed_quad (0-100)	0.497723532253270	0.502276467746730	0.000236
fixed_quad (cambio var)	0.596396468056625	0.403603531943375	0.000023

Table 2: Comparación de métodos de integración numérica para una función de tipo potencia lenta.

Como vemos esta función "lleva al límite" a todas las funciones de integración, la única con capacidad de converger es el método `quad`.

5 Conclusiones

El método `quad` proporciona integración precisa gracias a su adaptabilidad y al cambio de variable automático en intervalos infinitos. Como vemos para este tipo de funciones, es importante realizar un estudio previo y bien, identificar que método es mejor para cada función hacer intervalos de integración "personalizados" para la función dada.

El método `quad` es el más adaptable (valga la redundancia) a todas las situaciones, pero es cierto que puede llegar a requerir más tiempo de computación que otros métodos. Tal vez, se podría investigar el uso del método `trapz` con el cambio de variable, pues parece obtener resultados muy similares a los de `quad` para este tipo de funciones en mucho menos tiempo (cabe mencionar que el tiempo de `quad` es bastante más variable que el de `trapz` pues depende de cuantas subdivisiones se hagan en todo el proceso).