Cuadratura con intervalos

Luis Eduardo Ramírez Montoya

Temas Selectos de Física Computacional III
Facultad de Ciencias
Universidad Nacional Autónoma de México

7 de diciembre de 2022

Problema

- El objetivo es utilizar los conceptos que hemos desarrollado durante el curso para calcular rigurosamente la integral

$$I = \int_a^b f(x)\, dx. \tag{1}$$

- En otras palabras, buscamos un intervalo $\mathcal{I}$ tal que

$$I = \int_a^b f(x)\, dx \in \mathcal{I}. \tag{2}$$

Método simple

- La forma más inmediata de calcular I es dividir el dominio de integración en un montón de subintervalos

$$[a, b] = [x_0, x_1] \cup [x_1, x_2] \cup \cdots \cup [x_{N-1}, x_N]. \tag{3}$$

  y sumar

$$I \in \sum_{i=1}^{N} \mathrm{diam}([x_{i-1}, x_i]) F([x_{i-1}, x_i]), \tag{4}$$

  donde $\mathrm{diam}([a, b]) = b - a$ y F es la extensión intervalar de f.
- Ver la ecuación (5.14) de Tucker, W. (2011). Validated Numerics. Estados Unidos: Princeton University Press.

Método avanzado

- Para mejorar las cotas podemos expandir f en una serie de Taylor de orden n

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n-1} f_k(\tilde{x})(x - \tilde{x})^k + f_n(\zeta_x)(x - \tilde{x})^n, \tag{5}$$

donde $\tilde{x} \in \boldsymbol{x}$.

- Podemos encerrar el residuo en (5) mediante

$$\epsilon_n = \operatorname{mag}(F_n(\boldsymbol{x}) - f_n(\tilde{x})), \tag{6}$$

donde $\operatorname{mag}([a, b]) = \text{máx}\{|a|, |b|\}$.

- Entonces

$$f(x) \in \sum_{k=0}^{n} f_k(\tilde{x})(x - \tilde{x})^k + [-\epsilon_n, \epsilon_n]|x - \tilde{x}|^n. \tag{7}$$

Método avanzado

- A continuación, integramos

$$
\begin{aligned}
\int_{\tilde{x}-r}^{\tilde{x}+r} f(x)\ dx &\in \int_{\tilde{x}-r}^{\tilde{x}+r} \left[\sum_{k=0}^{n} f_k(\tilde{x})(x-\tilde{x})^k + [-\epsilon_n, \epsilon_n]|x-\tilde{x}|^n \right]\ dx \\
&= \sum_{k=0}^{n} f_k(\tilde{x}) \int_{-r}^{r} x^k\ dx + [-\epsilon_n, \epsilon_n] \int_{-r}^{r} |x|^n\ dx \\
&= \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} f_{2k}(\tilde{x}) \int_{-r}^{r} x^{2k}\ dx + [-\epsilon_n, \epsilon_n] \int_{-r}^{r} |x|^n\ dx \\
&= 2\left(\sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} f_{2k}(\tilde{x}) \frac{r^{2k+1}}{2k+1} + [-\epsilon_n, \epsilon_n] \frac{r^{n+1}}{n+1} \right).
\end{aligned} \tag{8}
$$

Método avanzado

- Al último renglón de (8) le llamaremos el término de Riemann de $\boldsymbol{x}$

$$T_n(f, \boldsymbol{x}) = 2\left(\sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} f_{2k}(\tilde{x})\frac{r^{2k+1}}{2k+1} + [-\epsilon_n, \epsilon_n]\frac{r^{n+1}}{n+1}\right). \quad (9)$$

- Entonces, la integral está contenida en

$$\int_a^b f(x)\, dx \in \sum_{i=1}^{N} T_n(f, \boldsymbol{x}_i). \quad (10)$$

- Ver la ecuación (5.18) de Tucker, W. (2011). Validated Numerics. Estados Unidos: Princeton University Press.

División del dominio

- Uniforme:

$$\boldsymbol{x}_i = \left[a + \frac{i-1}{N}(b-a), a + \frac{i}{N}(b-a) \right]. \tag{11}$$

- Adaptativa: Bisectamos el dominio recursivamente hasta que cada término de Riemann sea menor que cierta tolerancia τ.

$$\begin{aligned} & T_n(f, [a, b]) \\ & T_n(f, [a, x_1]) + T_n(f, [x_1, b]) \\ & T_n(f, [a, x_1]) + T_n(f, [x_1, x_2]) + T_n(f, [x_2, b]) \\ & \vdots \end{aligned} \tag{12}$$

Redondeo

- Simple:

$$\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} = \left[\texttt{prevfloat}\left(\underline{x}, \underline{y}\right), \texttt{nextfloat}\left(\overline{x}, \overline{y}\right)\right], \tag{13}$$

  por ejemplo

$$[0, 1] + [0, 1] = [-5.0 \times 10^{-324}, 2.0000000000000004]. \tag{14}$$

- Avanzado: la paquetería `RoundingEmulator.jl` permite tener cotas más ajustadas en ciertos casos

$$\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} = \left[\texttt{add\_down}\left(\underline{x}, \underline{y}\right), \texttt{add\_up}\left(\overline{x}, \overline{y}\right)\right], \tag{15}$$

  por ejemplo

$$[0, 1] + [0, 1] = [0.0, 2.0]. \tag{16}$$

Integral sencilla

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sin(x)\ dx = 0. \tag{17}$$

- Método simple uniforme ($N = 1,000$):

$$[-0.003142, 0.003142]\,.$$

- Método avanzado uniforme ($N = 1,000$; $n = 20$):

$$[-9.1635, 8.9559] \times 10^{-14}.$$

- Método avanzado adaptativo ($\tau = 1 \times 10^{-8}$; $n = 20$):

$$[-5.1428, 5.1428] \times 10^{-16}.$$

Integral intermedia

$$\int_0^{\pi} e^x(1+\sin(x))\,dx = \frac{3e^{\pi}-1}{2} = 34.211038949168903\ldots \quad (18)$$

- Método simple uniforme ($N = 1,000$):

$$[34.1324, 34.2898]\,; \quad \mathrm{diam}(\mathcal{I}) = 0.1574.$$

- Método avanzado uniforme ($N = 1,000$; $n = 20$):

$$34.2110389491\,[67175, 70586]\,; \quad \mathrm{diam}(\mathcal{I}) = 3.4106 \times 10^{-12}.$$

- Método avanzado adaptativo ($\tau = 1 \times 10^{-8}$; $n = 20$):

$$34.211038949168\,[84, 98]\,; \quad \mathrm{diam}(\mathcal{I}) = 1.4212 \times 10^{-13}.$$

Integral avanzada

$$\int_0^1 x^{-x}\, dx = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-n} = 1.29128599706... \qquad (19)$$

- Método simple uniforme ($N = 1,000$):

$$[1.2899, \infty]\,.$$

- Método avanzado uniforme ($N = 1,000$; $n = 15$):

$$[-\infty, \infty]\,.$$

- Método avanzado adaptativo ($\tau = 1 \times 10^{-8}$; $n = 15$):

$$1.29128599\,[695, 717]\,; \quad \mathrm{diam}(\mathcal{I}) = 2.1491 \times 10^{-10}.$$

Redondeo simple vs avanzado

$$\int_{1/2}^{1} 1 + x^5 - x^{10} \; dx = \frac{12,913}{22,528} = 0.57319779829545454\ldots \quad (20)$$

- Método avanzado adaptativo ($\tau = 1 \times 10^{-8}$; $n = 20$) con redondeo simple:

$$0.5731977982954\,[31, 56]\,; \quad \mathrm{diam}(\mathcal{I}) = 2.8866 \times 10^{-15}.$$

- Método avanzado adaptativo ($\tau = 1 \times 10^{-8}$; $n = 20$) con redondeo avanzado:

$$0.57319779829545\,4\,[5, 6]\,; \quad \mathrm{diam}(\mathcal{I}) = 1.11022 \times 10^{-16}.$$

Integrales impropias

- Los métodos que hemos presentado hasta ahora funcionan cuando a y b son finitos, pero ¿cómo podemos calcular integrales impropias?
- Propuesta: supongamos que queremos acotar

$$\int_a^{\infty} f(x)\ dx. \tag{21}$$

Calculamos

$$\int_a^{x_1} f(x)\ dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\ dx \in \mathcal{I}_1 + \cdots \mathcal{I}_n \tag{22}$$

hasta que

$$\operatorname{diam}(\mathcal{I}_n) < \tau. \tag{23}$$

Integrales impropias

- Entonces, para calcular $\mathcal{I}$ necesitamos acotar

$$\int_{x_n}^{\infty} f(x)\ dx. \tag{24}$$

- Para que la integral (21) converga, $f(x)$ debe tender a cero conforme $x \longrightarrow \infty$

$$\epsilon_n = \text{mag}(\mathcal{I}_n). \tag{25}$$

- Así

$$\int_{a}^{\infty} f(x)\ dx \in \mathcal{I}_1 + \cdots + \mathcal{I}_n + [-\epsilon_n, \epsilon_n]. \tag{26}$$

Integrales impropias

$$\int_0^{\infty} \sqrt{x}e^{-x}\ dx = \frac{\pi}{2} = 0.8862269254... \tag{27}$$

$$0.8862269\,[157, 280]\,; \quad \mathrm{diam}(\mathcal{I}) = 1.2257 \times 10^{-8}.$$

$$\int_0^{\infty} x^{z-1}e^{-x}\ dx\Big|_{z=7/5} = \Gamma(z)\Big|_{z=7/5} = 0.887263817503... \tag{28}$$

$$0.88726381\,[0117, 9668]\,; \quad \mathrm{diam}(\mathcal{I}) = 9.5499 \times 10^{-9}.$$