Integración numérica

Christian Vanhille, Universidad Rey Juan Carlos
10/2017

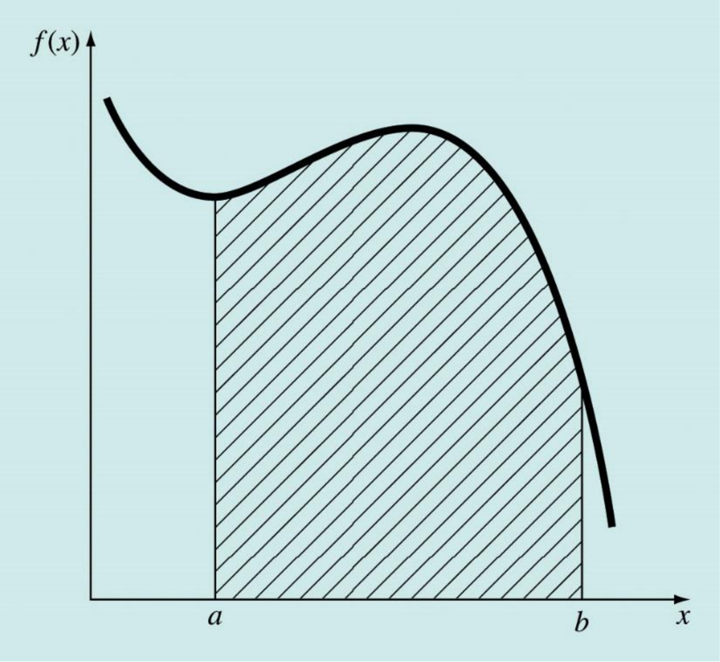
Objetivos

- Entender cómo deducir fórmulas de integración numérica y su error
- Concretamente, trabajamos con 2 familias de métodos
  - Fórmulas de Newton-Cotes (cerradas y abiertas)
  - Cuadratura gaussiana
- Implementarlas en Matlab
- Aplicarlas

Planteamiento inicial

- Función f a valor real de una variable real, continua y con derivadas continuas hasta un orden indefinido (el que nos interesa) en el intervalo de cálculo (a,b) $x \rightarrow f(x)$
- Gráfica $y = f(x)$
- $b-a=H$
- Integral de f con respecto a x

$$I = \int_a^b f(x)\,dx$$



C. Vanhille

Planteamiento inicial

- Considerando un soporte de n+1 puntos entre a y b, $x_0,\ldots x_n$, una fórmula de integración numérica de f en [a,b] tiene la forma

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} c_i f(x_i) + R(x)$$

R(x) es el término de error de la aproximación

c_i son los pesos de la fórmula

Fórmulas de Newton-Cotes

- Las más habituales para calcular integrales de forma numérica
- Ventajas: sencillas de usar
- La función f(x) (o la tabla de datos x,f(x)) se sustituye por un polinomio interpolador de Lagrange de grado n, fácil de integrar (n+1 puntos equidistantes: $x_0,\ldots,x_n$):

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i(x)$$

- → una aproximación del valor de la integral de f
- Dependiendo del grado del polinomio, se obtiene una fórmula de integración u otra

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \simeq \int_a^b p_n(x)\,dx \quad I = \int_a^b p_n(x)\,dx + \int_a^b E_n(x)\,dx$$

Fórmulas de Newton-Cotes

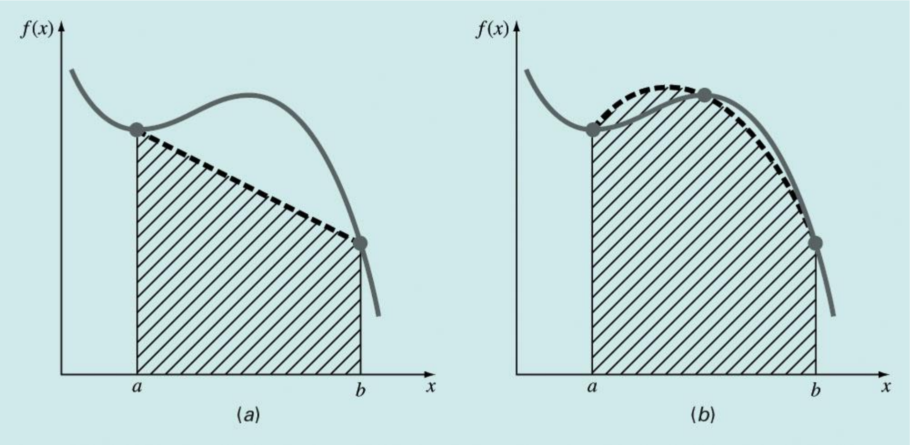
- Son fórmulas de integración numérica de tipo interpolatorio
- En el caso del polinomio de Lagrange

$$c_i = \int_a^b L_i(x)\,dx \qquad\qquad R(x) = \int_a^b E(x)\,dx$$

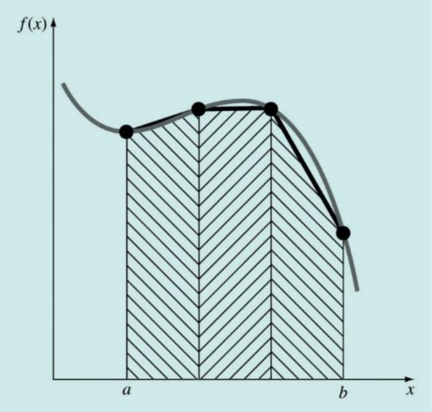
- Son fórmulas exactas para funciones polinómicas de grado n
  - Teorema. La condición necesaria y suficiente para que la fórmula de integración numérica construida sobre un soporte de n+1 puntos sea exacta de grado n es que sea de tipo interpolatorio

Fórmulas de Newton-Cotes

- Constante
  - Fórmula del Rectángulo
- Lineal
  - Fórmula del Trapecio
- Parabólico
  - Fórmula de Simpson 1/3



- Si a y b pertenecen al soporte del polinomio: fórmula cerrada ; Sino: fórmula abierta
- [a,b] puede dividirse en subintervalos → fórmulas compuestas



C. Vanhille

Fórmula del Rectángulo

- Polinomio constante (grado 0, n=0, 1 punto), fórmula abierta
- Punto en el extremo izquierdo $p_n(x) = f(a)$

$$I \simeq \int_a^b p_n(x)\,dx = \left[f(a)x\right]_a^b = f(a)(b-a)$$

- Punto en el extremo derecho $p_n(x) = f(b)$

$$I \simeq \int_a^b p_n(x)\,dx = \left[f(b)x\right]_a^b = f(b)(b-a)$$

- Punto en el punto medio $p_n(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)$

$$I \simeq \int_a^b p_n(x)\,dx = \left[f\left(\frac{a+b}{2}\right)x\right]_a^b = f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a)$$

Fórmula del Rectángulo

- **Error de truncamiento de $p_n(x)$ (extremo izquierdo)**

$$E_n(x) = (x-a)f'(\xi_x),\ a < \xi_x < b$$

$$R_n(x) = \int_a^b E_n(x)\,dx = \int_a^b f'(\xi_x)(x-a)\,dx = ?$$

ξ_x **depende de x**

$$I \simeq \int_a^b p_n(x)\,dx = \left[f(a)x\right]_a^b = f(a)(b-a)$$

Fórmula del Rectángulo

$$I_x = \int_a^b f(x)\,dx = \left[F(x)\right]_a^b = F(b) - F(a)$$

$$= F\big(a + (b-a)\big) - F(a)$$

$$= (\text{DST})\ F(a) + (b-a)F'(a) + \frac{(b-a)^2}{2}F''(a) + \cdots - F(a)$$

$$= (b-a)F'(a) + \frac{(b-a)^2}{2}F''(\xi_x)$$

$$= (b-a)f(a) + \frac{(b-a)^2}{2}f'(\xi_x),\ a < \xi_x < b$$

$$R_n(x) = I_x - I = \frac{f'(\xi_x)}{2}(b-a)^2 = O(H^2)$$

- depende de la distancia H y de f'

C. Vanhille

Fórmula del Rectángulo

- **Extremo derecho**
  - DST en I_x desde el punto b para F(a)

$$R_n(x) = I_x - I = -\frac{f'(\xi_x)}{2}(b-a)^2 = O(H^2)$$

- **Punto medio**
  - DST en I_x desde el punto (a+b)/2 para F(b) y F(a)

$$R_n(x) = I_x - I = \frac{f''(\xi_x)}{24}(b-a)^3 = O(H^3)$$

  - Error de orden más elevado

Fórmula del Rectángulo compuesta

- El resultado anterior sugiere que se podría reducir el error dividiendo el intervalo [a,b] en n subintervalos de longitud Δx y aplicando la fórmula del Rectángulo (extremo izquierdo) en cada uno de ellos

$$I \simeq \int_a^b p_n(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_1} p_n(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} p_n(x)\,dx$$

$$= (x_1 - x_0) f(x_0) + (x_2 - x_1) f(x_1) + \cdots$$

$$+ (x_{n-1} - x_{n-2}) f(x_{n-2}) + (x_n - x_{n-1}) f(x_{n-1})$$

$$= \Delta x \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)$$

Fórmula del Trapecio

- **Polinomio lineal (grado 1, n=1, 2 puntos), fórmula cerrada**

$$p_n(x) = f(a)L_0(x) + f(b)L_1(x)$$

$$L_0(x) = \frac{x-b}{a-b},\ L_1(x) = \frac{x-a}{b-a}$$

$$p_n(x) = f(a)\frac{b-x}{b-a} + f(b)\frac{x-a}{b-a}$$

$$= f(a)\frac{b-a+a-x}{b-a} + f(b)\frac{x-a}{b-a}$$

$$= f(a)\frac{b-a}{b-a} - f(a)\frac{x-a}{b-a} + f(b)\frac{x-a}{b-a}$$

Fórmula del Trapecio

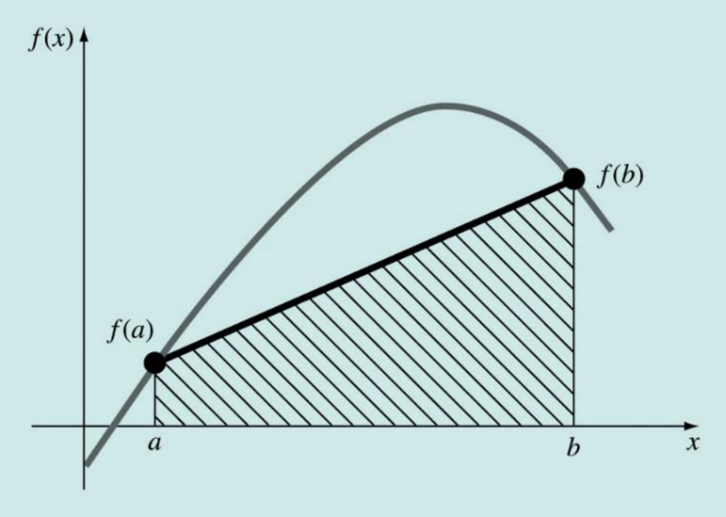
$$p_n(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a)$$

$$I \simeq \int_a^b p_n(x)\,dx =$$

$$\left[f(a)x + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}\frac{(x - a)^2}{2} \right]_a^b$$

$$= f(a)(b - a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}\frac{(b - a)^2}{2} - 0$$

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



Fórmula del Trapecio

- **Error de truncamiento de $p_n(x)$**

$$E_n(x) = \frac{(x-a)(x-b)}{2} f''(\xi_x), \; a < \xi_x < b$$

$$R_n(x) = \int_a^b E_n(x)\,dx = \int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2}\left(x^2 - (a+b)x + ab\right)dx = ?$$

Fórmula del Trapecio

$$I \simeq \int_a^b p_n(x)\,dx = \frac{(b-a)}{2}\big(f(a)+f(b)\big)$$

$$= \frac{(b-a)}{2}\Big(f(a)+f\big(a+(b-a)\big)\Big)$$

$$= \text{(DST)}\ \frac{(b-a)}{2}\Big(f(a)+f(a)+(b-a)f'(a)+$$

$$\frac{(b-a)^2}{2}f''(\xi_{1x})\Big)$$

$$= (b-a)f(a)+\frac{(b-a)^2}{2}f'(a)+\frac{(b-a)^3}{4}f''(\xi_{1x}),\ a<\xi_{1x}<b$$

C. Vanhille

Fórmula del Trapecio

$$I_x = \int_a^b f(x)\,dx = \left[F(x)\right]_a^b = F(b) - F(a)$$

$$= F\big(a + (b-a)\big) - F(a)$$

$$= (\text{DST})\ F(a) + (b-a)F'(a) + \frac{(b-a)^2}{2}F''(a)$$

$$+ \frac{(b-a)^3}{6}F'''(a) + \cdots - F(a)$$

$$= (b-a)F'(a) + \frac{(b-a)^2}{2}F''(a) + \frac{(b-a)^3}{6}F'''(\xi_{2x})$$

$$= (b-a)f(a) + \frac{(b-a)^2}{2}f'(a) + \frac{(b-a)^3}{6}f''(\xi_{2x}),\ a < \xi_{2x} < b$$

Fórmula del Trapecio

$$R_n(x) = I_x - I = \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{4}\right) f''(\xi_x)(b-a)^3$$

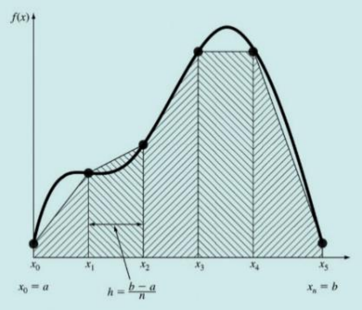
$$= -\frac{f''(\xi_x)}{12}(b-a)^3 = O(H^3)$$

– Aquí interviene el teorema del valor medio

- depende de la distancia H y de la curvatura de f

Fórmula del Trapecio compuesta

- El resultado anterior sugiere que se podría reducir el error dividiendo el intervalo [a,b] en n subintervalos de longitud Δx y aplicando la fórmula del Trapecio en cada uno de ellos



$$I \simeq \int_a^b p_n(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_1} p_n(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} p_n(x)\,dx$$

$$= (x_1 - x_0)\frac{f(x_0)+f(x_1)}{2} + (x_2 - x_1)\frac{f(x_1)+f(x_2)}{2} + \cdots$$

$$+ (x_{n-1} - x_{n-2})\frac{f(x_{n-2})+f(x_{n-1})}{2} + (x_n - x_{n-1})\frac{f(x_{n-1})+f(x_n)}{2}$$

$$= \frac{\Delta x}{2}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right)$$

C. Vanhille

- Composición con Δx no constante posible

Fórmulas de Newton-Cotes

- **Podemos seguir añadiendo puntos al soporte del polinomio interpolador, i.e., aumentar el grado de polinomio, para obtener nuevas fórmulas de integración numérica de mayor orden de error**
- **En particular, existe la fórmula de Simpson 1/3, con el polinomio cuadrático (grado 2, n=2, 3 puntos), fórmula cerrada**

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

$$R_n(x) = I_x - I = -\frac{f^{iv}(\xi_x)}{2880}(b-a)^5 = O\left(H^5\right)$$

- **La composición de esta fórmula requiere un número impar de puntos**

Fórmulas de Newton-Cotes

- Poniendo x_i los puntos implicados en la fórmula ($i=0,\ldots,n$), con $x_0=a$ y $x_n=b$, y h la distancia entre 2 puntos consecutivos x_i y x_{i+1}, las fórmulas del Trapecio y de Simpson 1/3 se pueden escribir, respectivamente:

$$I \simeq \frac{h}{2}\left(f\left(x_0\right)+f\left(x_1\right)\right)$$

$$I \simeq \frac{h}{3}\left(f\left(x_0\right)+4f\left(x_1\right)+f\left(x_2\right)\right)$$

Fórmulas de Newton-Cotes

Las fórmulas de Newton-Cotes cerradas se expresan de la forma

$$I=\frac{(b-a)}{D}\sum_{i=0}^{n}c_i f(x_i)+R_n(x)$$

$$I\simeq\frac{(b-a)}{D}\sum_{i=0}^{n}c_i f(x_i)$$

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

Con los coeficientes de la tabla:

n (puntos)	c_i	D	$\|R_n\|$	nombre
1 (2)	1, 1	2	K=1/12 O(h^3)	Trapecio ★
2 (3)	1, 4, 1	6	K=1/90 O(h^5)	Simpson 1/3 ★
3 (4)	1, 3, 3, 1	8	K=3/80 O(h^5)	Simpson 3/8
4 (5)	7, 32, 12, 32, 7	90	K=8/945 O(h^7)	Milne ★
5 (6)	19, 75, 50, 50, 75, 19	288	K=275/12096 O(h^7)	
6 (7)	41, 216, 27, 272, 27, 216, 41	840	K=9/1400 O(h^9)	Weddle ★

$$n \text{ impar}: R_n(x)=Kh^{n+2}f^{(n+1)}(\xi_x)$$

$$n \text{ par}: R_n(x)=Kh^{n+3}f^{(n+2)}(\xi_x)$$

Fórmulas de Newton-Cotes

Las fórmulas de Newton-Cotes abiertas se expresan de la forma

$$I = \frac{(b-a)}{D}\sum_{i=0}^{n} c_i f(x_i) + R_n(x) \qquad I \simeq \frac{(b-a)}{D}\sum_{i=0}^{n} c_i f(x_i)$$

Con los coeficientes de la tabla:

$$h = \frac{(b-a)}{n+2}$$

n (puntos)	c_i	D	$\lvert R_n \rvert$	nombre	
0 (1)	1	1	K=1/3 $O(h^3)$	Punto medio	★
1 (2)	1, 1	2	K=3/4 $O(h^3)$		
2 (3)	2, -1, 2	3	K=14/45 $O(h^5)$		★
3 (4)	11, 1, 1, 11	24	K=95/144 $O(h^5)$		

$$\text{n impar}: R_n(x) = Kh^{n+2} f^{(n+1)}(\xi_x)$$

$$\text{n par}: R_n(x) = Kh^{n+3} f^{(n+2)}(\xi_x)$$

K constante

C. Vanhille

Fórmulas de Newton-Cotes

- **Programar las 3 fórmulas del Rectángulo en Matlab**
- **Programar la fórmula del Trapecio en Matlab**
- **Programar la fórmula de Simpson 1/3 en Matlab**

Fórmulas de Newton-Cotes

- **El comando trapz(x,f) aplica la fórmula del Trapecio; servirá para validar el algoritmo programado correspondiente (y también Ix calculado con @(x))**

```
>> x=0:0.01:1;
f=exp(x);
I=trapz(x,f)
I =
   1.7183
>> funcf=@(x) exp(x)
funcf =
   @(x)exp(x)
>> Ix=integral(funcf,0,1)
Ix =
   1.7183

>> clear
x=-2:0.01:2;
f=x.^2;
I=trapz(x,f)
I =
   5.3334
>> funcf=@(x) x.^2
funcf =
   @(x)x.^2
>> Ix=integral(funcf,-2,2)
Ix =
   5.3333
```

C. Vanhille

Cuadratura gaussiana

- **Son fórmulas exactas para funciones polinómicas de grado 2n+1**
  - Teorema. La condición necesaria y suficiente para que la fórmula de integración numérica construida sobre un soporte de n+1 puntos sea exacta de grado 2n+1 es que los puntos verifiquen $\int_a^b \prod_{i=0}^{n}\left(x - x_i\right) x^k dx = 0 \quad k = 0, 1, \cdots, n$
  - Teorema. No existe ninguna fórmula de integración numérica construida sobre un soporte de n+1 puntos que sea exacta de grado 2n+2
  - Teorema. Existe un único soporte $\{x_i\}$ de n+1 puntos tal que la fórmula de integración numérica construida sobre este soporte sea exacta de grado 2n+1. Además $\left\{x_i\right\} \in \left[a, b\right]$

Cuadratura gaussiana

- **Las fórmulas de integración gaussiana se expresan en el intervalo [-1,1] de la forma siguiente**

$$\mathbf{I = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx \simeq \sum_{i=0}^{n} c_i f(x_i)}$$

Cuadratura gaussiana

- n=0 (1 punto) en [-1,1] $$I=\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \simeq \sum_{i=0}^{0} c_i f(x_i)$$
- Exacto para polinomios de grado 2n+1=1 → con f(x)=1, x

$$\begin{cases} I=\int_{-1}^{1} 1\,dx = \sum_{i=0}^{0} c_i 1 = c_0 1 \\ I=\int_{-1}^{1} x\,dx = \sum_{i=0}^{0} c_i x_i = c_0 x_0 \end{cases} \quad \begin{cases} \left[x\right]_{-1}^{1} = c_0 \\ \left[\dfrac{x^2}{2}\right]_{-1}^{1} = c_0 x_0 \end{cases} \quad \begin{cases} 2 = c_0 \\ 0 = c_0 x_0 \end{cases} \quad \begin{cases} c_0 = 2 \\ x_0 = 0 \end{cases}$$

$$I=\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \simeq 2f(0)$$

Cuadratura gaussiana

$$I=\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \simeq \sum_{i=0}^{1} c_i f(x_i)$$

- n=1 (2 puntos) en [-1,1]
- Exacto para polinomios de grado 2n+1=3 → con f(x)=1, x, x^2, x^3

$$\begin{cases} I=\int_{-1}^{1} 1\,dx=\sum_{i=0}^{1} c_i 1 = c_0 1 + c_1 1 \\ I=\int_{-1}^{1} x\,dx=\sum_{i=0}^{1} c_i x_i = c_0 x_0 + c_1 x_1 \\ I=\int_{-1}^{1} x^2\,dx=\sum_{i=0}^{1} c_i x_i^2 = c_0 x_0^2 + c_1 x_1^2 \\ I=\int_{-1}^{1} x^3\,dx=\sum_{i=0}^{1} c_i x_i^3 = c_0 x_0^3 + c_1 x_1^3 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \left[x\right]_{-1}^{1} = c_0 + c_1 \\ \left[\dfrac{x^2}{2}\right]_{-1}^{1} = c_0 x_0 + c_1 x_1 \\ \left[\dfrac{x^3}{3}\right]_{-1}^{1} = c_0 x_0^2 + c_1 x_1^2 \\ \left[\dfrac{x^4}{4}\right]_{-1}^{1} = c_0 x_0^3 + c_1 x_1^3 \end{cases}$$

Cuadratura gaussiana

$$\begin{cases} 2 = c_0 + c_1 \\ 0 = c_0 x_0 + c_1 x_1 \\ \dfrac{2}{3} = c_0 x_0^2 + c_1 x_1^2 \\ 0 = c_0 x_0^3 + c_1 x_1^3 \end{cases} \quad \cdots \textbf{puntos y pesos de Gauss} \quad \begin{cases} c_0 = 1 \\ c_1 = 1 \\ x_0 = \dfrac{-1}{\sqrt{3}} \\ x_1 = \dfrac{1}{\sqrt{3}} \end{cases}$$

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx \simeq 1f\left(\frac{-1}{\sqrt{3}}\right) + 1f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

Cuadratura gaussiana

- Alternativa n=1 (2 puntos) en [-1,1]

$$\int_{-1}^{1}\prod_{i=0}^{1}\left(x-x_i\right)x^k dx=0 \quad k=0,1$$

$$\begin{cases} k=0 \ \displaystyle\int_{-1}^{1}\left(x-x_0\right)\left(x-x_1\right)1dx=0 \\ k=1 \ \displaystyle\int_{-1}^{1}\left(x-x_0\right)\left(x-x_1\right)xdx=0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{-1}^{1}\left(x^2-\left(x_0+x_1\right)x+x_0x_1\right)dx=0 \\ \displaystyle\int_{-1}^{1}\left(x^3-\left(x_0+x_1\right)x^2+x_0x_1x\right)dx=0 \end{cases}$$

C. Vanhille

Cuadratura gaussiana

$$\begin{cases} \left[\dfrac{x^3}{3} - \dfrac{(x_0+x_1)}{2}x^2 + x_0x_1x\right]_{-1}^{1} = 0 \\ \left[\dfrac{x^4}{4} - \dfrac{(x_0+x_1)}{3}x^3 + \dfrac{x_0x_1}{2}x^2\right]_{-1}^{1} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_0x_1 = \dfrac{-1}{3} \\ \dfrac{-2}{3}(x_0+x_1) = 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} \left(x_0 = \dfrac{-1}{\sqrt{3}}; x_1 = \dfrac{1}{\sqrt{3}}\right) \\ \left(x_0 = \dfrac{1}{\sqrt{3}}; x_1 = \dfrac{-1}{\sqrt{3}}\right) \end{cases}$$

Puesto que $x_0<x_1$, $\left(x_0 = -1/\sqrt{3}; x_1 = 1/\sqrt{3}\right)$

Con las ecuaciones de antes para f(x)=1, x → c_0 y c_1

$$\begin{cases} 2 = c_0 + c_1 \\ 0 = c_0\dfrac{-1}{\sqrt{3}} + c_1\dfrac{1}{\sqrt{3}} \end{cases} \qquad \begin{cases} 2 = c_0 + c_1 \\ 0 = -c_0 + c_1 \end{cases} \qquad (c_0 = 1; c_1 = 1)$$

C. Vanhille

Cuadratura gaussiana

- Si seguimos añadiendo puntos, obtenemos la tabla de puntos y pesos de Gauss para el intervalo [-1,1]

n	x_i	c_i
0	0	2
1	-0,5773502691 0,5773502691	1 1
2	-0,7745966692 0 0,7745966692	0,5555555556 0,8888888889 0,5555555556
3	-0,8611363116 -0,3399810436 0,3399810436 0,8611363116	0,3478548451 0,6521451548 0,6521451548 0,3478548451
4	-0,9061798459 -0,5384693101 0 0,5384693101 0,9061798459	0,2369268850 0,4786286705 0,5688888889 0,4786286705 0,2369268850

C. Vanhille

Cuadratura gaussiana

- **Para deducir los puntos y pesos de Gauss en el intervalo [a,b] a partir de la tabla dada en [-1,1]:**

$$x_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x_{i[-1,1]} \quad i = 0,\cdots,n$$

$$c_i = \frac{b-a}{2} c_{i[-1,1]} \quad i = 0,\cdots,n$$

Integrales impropias
Integración múltiple

- Para el cálculo de integrales impropias, se aplican fórmulas de Newton-Cotes o de Gauss a las integrales definidas, y posteriormente se efectúa el límite adecuado, por ejemplo: $\lim_{b \to +\infty} (I)$

  $$\lim_{\varepsilon \to 0^+} (I)$$

- Aplicando el teorema de Fubini, se pueden calcular integrales múltiples empleando fórmulas de Newton-Cotes o de Gauss en cada una de las direcciones (integrales simples)

Bibliografía

- Análisis numérico, Burden R. L., Faires J. D., International Thomson Editores, 1998.
- Métodos numéricos para ingenieros, Chapra S. C., Canale R. P., McGraw-Hill, 2015.
- Análisis numérico y visualización gráfica con Matlab, Nakamura S., Pearson Education, 1997.
- Modélisation numérique en mécanique: introduction et mise en pratique, Vanhille C., Lavie A., Campos-Pozuelo C., Hermès Science Publications / Lavoisier, 2007.
- Métodos numéricos con Matlab, Mathews J. H., Fink K. D., Prentice Hall, 2000.