Integración numérica

Fórmulas de cuadratura

Las fórmulas de integración numérica o de cuadratura son de la forma:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \omega_0\ f(x_0) + \omega_1\ f(x_1) + \cdots + \omega_N\ f(x_N)$$

donde $x_0, x_1, \ldots, x_N$ (nodos) son $N+1$ puntos distintos pertenecientes al intervalo $[a,b]$ y $\omega_0, \omega_1, \ldots, \omega_N$ (pesos) son números reales.

Fórmulas interpolatorias

Si P_N es el polinomio que interpola a f en los puntos distintos $x_0, x_1, \ldots, x_N \in [a,b]$ y

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P_N(x)\,dx = \omega_0\, f(x_0) + \omega_1\, f(x_1) + \cdots + \omega_N\, f(x_N)$$

decimos que la fórmula de cuadratura es de tipo interpolatorio.

Fórmulas de cuadratura simples y compuestas

Las fórmulas de cuadratura se llaman simples si la aproximación se hace en el intervalo completo $[a,b]$, y compuestas si, antes de aplicar la fórmula, dividimos el intervalo $[a,b]$, en n subintervalos.

Grado de precisión

Una fórmula de cuadratura tiene grado de precisión r si es exacta para

$$f(x) = 1, \quad f(x) = x, \quad f(x) = x^2, \ldots, \quad f(x) = x^r$$

pero no es exacta para $f(x) = x^{r+1}$

Fórmulas de cuadratura de Newton-Cotes simples

Son fórmulas de cuadratura de tipo interpolatorio, eligiendo los puntos de interpolación (nodos de la fórmula) igualmente separados de una de las dos formas siguientes:

- *Fórmulas cerradas* Los límites de integración a y b son nodos de la fórmula.

- *Fórmulas abiertas* Ninguno de los límites de integración es nodo de la fórmula.

Calculemos primero una integral de forma exacta (simbólica) para comparar los sucesivos resultados numéricos

Cargamos los paquetes `numpy` y `sympy`

```
import numpy as np
import sympy as sym
```

La integral

$$\int_1^3 \ln(x)\,dx \qquad (1)$$

se calcula de forma exacta

```
x = sym.Symbol('x', real=True)
f_sim = sym.log(x)
I_exacta = sym.integrate(f_sim,(x,1,3))
print(I_exacta)
```

```
-2 + 3*log(3)
```

Que también podemos escribir

```
I_exacta = float(I_exacta)
print(I_exacta)
```

```
1.2958368660043291
```

Fórmula del punto medio

La fórmula del punto medio es

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\; f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

Usar la fórmula del punto medio para integrar una función en un intervalo, equivale a sustituir, dentro de la integral, la función a integrar por el polinomio de interpolación de grado cero, es decir, una recta horizontal que pasa por el punto de la curva que corresponde al punto medio del intervalo $[a, b]$. Sustituimos la función por una recta e integramos. Estamos entonces calculando el área de un rectángulo.

Ejercicio 1a

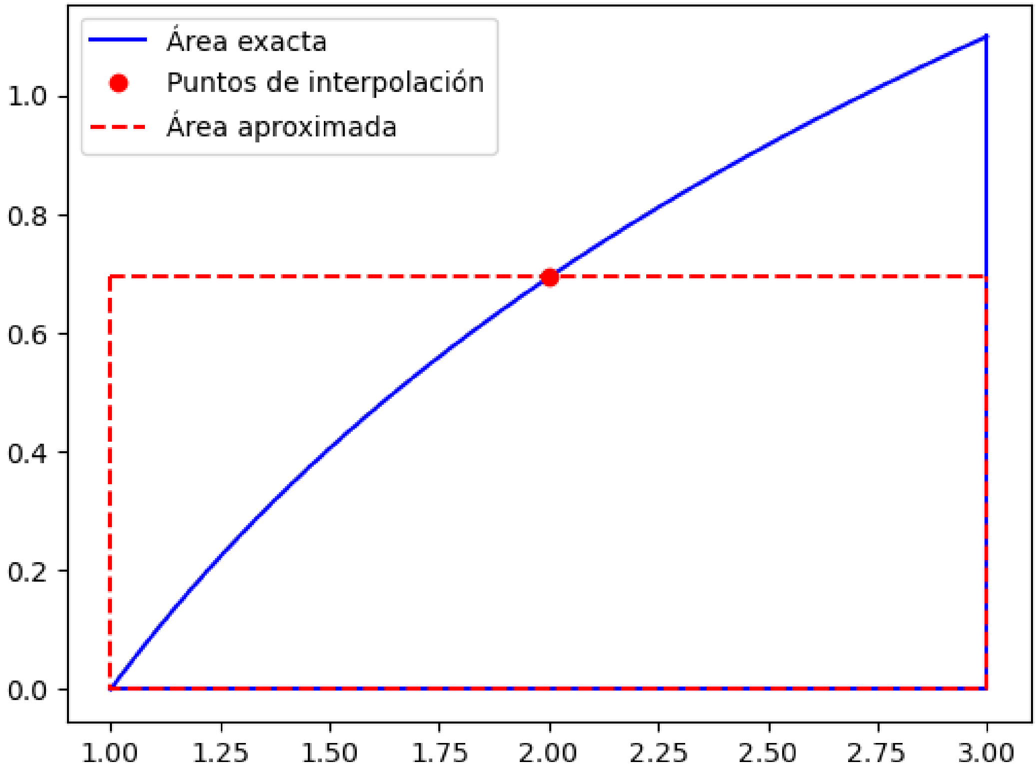
Escribir la función `punto_medio(f,a,b)` que tiene como argumentos de entrada la función `f` a integrar y los extremos del intervalo de integración `a` y `b`, y que devuelve el valor aproximado de la integral utilizando la Regla del Punto Medio.

Calcular la integral

$$\int_1^3 \ln(x)\, dx$$

Escribir el valor exacto (calculado antes) y el valor aproximado.

```
%run Ejercicio1a.py
```




```
El valor aproximado es 1.3862943611198906
El valor exacto es     1.2958368660043291
```

Fórmula de los trapecios

La fórmula de los trapecios simple es

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}\,(f\,(a)+f\,(b))$$

Usar la fórmula de los trapecios para integrar una función en un intervalo, equivale a sustituir, dentro de la integral, la función a integrar por el polinomio de interpolación de grado uno, que pasa por los puntos de la función de los extremos del intervalo. Es decir, sustituimos la función por una recta e integramos. Estamos entonces calculando el área de un trapecio.

Ejercicio 1b

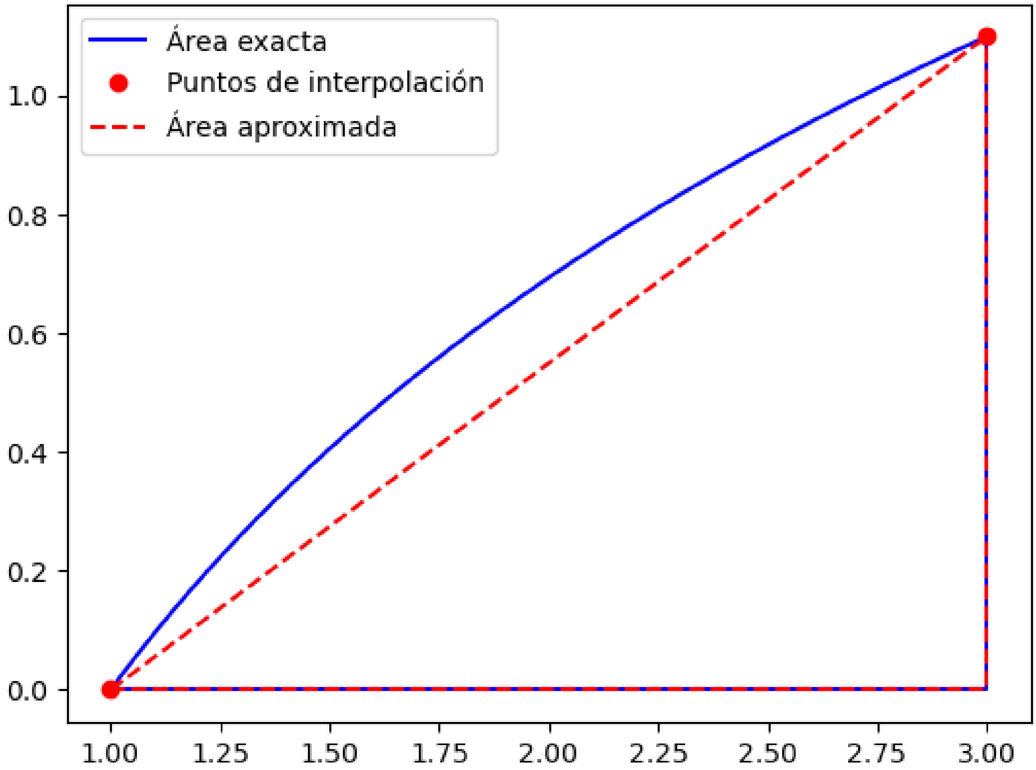
Escribir la función `trapecio(f,a,b)` del ejemplo anterior que tiene como argumentos de entrada la función f a integrar y los extremos del intervalo de integración a y b, y que devuelve el valor aproximado de la integral utilizando la Regla del Trapecio.

Calcular la integral

$$\int_1^3 \ln(x)\,dx$$

Escribir el valor exacto y el valor aproximado.

```
%run Ejercicio1b.py
```




```
El valor aproximado es 1.0986122886681098
El valor exacto es     1.2958368660043291
```

Fórmula de Simpson

La fórmula de Simpson simple es

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left(f\left(a\right)+4\,f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f\left(b\right)\right)$$

Usar la fórmula de Simpson para integrar una función en un intervalo, equivale a sustituir, dentro de la integral, la función a integrar por el polinomio de interpolación de grado dos, que pasa por los puntos de la función de los extremos y el punto medio del intervalo. Es decir, sustituimos la función por una parábola e integramos.

Ejercicio 1c

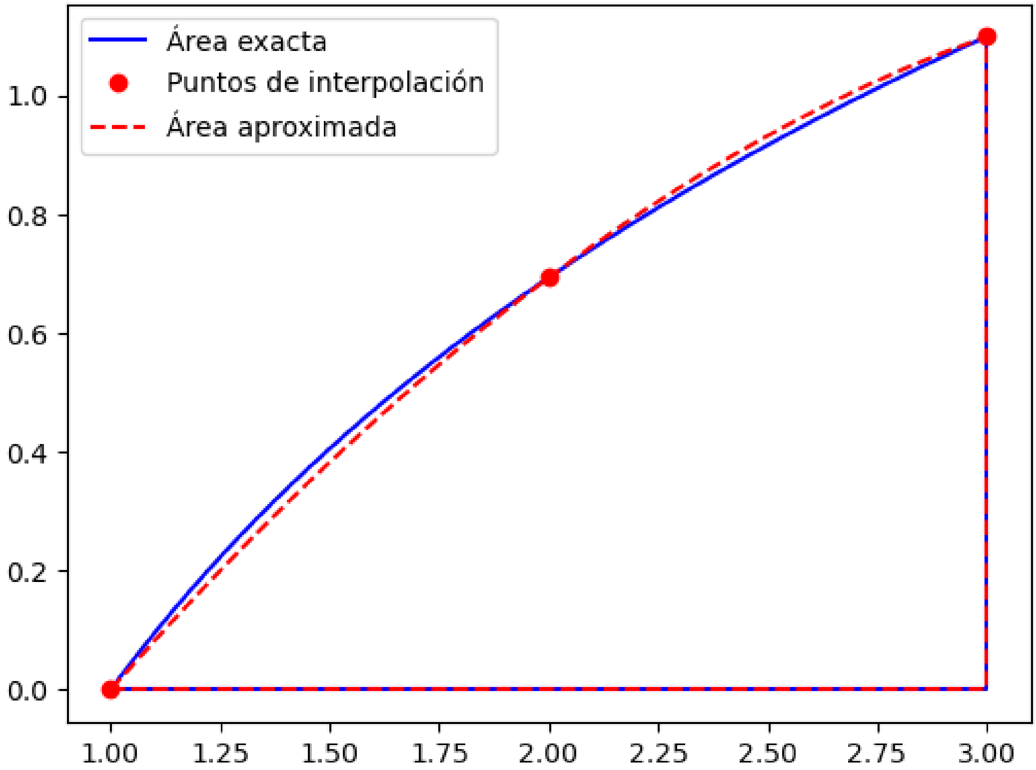
Escribir la función `simpson(f,a,b)` del ejemplo anterior que tiene como argumentos de entrada la función `f` a integrar y los extremos del intervalo de integración `a` y `b`, y que devuelve el valor aproximado de la integral utilizando la Regla del Simpson.

Calcular la integral

$$\int_1^3 \ln(x)\,dx$$

Escribir el valor exacto y el valor aproximado.

```
%run Ejercicio1c.py
```




```
El valor aproximado es 1.290400336969297
El valor exacto es     1.2958368660043291
```

Fórmulas de cuadratura de Newton-Cotes compuestas

Una forma de disminuir el error de las fórmulas anteriores es aumentar el número de nodos utilizando las fórmulas compuestas. Estas se obtienen dividiendo el intervalo $[a,b]$ en n subintervalos y aplicando a cada uno de estos subintervalos una fórmula de cuadratura sencilla.

Si dividimos el intervalo $[a,b]$ en n subintervalos de igual longitud usando los nodos $x_0, x_1, \ldots, x_n$,

la longitud de un subintervalo es

$$h = \frac{b-a}{n}$$

los nodos son

$$x_i = a + i\,h \quad i = 0, 1, \ldots, n$$

y el punto medio de un intervalo es

$$\bar{x}_i = \frac{x_{i-1} + x_i}{2}$$

entonces, las fórmulas compuestas se pueden escribir:

Fórmula del punto medio compuesta

$$\int_a^b f dx \approx h \sum_{i=1}^{n} f(\bar{x}_i)$$

Ejercicio 1d

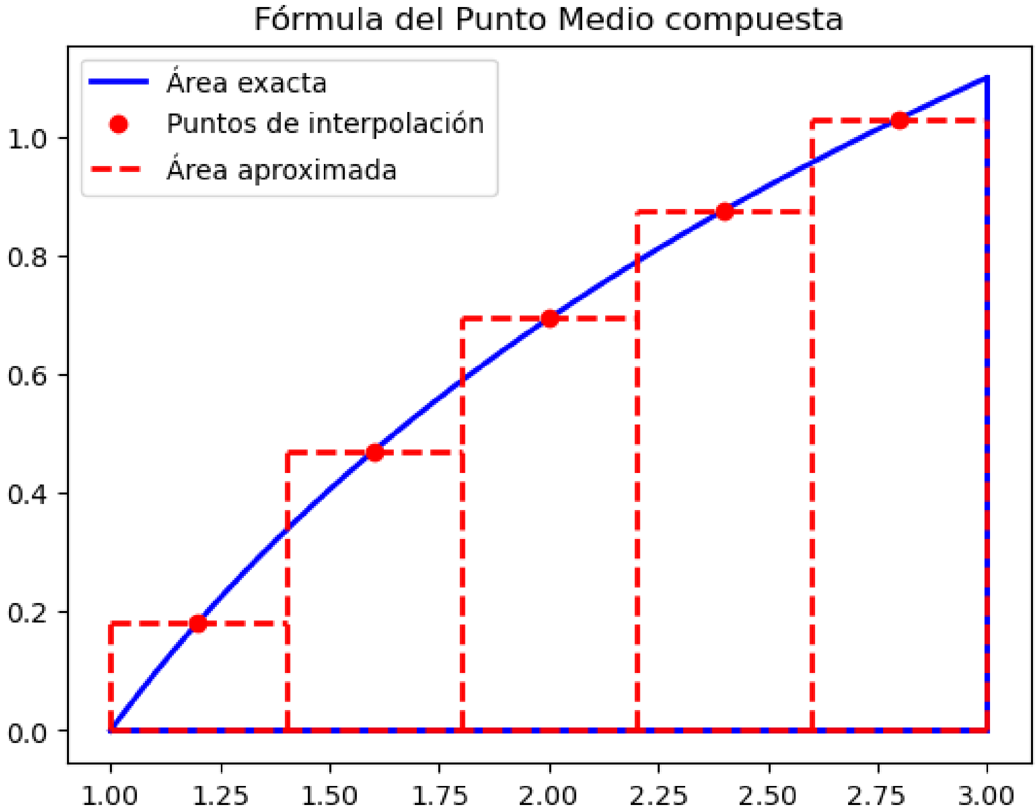
Escribir la función `punto_medio_comp(f,a,b,n)` que tiene como argumentos de entrada la función `f` a integrar, los extremos del intervalo de integración `a` y `b` , y el número de subintervalos que vamos a usar en la fórmula compuesta `n` y devuelve el valor aproximado utilizando la Regla del Trapecio compuesta.

Calcular, con `n = 5` subintervalos, la integral

$$\int_1^3 \ln(x)\, dx$$

Escribir el valor exacto y el valor aproximado.

```
%run Ejercicio1d.py
```




```
El valor aproximado es 1.3002242084538775
El valor exacto es     1.2958368660043291
```

Regla de los trapecios compuesta

$$\int_a^b f dx \approx \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) + h \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)$$

Ejercicio 1e

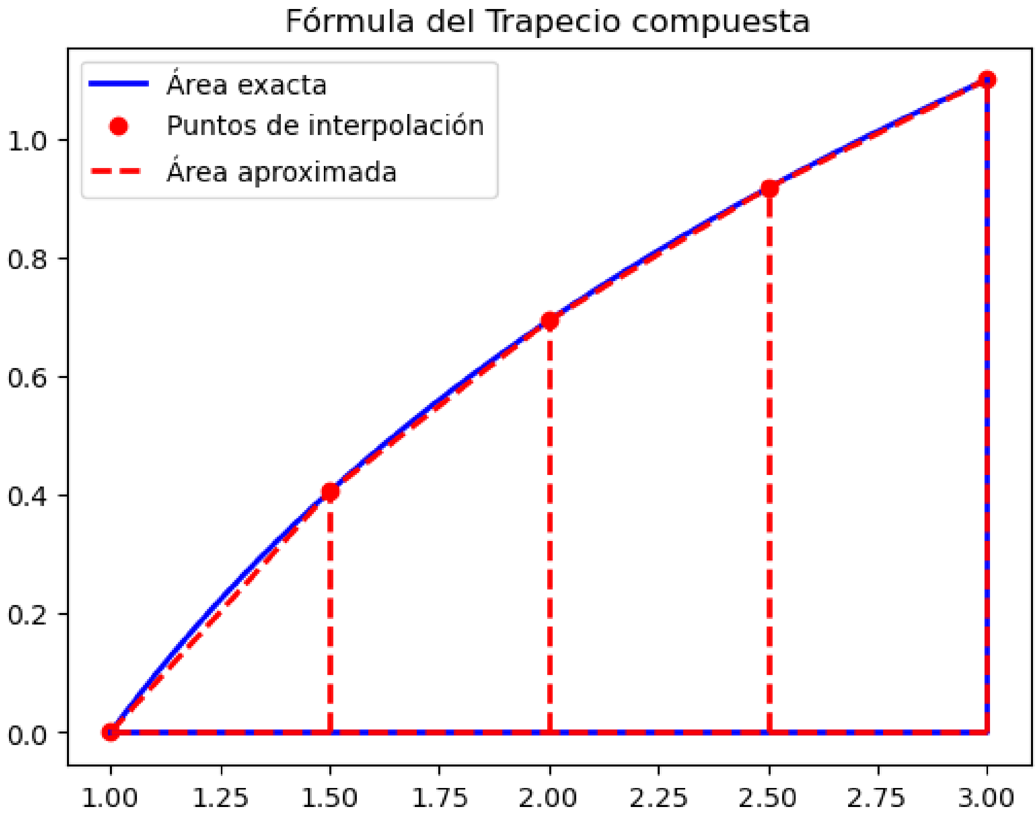
Escribir la función `trapecio_comp(f,a,b,n)` que tiene como argumentos de entrada la función `f` a integrar, los extremos del intervalo de integración `a` y `b` y el número de subintervalos que vamos a usar en la fórmula compuesta `n` y devuelve el valor aproximado utilizando la Regla del Trapecio compuesta.

Calcular, con `n = 4` subintervalos, la integral

$$\int_1^3 \ln(x)\, dx$$

Escribir el valor exacto y el valor aproximado.

```
%run Ejercicio1e.py
```




```
El valor aproximado es 1.2821045824381598
El valor exacto es     1.2958368660043291
```

Fórmula de Simpson Compuesta

$$\int_a^b f dx \approx \frac{h}{6}\sum_{i=1}^{n}\left(f(x_{i-1}) + 4f(\bar{x}_i) + f(x_i)\right)$$

Ejercicio 1f

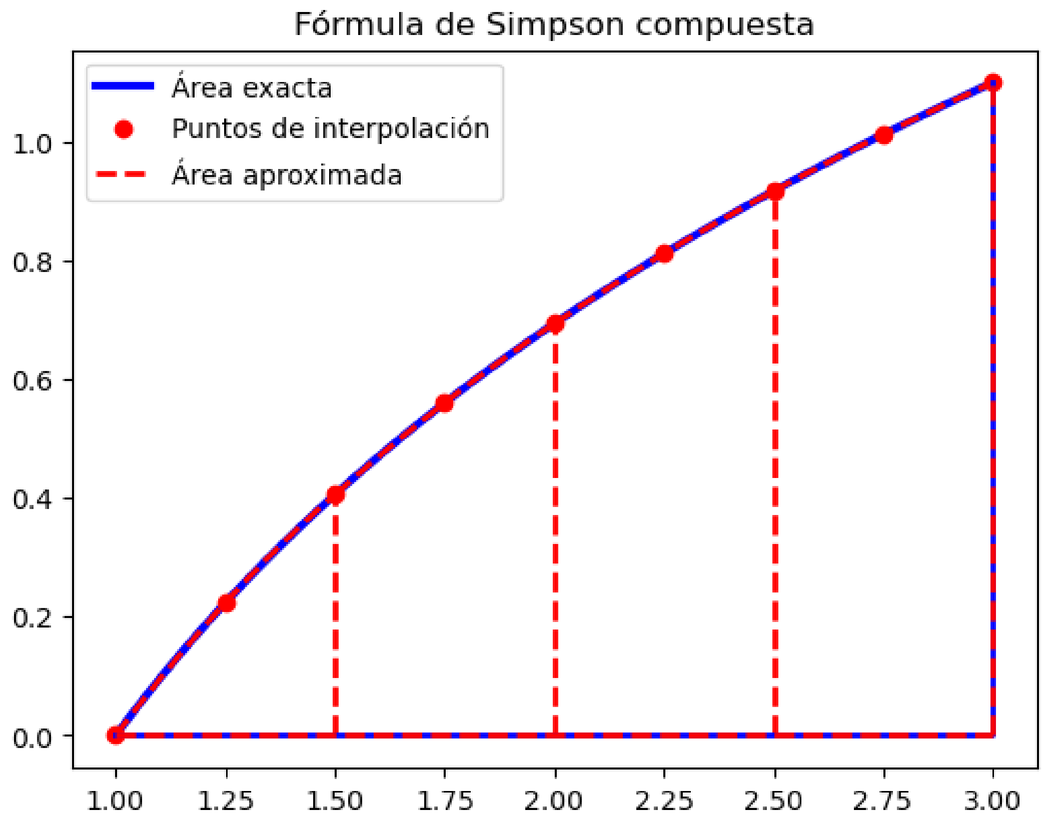
Escribir la función `simpson_comp(f,a,b,n)` que tiene como argumentos de entrada la función `f` a integrar, los extremos del intervalo de integración `a` y `b` y el número de subintervalos que vamos a usar en la fórmula compuesta `n` y devuelve el valor aproximado utilizando la Regla del Punto Medio compuesta.

Calcular, con `n = 4` subintervalos, la integral

$$\int_1^3 \ln(x)\, dx$$

Escribir el valor exacto y el valor aproximado.

```
%run Ejercicio1f.py
```




```
El valor aproximado es 1.295798349860867
El valor exacto es     1.2958368660043291
```

Fórmulas de cuadratura gaussianas

En la fórmula de cuadratura:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \omega_0 f(x_0) + \omega_1 f(x_1) + \cdots + \omega_N f(x_N)$$

¿Es posible calcular los pesos ω_i y los nodos x_i de forma que la precisión de la fórmula sea lo mayor posible? Sí, pero entonces los nodos no estarán equiespaciados.

Si $[a,b] = [-1,1]$ los pesos y nodos son

n	w_i	x_i
1	2.000000	0.000000
2	1.000000	$\pm$0.577350
3	0.555556	$\pm$0.774597
	0.888889	0.000000
4	0.347855	$\pm$0.861136
	0.652145	$\pm$0.339981
5	0.236927	$\pm$0.906180
	0.478629	$\pm$0.538469
	0.568889	0.000000

Estos nodos y pesos de la fórmula de Gauss-Legendre con nodos se pueden obtener con `np.polynomial.legendre.leggauss(n)` . Por ejemplo, para $n = 1$:

```
n = 1
[x, w] = np.polynomial.legendre.leggauss(n)
print('w\n',w)
print('x\n',x)
```

```
w
 [2.]
x
 [0.]
```

Así, por ejemplo, la fórmula gaussiana para un punto es

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx 2\; f(0)$$

Para dos puntos

```
n = 2
[x, w] = np.polynomial.legendre.leggauss(n)
print('w\n',w)
print('x\n',x)
```

```
w
 [1. 1.]
x
 [-0.57735027  0.57735027]
```

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx f(-0.57735027) + f(0.57735027)$$

Para tres puntos

```
n = 3
[x, w] = np.polynomial.legendre.leggauss(n)
print('w\n',w)
print('x\n',x)
```

```
w
 [0.55555556 0.88888889 0.55555556]
x
 [-0.77459667  0.          0.77459667]
```

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx 0.55555556\ f(-0.77459667) + 0.88888889\ f(0) + 0.55555556\ f(0.774596$$

Y así sucesivamente.

Estos resultados se pueden generalizar a cualquier intervalo $[a,b]$ cambiando los x_i por y_i de acuerdo con la fórmula

$$y_i = \frac{b-a}{2}x_i + \frac{a+b}{2}$$

Y entonces la fórmula de cuadratura es

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}(\omega_0\ f(y_0) + \omega_1\ f(y_1) + \cdots + \omega_n\ f(y_n))$$

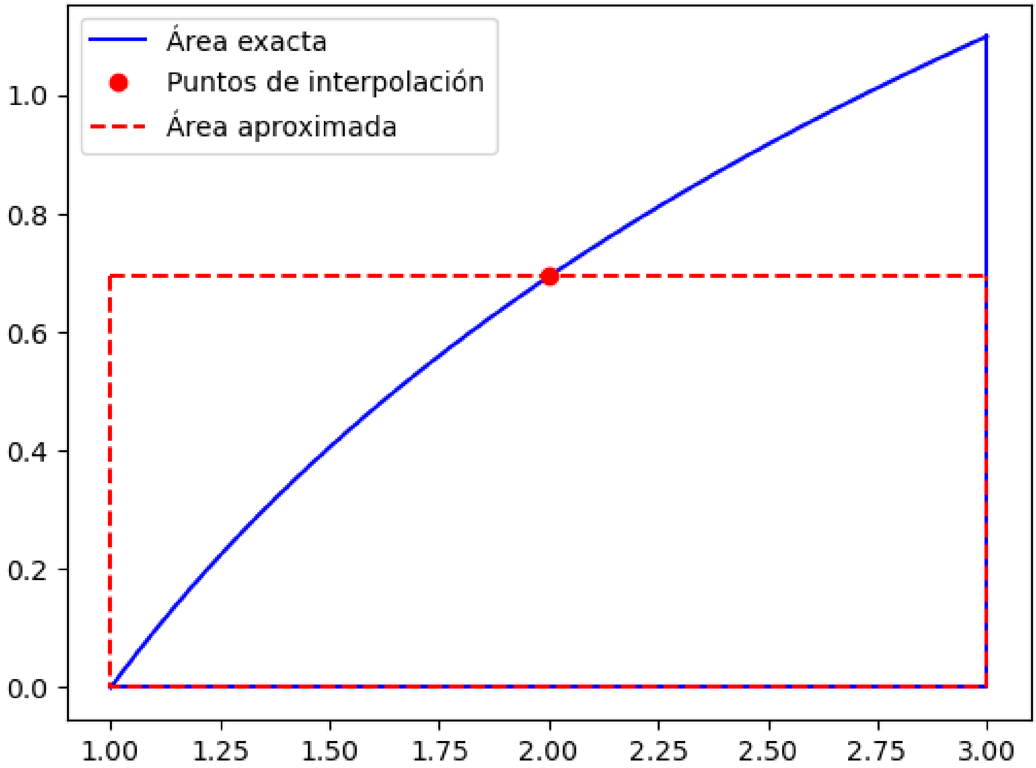
Ejercicio 2

Escribir la función **`gauss(f,a,b,n)`** que tiene como argumentos de entrada la función **`f`** a integrar, los extremos del intervalo de integración **`a`** y **`b`** y el número de nodos **`n`** y devuelve el valor aproximado utilizando la fórmulas gaussianas con **`n = 1`**, **`n = 2`** y **`n = 3`** nodos la integral

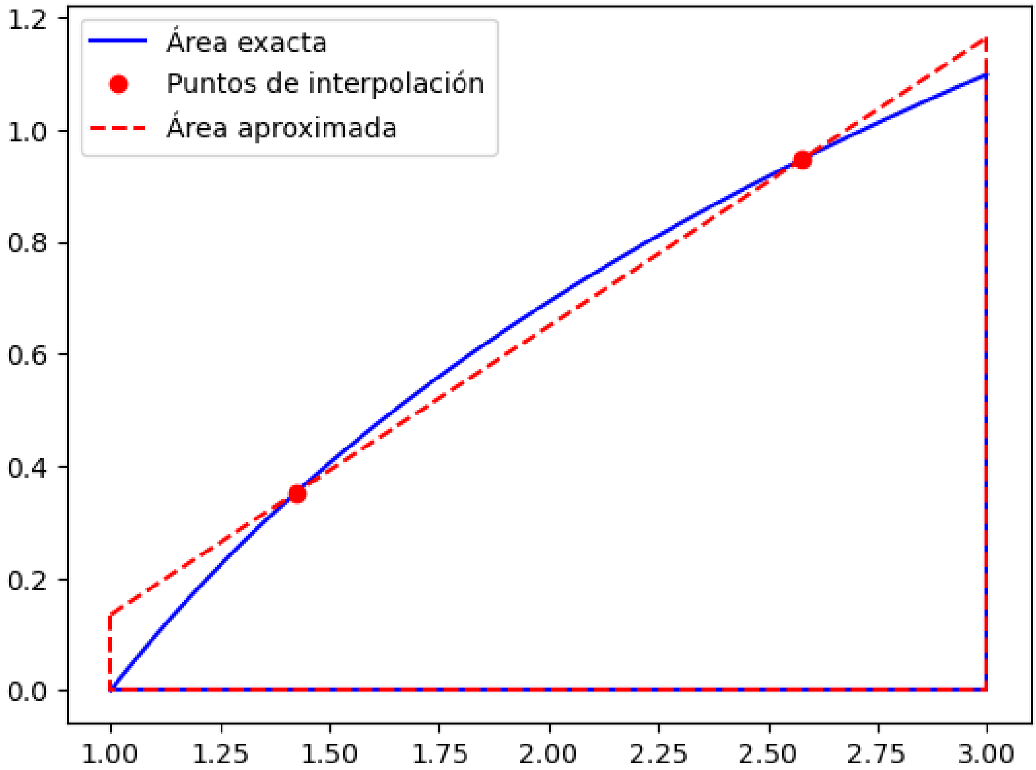
$$\int_1^3 \ln(x)\,dx$$

Escribir el valor exacto y el valor aproximado.

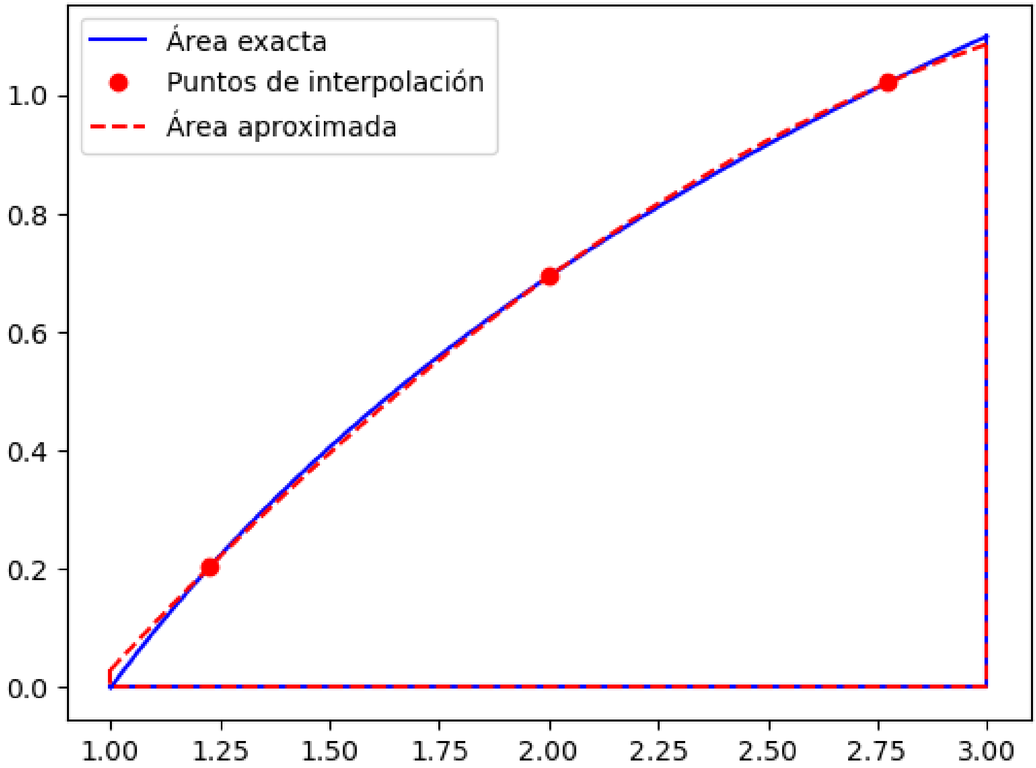
```
%run Ejercicio2.py
```




```
El valor aproximado es 1.3862943611198906
El valor exacto es     1.2958368660043291
```




```
El valor aproximado es 1.2992829841302609
El valor exacto es     1.2958368660043291
```




```
El valor aproximado es 1.2960060669544604
El valor exacto es     1.2958368660043291
```

Grado de precisión de las fórmulas de cuadratura

Grado de precisión

Una fórmula de cuadratura tiene grado de precisión r si es exacta para

$$f(x) = 1, \quad f(x) = x, \quad f(x) = x^2, \ldots, \quad f(x) = x^r$$

pero no es exacta para $f(x) = x^{r+1}$

Ejercicio 3

Escribir la función **`grado_de_precision(formula,n)`** que tiene como argumento de entrada la función **`formula`** que puede ser la función **`punto_medio`** , **`trapecio`** , **`Simpson`** o **`gauss`** y donde **`n`** es el número de nodos que se usa en la construcción de la fórmula, que estudia el grado de precisión de cada una de estas fórmulas calculando su error para las integrales

$$\int_1^3 x^i\,dx \quad i = 0, 1, 2, \ldots$$

y cuando el error es distinto de cero, para. Imprimir los errores para cada polinomio y el grado de precisión de la fórmula.

Notas:

- Para que el formato de las funciones que serán argumento de entrada sea la misma, modificar los argumentos de entrada de las funciones `punto_medio(f,a,b,n)` , `trapecio(f,a,b,n)` y `Simpson(f,a,b,n)` para que tenga los mismos argumentos que `gauss(f,a,b,n)` .
- Debido a los errores de redondeo, considerar que el error es cero cuando es menor que 10^{-10}.

```
%run Ejercicio3.py
```

```
----  Fórmula del punto medio (1 punto) ----

f(x) = x^0   error =  0.0
f(x) = x^1   error =  0.0
f(x) = x^2   error =  0.6666666666666661

El grado de precisión es 1


----  Fórmula del trapecio (2 puntos) ----

f(x) = x^0   error =  0.0
f(x) = x^1   error =  0.0
f(x) = x^2   error =  1.333333333333334

El grado de precisión es 1


----  Fórmula de Simpson (3 puntos) ----

f(x) = x^0   error =  0.0
f(x) = x^1   error =  0.0
f(x) = x^2   error =  0.0
f(x) = x^3   error =  0.0
f(x) = x^4   error =  0.2666666666666657

El grado de precisión es 3


----  Fórmula Gauss n = 1  ----

f(x) = x^0   error =  0.0
f(x) = x^1   error =  0.0
f(x) = x^2   error =  0.6666666666666661

El grado de precisión es 1


----  Fórmula Gauss n = 2  ----

f(x) = x^0   error =  0.0
f(x) = x^1   error =  0.0
f(x) = x^2   error =  0.0
f(x) = x^3   error =  0.0
f(x) = x^4   error =  0.17777777777777715

El grado de precisión es 3


----  Fórmula Gauss n = 3  ----

f(x) = x^0   error =  4.440892098500626e-16
f(x) = x^1   error =  0.0
f(x) = x^2   error =  1.7763568394002505e-15
f(x) = x^3   error =  7.105427357601002e-15
f(x) = x^4   error =  7.105427357601002e-15
f(x) = x^5   error =  1.4210854715202004e-14
f(x) = x^6   error =  0.04571428571415481

El grado de precisión es 5
```

```
----  Fórmula Gauss n = 4  ----

f(x) = x^0   error =  2.220446049250313e-16
f(x) = x^1   error =  4.440892098500626e-16
f(x) = x^2   error =  0.0
f(x) = x^3   error =  0.0
f(x) = x^4   error =  7.105427357601002e-15
f(x) = x^5   error =  0.0
f(x) = x^6   error =  5.684341886080802e-14
f(x) = x^7   error =  2.2737367544323206e-13
f(x) = x^8   error =  0.011609977324951615

El grado de precisión es 7
```

Ejercicios propuestos

Integración numérica con órdenes python

El módulo [scipy.integrate (https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/integrate.html)](https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/integrate.html) provee varias funciones con diferentes técnicas de integración. Entre sus funciones está la función de propósito general `quad` .

```python
from scipy.integrate import quad

f = lambda x : np.log(x)
a = 1.; b = 3;

I = quad(f,a,b)

print('El valor aproximado es', I[0])
print('El valor exacto es    ', I_exacta)
```

```
El valor aproximado es 1.2958368660043291
El valor exacto es     1.2958368660043291
```

Integración de Montecarlo

Podemos calcular integrales aproximadas usando números aleatorios.

Consideremos, de momento, que la función es positiva en el intervalo de integración $[a, b]$. El valor de la integral de la función es igual al área bajo la curva. Para aproximar este área:

1. Generamos puntos aleatorios dentro del rectángulo $[a, b] \times [0, \max(f)]$.
2. Contamos el número de puntos por debajo de la curva.
3. La proporción del número de puntos por debajo de la curva relativa a los puntos totales, multiplicada por el área del anterior rectángulo nos da el área aproximada.

Ejercicio 4

Escribir la función `montecarlo(f,a,b,n)` que tiene como argumentos de entrada la función `f` a integrar, los extremos del intervalo de integración `a` y `b` y el número de puntos aleatorios `n` y devuelve el valor aproximado utilizando el método de Montecarlo.

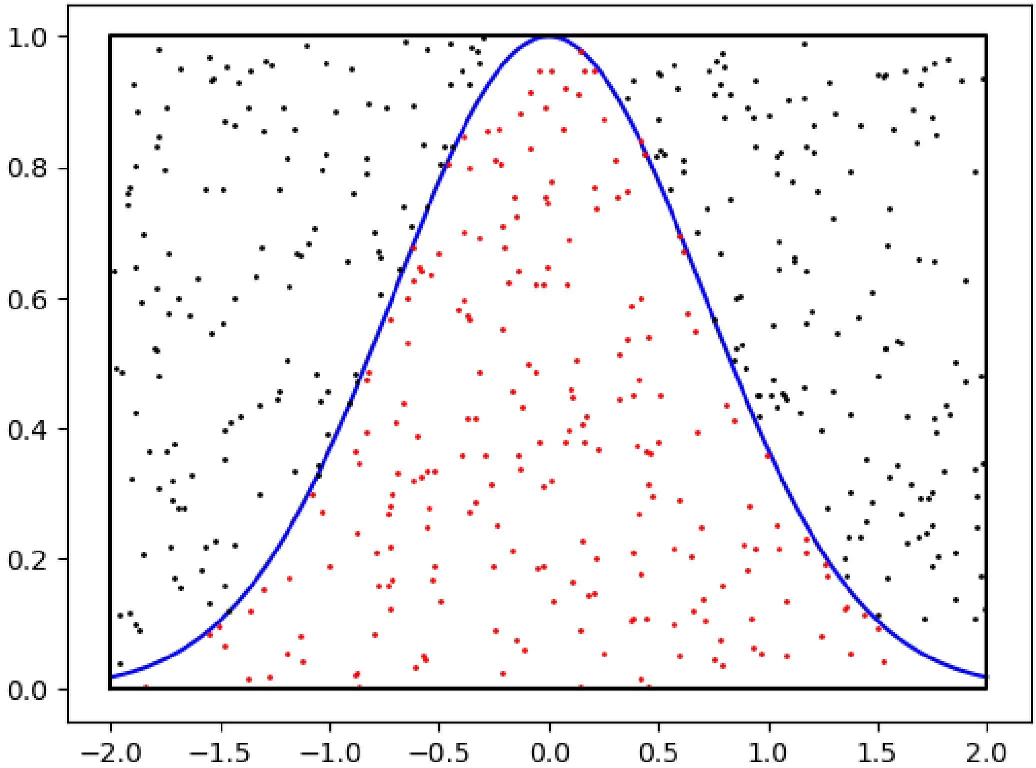
$$\int_{-2}^{2} e^{-x^2}\,dx$$

Escribir el valor exacto y el valor aproximado.

Nota

Para calcular `n` puntos aleatorios distribuidos uniformemente en el intervalo $[a,b]$ podemos usar `np.random.rand(n) * (b-a) + a` .

```
%run Ejercicio4.py
```




```
El valor aproximado es 1.735972
El valor exacto es     1.764163
```

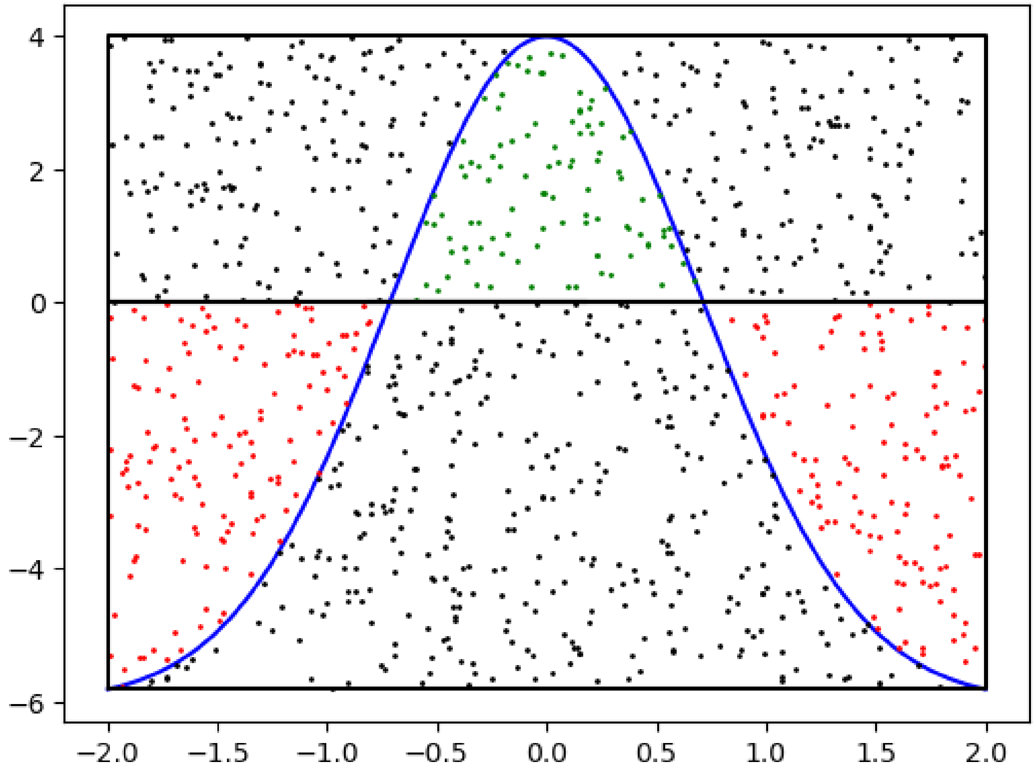
Ejercicio 5

Modificar la función anterior para que sea válida para funciones no positivas. Calcular la integral

$$\int_{-2}^{2} \left(10\,e^{-x^2} - 6\right)\, dx$$

Escribir el valor exacto y el valor aproximado.

```
%run Ejercicio5.py
```




```
El valor aproximado es -6.243487
El valor exacto es     -6.358372
```