Tema 2 - Operaciones matemáticas básicas

Integración numérica

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

16 de marzo de 2017

Contenido

1. Integración numérica
   - Problema inicial
   - Introducción
   - Fórmulas de Newton-Cotes
   - Regla del trapecio
   - Error en la regla del trapecio
   - Regla extendida del trapecio
   - Regla recursiva del trapecio
   - Ejercicio

Contenido

Contenido

Problema inicial

Dada la función $f(x)$, queremos calcular

$$\int_a^b f(x)dx$$

Introducción

La integración numérica (también conocida como cuadratura) es un procedimiento con mayor precisión que la diferenciación numérica.

La cuadratura aproxima el valor de la integral definida

$$\int_a^b f(x)dx$$

mediante la suma

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

donde las *abscisas nodales* x_i y los pesos A_i dependen de una regla en particular usada para la cuadratura.

Todas las reglas de cuadratura se dividen en dos grupos:

1. Fórmulas de Newton-Cotes.
2. Fórmulas de Cuadraturas Gaussianas.

Fórmulas de Newton-Cotes

Estas fórmulas se caracterizan por usar un espaciamiento uniforme y constante en las abscisas, aquí se consideran los métodos del trapecio y la regla de Simpson.

Son útiles si $f(x)$ se ha evaluado en intervalos iguales; dado que las fórmulas Newton-Cotes se basan en una interpolación local, se requiere de una porción del dominio para ajustarla al polinomio.

Consideremos la integral definida

$$\int_a^b f(x)dx$$

Dividimos el intervalo de integración $[a, b]$ en n intervalos de igual longitud $h = (b-a)/n$, y hacemos que las abscisas sean $x_0, x_1, \ldots, x_n$.

Aproximación polinomial de $f(x)$

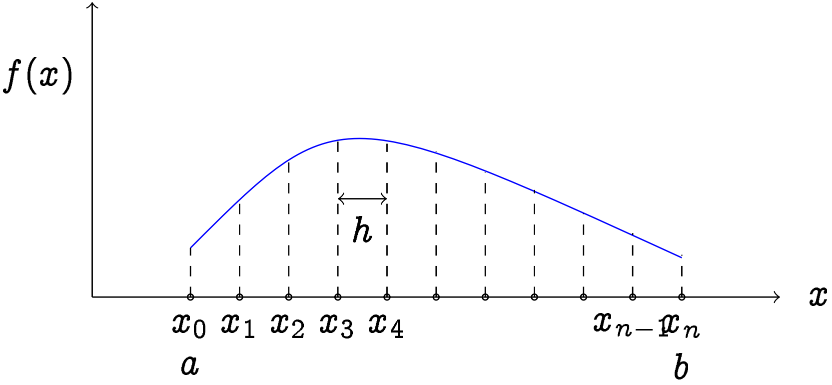


Figura (1): División de $[a, b]$ en n intervalos de igual longitud.

Ahora aproximamos $f(x)$ con un polinomio de orden n que intersecta todos los nodos. La expresión para el polinomio de Lagrange es:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \mathcal{L}_i(x)$$

donde $\mathcal{L}_i(x)$ son las funciones definidas en el tema de interpolación.

Por tanto, un aproximación a la integral es

$$I = \int_a^b P_n(x)dx = \sum_{i=0}^{n} \left[f(x_i) \int_a^b \mathcal{L}_i(x)dx \right] = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

donde

$$A_i = \int_a^b \mathcal{L}_i dx, \qquad i = 0, 1, \ldots, n$$

Las ecuaciones

$$I = \int_a^b P_n(x)dx = \sum_{i=0}^{n} \left[f(x_i) \int_a^b \mathcal{L}_i(x)dx \right] = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

Las ecuaciones

$$I = \int_a^b P_n(x)dx = \sum_{i=0}^{n} \left[f(x_i) \int_a^b \mathcal{L}_i(x)dx \right] = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

se conocen como las fórmulas de Newton-Cotes. Siendo los casos:

1. $n = 1$, Regla del trapecio.

Las ecuaciones

$$I = \int_a^b P_n(x)dx = \sum_{i=0}^{n} \left[f(x_i) \int_a^b \mathcal{L}_i(x)dx \right] = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

se conocen como las fórmulas de Newton-Cotes. Siendo los casos:

1. $n = 1$, Regla del trapecio.
2. $n = 2$, Regla de Simpson.

Las ecuaciones

$$I = \int_a^b P_n(x)dx = \sum_{i=0}^{n} \left[f(x_i) \int_a^b \mathcal{L}_i(x)dx \right] = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

se conocen como las fórmulas de Newton-Cotes. Siendo los casos:

1. $n = 1$, Regla del trapecio.
2. $n = 2$, Regla de Simpson.
3. $n = 3$, Regla de Simpson de $3/8$.

La más importante es la regla del trapecio, ya que se puede combinar con la extrapolación de Richardson, en un algoritmo eficiente llamado: Integración de Romberg.

Regla del trapecio

De la expresión anterior, con $n = 1$ (un bloque), tenemos que

$$I = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

Para calcular A_0, estimamos primero el producto cardinal de la interpolación

$$l_0 = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x - b}{h}$$

Por tanto:

$$A_0 = \frac{1}{h}\int_a^b (x - b)dx = \frac{1}{2h}(b - a)^2 = \frac{h}{2}$$

Luego para el valor de A_1, hacemos lo mismo:

$$l_1 = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x - a}{h}$$

resulta ser que

$$A_1 = \frac{1}{h}\int_a^b (x - a)dx = \frac{1}{2h}(b - a)^2 = \frac{h}{2}$$

Fórmula para la regla del trapecio

Sustituyendo los dos elementos para encontrar el valor de la integral:

$$I = [f(a) + f(b)]\,\frac{h}{2}$$

que resulta ser la regla del trapecio, y representa el área del trapecio que se muestra en la siguiente figura (1).

Regla del trapecio

Esquemáticamente el valor de la integral es el área I debajo de la recta.

$$I = [f(a) + f(b)]\,\frac{h}{2}$$

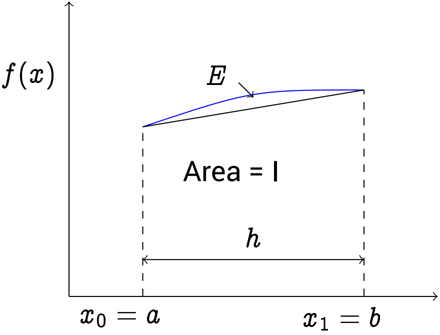


Figura (2): E representa el error debido a la aproximación entre la función y la interpolación lineal.

Error en la regla del trapecio

El error viene dado por

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

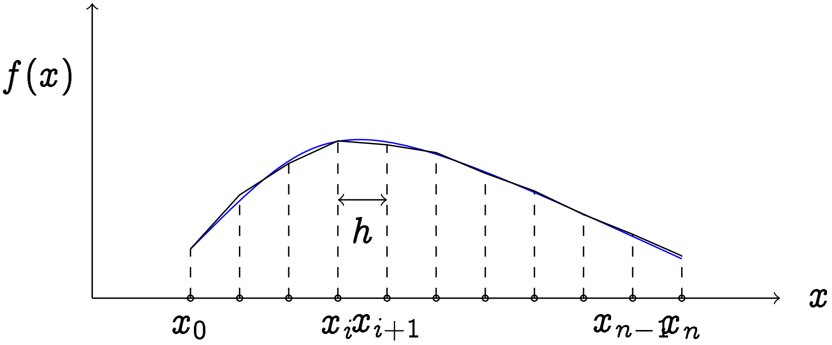
que es diferencia entre el área debajo de la curva de $f(x)$ y el la integral obtenida.

Integrando el error de interpolación:

$$
\begin{aligned}
E =& \frac{1}{2!} \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)\ f''(\xi)\ dx \\
=& \frac{1}{2}\ f''(\xi) \int_a^b (x - a)(x - b)\ dx = \\
=& -\frac{1}{12}\ (b - a)^3\ f''(\xi) \\
=& -\frac{h^3}{12}\ f''(\xi)
\end{aligned}
$$

Regla extendida del trapecio

En la práctica la regla del trapecio se usa con una división en el dominio. La siguiente figura muestra la región $[a, b]$ dividida en n bloques, de longitud h.



La función $f(x)$ se integrará con una aproximación lineal en cada panel. De la regla del trapecio, sabemos que para el i-ésimo panel:

$$I_i = [f(x_i) + f(x_{i+1})]\frac{h}{2}$$

El área total debajo de la curva está representada por la suma de todas las I_i, es decir, la integral en el dominio $[a, b]$:

$$I \simeq \sum_{i=0}^{n-1} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)] \frac{h}{2}$$

y ésta corresponde a la regla del extendida del trapecio.

Regla recursiva del trapecio

Sea I_k la integral evaluada con la regla compuesta del trapecio, usando 2^{k-1} bloques.

Con la notación $H = b - a$, de la regla extendida del trapecio, para $k = 1, 2, 3$

Para $k = 1$, es decir, 1 bloque:

$$I_1 = [f(a) + f(b)]\frac{H}{2}$$

Para $k = 2$, es decir, 2 bloques:

$$\begin{aligned} I_2 &= \left[f(a) + 2f\left(a + \frac{H}{2}\right) + f(b) \right] \frac{H}{4} \\ &= \frac{1}{2} I_1 + f\left(a + \frac{H}{2}\right) \frac{H}{2} \end{aligned}$$

Para $k = 3$, es decir, 4 bloques:

$$\begin{aligned} I_3 = & \left[f(a) + 2f\left(a + \frac{H}{4}\right) + 2f\left(a + \frac{H}{2}\right) + \right. \\ & \left. + 2f\left(a + \frac{3H}{4}\right) + f(b) \right] \frac{H}{8} \\ = & \frac{1}{2} I_2 \left[f\left(a + \frac{H}{4}\right) + f\left(a + \frac{3H}{4}\right) \right] \frac{H}{4} \end{aligned}$$

Regla recursiva del trapecio

Para un $k > 1$ arbitrario, tenemos

$$I_k = \frac{1}{2} I_{k-1} + \frac{H}{2^{k-1}} \sum_{i=1}^{2^{k-2}} f\left[a + \frac{(2i-1)H}{2^{k-1}}\right], \quad k = 2, 3, \ldots$$

Otra forma de la misma ecuación es:

$$I(h) = \frac{1}{2} I(2h) + h \sum f(x_{\text{nuevo}})$$

Ejercicio

El cuerpo de revolución que se muestra en la siguiente figura, se obtiene al girar la curva dada por

$$y = 1 + \left(\frac{x}{2}\right)^2, \quad 0 \leq x \leq 2$$

en torno al eje x. Calcula el volumen, usando la regla extendida del trapecio con

$$N = 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128$$

El valor exacto de la integral es $I = 11.7286$. Evalúa el error relativo de la integral para cada N.

Figura del problema a resolver

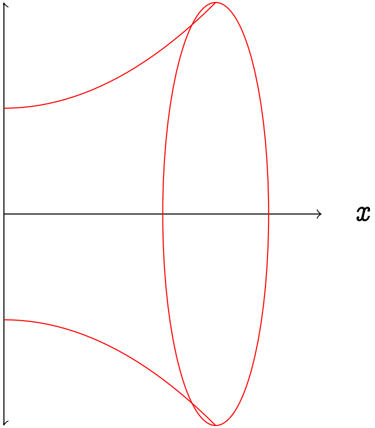


Figura (3): Sólido de revolución que se obtiene al girar sobre el eje x la función $y = 1 + \left(\frac{x}{2}\right)^2$

Resolviendo el problema

El volumen del sólido de revolución viene dado por

$$I = \int_0^2 f(x) dx$$

donde

$$f(x) = \pi \left(1 + \left(\frac{x}{2} \right)^2 \right)^2$$

El valor de $f(x)$ nos devuelve el área del círculo que se genera por el sólido, y el volumen se obtiene al multiplicar el ancho del intervalo por esa área.

Usamos la regla extendida del trapecio

De la regla extendida del trapecio, sabemos que

$$I \simeq \sum_{i=0}^{n-1} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)] \frac{h}{2}$$

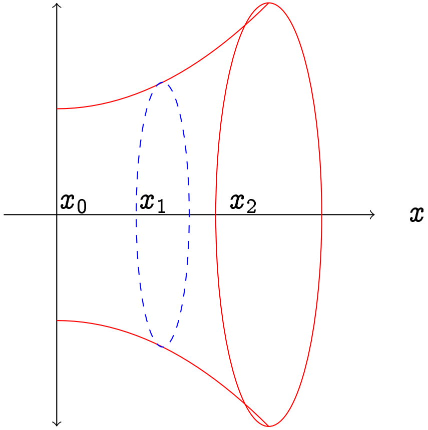


Figura (4): Para $N = 2$ se obtienen dos bloques del sólido de revolución.

Por lo que necesitamos crear en `python`:

1. Una función que evalúe a $f(x)$ en los puntos $f(x_i)$ con $i = 0, 1, 2$.

Por lo que necesitamos crear en `python`:

1. Una función que evalúe a $f(x)$ en los puntos $f(x_i)$ con $i = 0, 1, 2$.
2. Otra función para calcular el área de cada bloque que se genera.

Para evaluar $f(x)$

```
def funcion(x):
    return np.pi*(1 + ( x/2)**2)**2
```

Para evaluar la integral en $[a, b]$

```
def trapecios(f,a,b,n):
    h = (b - a)/float(n)
    x = a
    suma = 0
    for i in range(1,n):
        x = x + h
        suma = suma + funcion(x)
    return (h/2.)*(funcion(a) + funcion(b) + 2*suma
    )
```

Usamos un arreglo para dividir en bloques el intervalo

```
paneles = np.array([2,4,8,16,32,64,128])
```

Revisa que la manera en indicarle a `python`cómo queremos los valores en pantalla, ocupa el nuevo formato para cadenas y números, revisa la documentación oficial aquí.

Necesitarás una conexión a internet, el navegador se redirigirá a la página de la documentación oficial de `python`.

Mostramos la salida en terminal

```python
print ('{:^3} \t {:^8} \t {:^11} \t {:^18} '.format('i', 'h', 'Integral', 'Error' ))
print ('{}'.format("-"*55))
for i in paneles:
    h = 2./i
    print ('{:=3} \t {:01.5f} \t {:01.9f} \t {:01.8e}'.format(i, h, trapecios(funcion(i),0,2,i),(abs(11.7286-trapecios(funcion(i),0,2,i)))/11.7286))
```

i	h	$Integral$	$Error$
2	1.00000	12.762720155	$8.81708094e-02$
4	0.50000	11.989593838	$2.22527700e-02$
8	0.25000	11.794011288	$5.57707550e-03$
16	0.12500	11.744971839	$1.39589033e-03$
32	0.06250	11.732702989	$3.49827695e-04$
64	0.03125	11.729635215	$8.82641387e-05$
128	0.01562	11.728868236	$2.28702562e-05$

Contenido

Librería Scipy

SciPy (Scientific Python) es un conjunto de algoritmos matemáticos y funciones de conveniencia construidos de tal manera que extienden a numpy de `python`.

Se le proporciona al usuario un poder significativo con el uso de comandos de alto nivel y clases, para la manipulación y visualización de datos.

Organización de Scipy

SciPy está organizada en sub-paquetes que cubren diferentes áreas de computación científica. Estos se resumen en la siguiente tabla:

Subpaquete	Descripción
`cluster`	Algortimos para clusters
`constants`	Constantes físicas y matemáticas
`fftpack`	Rutinas para la Transformada Rápida de Fourier
`integrate`	Integración y EDO
`interpolate`	Interpolación y uso de splines
`io`	Rutinas de entrada y salida

Subpaquete	Descripción
`linalg`	Algebra lineal
`ndimage`	Procesamiento N-dimensional de imagenes
`odr`	Regresión de distancias ortogonales
`optimize`	Optimizació y rutinas para encontrar raíces
`signal`	Procesamiento de señales
`sparse`	Matrices sparse y rutinas asociadas
`spatial`	Estructura de datos espaciales
`special`	Funciones especiales
`stats`	Distribuciones estadísticas
`weave`	Integración con C/C++

Integración (`scipy.integrate`)

El subpaquete `scipy.integrate` proporciona varias técnicas de integración.

`quad`	Integración en general.
`dblquad`	Integración doble en general.
`tplquad`	Integración triple en general.
`fixed-quad`	Integración de f(x) usando cuadraturas gaussianas de orden n.
`quadrature`	Integra con tolerancia dada usando cuadratura gaussiana.
`romberg`	Integra una función mediante la integración de Romberg.

Ejemplo del uso de `integrate.quad`

Integrar en el intervalo $[0, 4]$ la función

$$\int_0^4 f(x)dx = \int_0^4 x^2 dx$$

```
>>> from scipy import integrate
>>> x2 = lambda x: x**2
>>> integrate.quad(x2,0.,4.)
(21.333333333333336, 2.3684757858670001e-13)
```

El problema del volumen con `integrate.quad`

Para comparar el resultado que nos da el módulo `scipy.integrate.quad`, veamos cómo implementar la solución del problema del sólido de revolución.

```
from numpy import pi
from scipy.integrate import quad

def f(x):
    return pi*(1+(x/2)**2)**2

print quad(f,0,2)
```

El problema del volumen con `integrate.quad`

Para comparar el resultado que nos da el módulo `scipy.integrate.quad`, veamos cómo implementar la solución del problema del sólido de revolución.

```
from numpy import pi
from scipy.integrate import quad

def f(x):
    return pi*(1+(x/2)**2)**2

print quad(f,0,2)
```

El valor posterior al resultado de la integral es el error asociado al algoritmo que usa `integrate.quad`, para que no lo reporte en el resultado, basta con indicar que queremos sólo el primer elemento de la lista:

```
print quad(f,0,2)[0]
```