UNIVERSIDAD TECNICA FEDERICO SANTA MARIA

DEPARTAMENTO DE INFORMÁTICA

INF 285 - Computación Científica
Ingeniería Civil Informática

14: Integración Numérica

Definición 1 (Integración Numérica o Cuadratura)

Es la obtención de la constante $c \in \mathbb{R}$, o una aproximación de c, de una integral definida

$$c = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$

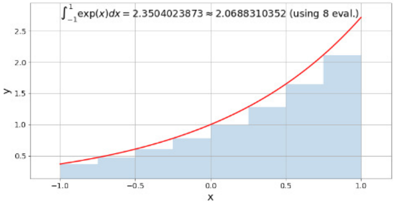
utilizando algún método numérico

Una función es integrable cuando las sumas izquierdas y derechas de Riemann convergen al mismo valor c:

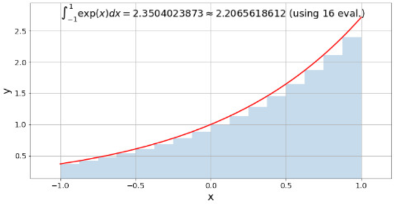
$$c = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$

Por la izquierda:

$$c = \sum_{k=0}^{m-1} f(x_k)(x_{k+1} - x_k) + E_L$$



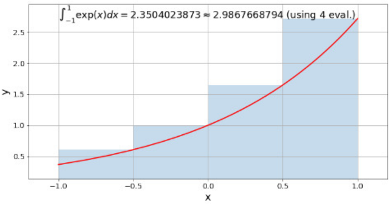
$m = 8$, $c \approx 2{,}06883$.



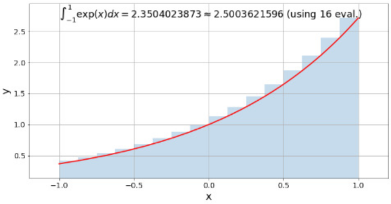
$m = 16$, $c \approx 2{,}20656$.

Por la derecha:

$$c = \sum_{k=0}^{m-1} f(x_{k+1})(x_{k+1} - x_k) + E_R$$



$m = 4$, $c \approx 2{,}98677$.



$m = 16$, $c \approx 2{,}50036$.

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx f\left(\frac{x_0 + x_1}{2}\right)(x_1 - x_0)$$

El error viene dado por:

$$E_{PM} = \frac{h^3}{24} f^{''}(\xi)$$

donde $\xi \in [x_0, x_1]$.

Sea $f(x)$ una función con segunda derivada continua definida en $[x_0, x_1]$. Sean los valores $y_0 = f(x_0)$ e $y_1 = f(x_1)$. Consideremos el polinomio interpolador de Lagrange de grado 1 $P_1(x)$ que pasa por los puntos (x_0, y_0) y (x_1, y_1):

$$\begin{aligned} f(x) &= y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!} f''(\xi) \\ &= P(x) + E(x) \end{aligned}$$

donde $\xi \in [x_0, x_1]$

Utilizando lo anterior, integramos a ambos lados obteniendo lo siguiente:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{x_0}^{x_1} P(x)\,\mathrm{d}x + \int_{x_0}^{x_1} E(x)\,\mathrm{d}x$$

Tomemos la primera parte:

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_1} P(x)\,\mathrm{d}x &= \int_{x_0}^{x_1} y_0\,\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\,\mathrm{d}x + \int_{x_0}^{x_1} y_1\,\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\,\mathrm{d}x \\ &= y_0\,\frac{h}{2} + y_1\,\frac{h}{2} = h\,\frac{(y_0+y_1)}{2}\end{aligned}$$

donde $h = (x_1 - x_0)$

Tomemos ahora la segunda parte:

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_1} E(x)\,\mathrm{d}x &= \frac{1}{2!}\int_{x_0}^{x_1}(x-x_0)(x-x_1)f''(\xi)\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{f''(\xi)}{2}\int_{x_0}^{x_1}(x-x_0)(x-x_1)\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{f''(\xi)}{2}\int_{0}^{h} u(u-h)\,\mathrm{d}u = -\frac{h^3}{12}f''(\xi)
\end{aligned}$$

Luego, obtenemos la **regla del trapecio**:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{2}\,(y_0+y_1) - \frac{h^3}{12}f''(\xi)$$

donde $\xi \in [x_0, x_1]$.

De igual forma tomando el polinomio interpolador de Lagrange de segundo grado, se puede obtener la siguiente aproximación:

$$\begin{aligned} f(x) &= y_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + y_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \\ &\quad + y_2 \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{3!} f'''(\xi) \\ &= P(x) + E(x) \end{aligned}$$

donde $\xi \in [x_0, x_2]$.

Integrando se obtiene:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{x_0}^{x_2} P(x)\,\mathrm{d}x + \int_{x_0}^{x_2} E(x)\,\mathrm{d}x$$

Tomemos la primera parte:

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_2} P(x)\,\mathrm{d}x &= \int_{x_0}^{x_2} y_0\,\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\,\mathrm{d}x \\
&\quad + \int_{x_0}^{x_2} y_1\,\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\,\mathrm{d}x \\
&\quad + \int_{x_0}^{x_2} y_2\,\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\,\mathrm{d}x \\
&= y_0\,\frac{h}{3} + y_1\,\frac{4h}{3} + y_2\,\frac{h}{3} = h\,\frac{(y_0 + 4\,y_1 + y_2)}{3}
\end{aligned}$$

La segunda parte del error viene dada por:

$$\int_{x_0}^{x_2} E(x)\,\mathrm{d}x = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{3!} f'''(\xi) = -\frac{h^5}{90} f^{(\mathrm{iv})}(\xi)$$

Luego se obtiene la **regla de Simpson**:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{3}\,\left(y_0 + 4\,y_1 + y_2\right) - \frac{h^5}{90} f^{(\mathrm{iv})}(\xi) \tag{1}$$

donde $\xi \in [x_0, x_2]$.

Ejemplo 1

Aplicar la regla del Trapecio y la regla de Simpson para aproximar:

$$\int_1^{1.5} \log(x)\,\mathrm{d}x$$

y encuentre una cota superior para el error de la aproximación.

La regla del Trapecio estima que:

$$\int_1^{1.5} \log(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{h}{2}\,(y_0 + y_1) = \frac{0.5}{2}\,(\log(1) + \log(1.5))$$

$$= \frac{\log(1.5)}{4} \approx 0.101366$$

El error para la regla del Trapecio viene dado por $-h^3 f''(\xi)/12$, donde $\xi \in [1, 1.5]$. Dado que $f''(x) = -1/x^2$, la magnitud del error es a lo más:

$$-\frac{h^3\, f''(\xi)}{12} = \frac{h^3}{12\,\xi^2} = \frac{0.5^3}{12\,\xi^2} \leq \frac{0.125}{12} \approx 0.01042$$

En otras palabras, la regla del Trapecio indica que:

$$\int_1^{1.5} \log(x)\,\mathrm{d}x = 0.101366 \pm 0.01042$$

La regla de Simpson estima que:

$$\begin{aligned}\int_1^{1.5} \log(x)\,\mathrm{d}x &\approx \frac{h}{3}\,(y_0 + 4\,y_1 + y_2)\\ &= \frac{0.25}{3}\,(\log(1) + 4\,\log(1.25) + \log(1.5))\\ &\approx 0.108169\end{aligned}$$

El error para la regla de Simpson viene dado por $-h^5 f^{(\mathrm{iv})}(\xi)/90$, donde $\xi \in [1, 1.5]$. Dado que $f^{(\mathrm{iv})}(x) = -6/x^4$, la magnitud del error es a lo más:

$$-\frac{h^5\,f^{(\mathrm{iv})}(\xi)}{90} = \frac{6\,h^5}{90\,\xi^4} = \frac{6\,(0.25)^5}{90\,\xi^4} \leq \frac{6\,(0.25)^5}{90} \approx 0.00007$$

En otras palabras, la regla de Simpson indica que:

$$\int_1^{1.5} \log(x)\,\mathrm{d}x = 0.108169 \pm 0.00007$$

Las reglas del Trapecio y Simpson están limitadas a ser aplicadas en un intervalo. Sin embargo, una integral se puede aplicar sobre varios subintervalos y sumarlos. Por lo tanto, se puede aplicar sobre cada intervalo alguna regla de integración numérica y luego sumar. Esta estrategia se denomina **integración numérica compuesta**.

Consideremos que un subintervalo $[a, b]$ se subdivide en una grilla con puntos equiespaciados:

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{m-2} < x_{m-1} < x_m = b$$

donde $h = x_{i+1} - x_i$ para cada $i = 0, ..., m - 1$

Aplicamos la regla del Trapecio a cada subintervalo:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{2}(f(x_i) + f(x_{i+1})) - \frac{h^3}{12} f''(\xi_i) \tag{2}$$

Si sumamos todas las aproximaciones se tiene que:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{2}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_i)\right] - \sum_{i=0}^{m-1} \frac{h^3}{12} f''(\xi_i) \tag{3}$$

El término del error puede ser escrito como:

$$\sum_{i=0}^{m-1} \frac{h^3}{12} f''(\xi_i) = \frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{m-1} f''(\xi_i) = \frac{h^3}{12}\, m\, f''(\xi)$$

Dado que $mh = (b-a)$, el término del error es $(b-a)h^2 f''(\xi)/12$. Luego la **regla del Trapecio Compuesta** viene dada por:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{2}\left[y_0 + y_m + 2\sum_{i=1}^{m-1} y_i\right] - \frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi) \qquad (4)$$

donde $h = (b-a)/m$ y $\xi \in [a, b]$.

Para la regla de Simpson se sigue la misma estrategia. Consideremos la grilla de puntos equiespaciados:

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{2m-2} < x_{2m-1} < x_{2m} = b$$

donde $h = x_{i+1} - x_i$. Luego, en cada subintervalo $[x_{2i}, x_{2i+2}]$, para $i = 0, ..., m-1$, de longitud $2h$ se aplica la aproximación:

$$\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{3}\left[f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2})\right] - \frac{h^5}{90} f^{(\mathrm{iv})}(\xi_i) \tag{5}$$

Si sumamos todas las aproximaciones se tiene que:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \;=\; \frac{h}{3}\left[f(a)+f(b)+4\sum_{i=1}^{m} f(x_{2i-1})+2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_{2i})\right] - \sum_{i=0}^{m-1}\frac{h^5}{90}f^{(\mathrm{iv})}(\xi_i)$$

El término del error puede ser escrito como:

$$\sum_{i=0}^{m-1}\frac{h^5}{90}f^{(\mathrm{iv})}(\xi_i)=\frac{h^5}{90}\sum_{i=0}^{m-1}f^{(\mathrm{iv})}(\xi_i)=\frac{h^5}{90}\,m\,f^{(\mathrm{iv})}(\xi)$$

Dado que $m(2h)=(b-a)$, el término del error es $(b-a)h^4 f''(\xi)/180$.

Luego la **regla de Simpson Compuesta** viene dada por:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{3}\left[y_0 + y_{2m} + 4\sum_{i=1}^{m} y_{2i-1} + 2\sum_{i=1}^{m-1} y_{2i}\right] - \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(\mathrm{iv})}(\xi) \tag{6}$$

donde $\xi \in [a, b]$.

Ejemplo 2

Utilizando 4 subintervalos aproxime

$$I = \int_0^2 \exp(x)\,\mathrm{d}x$$

por medio de las reglas del Trapecio y de Simpson compuestas.

Para la regla del Trapecio compuesta sobre $[0,2]$ se tiene que $h = 1/2$. La aproximación entonces es:

$$\begin{aligned} I &\approx \frac{\frac{1}{2}}{2}\left[y_0 + y_4 + 2\sum_{i=1}^{3} y_i\right] \\ &= \frac{1}{4}\left[\exp(0) + \exp(2) + 2\left(\exp(0.5) + \exp(1) + \exp(1.5)\right)\right] \\ &\approx 6.52161011 \end{aligned}$$

Y el error es a lo más

$$\frac{(b-a)h^2}{12}|f''(\xi)| = \frac{\frac{1}{2}}{12}|\exp(\xi)| \leq \frac{\exp(2)}{24} \approx 0.307877$$

La regla de Simpson compuesta sobre $[0,2]$ considera $h = 1/4$. La aproximación entonces es:

$$\begin{aligned} I &\approx \frac{\frac{1}{4}}{3}\left[y_0 + y_8 + 4\sum_{i=1}^{4} y_{2i-1} + 2\sum_{i=1}^{3} y_{2i}\right] \\ &= \frac{1}{12}\left[\exp(0) + \exp(2)\right. \\ &\quad + 4\left(\exp(0.25) + \exp(0.75) + \exp(1.25) + \exp(1.75)\right) \\ &\quad \left. + 2\left(\exp(0.5) + \exp(1) + \exp(1.5)\right)\right] \\ &\approx 6.38919373 \end{aligned}$$

Y el error es a lo más

$$\frac{(b-a)h^4}{180}|f^{(\text{iv})}(\xi)| = \frac{\frac{1}{2^7}}{180}|\exp(\xi)| \leq \frac{\exp(2)}{23040} \approx 0.00032071$$

Si lo comparamos con el valor real de la integral:

$$\int_0^2 \exp(x)\,\mathrm{d}x = \exp(2) - \exp(0) = 6.38905609$$

Podemos notar que la aproximación con la regla de Simpson compuesta alcanza 3 dígitos de precisión.

La **Cuadratura Gaussiana** es un método de integración numérica que logra mejor precisión que las aproximaciones anteriores.

Para explicar cómo funciona, comencemos con la siguiente definición:

Definición 2

El conjunto de funciones no nulas $\{p_0, ..., p_n\}$ *en el intervalo* $[a, b]$ *es* **ortogonal** *sobre* $[a, b]$ *si*

$$\int_a^b p_j(x)\, p_k(x)\, \mathrm{d}x = \begin{cases} 0 & j \neq k \\ \neq 0 & j = k \end{cases} \tag{7}$$

Revisemos los siguientes teoremas:

Teorema 1

Si $\{p_0, ..., p_n\}$ *es un conjunto ortogonal de polinomios sobre el intervalo* $[a, b]$, *donde el grado de* $p_i = i$, *entonces* $\{p_0, ..., p_n\}$ *es una base para el espacio vectorial de polinomios de grado a lo más* n *sobre* $[a, b]$.

Teorema 2

Si $\{p_0, ..., p_n\}$ *es un conjunto ortogonal de polinomios sobre el intervalo* $[a, b]$ *y si el grado de* $p_i = i$, *entonces* p_i *tiene* i *raíces distintas en el intervalo* (a, b).

Ejemplo 3

Encontrar un conjunto de 3 polinomios ortogonales en el intervalo $[-1, 1]$

Comencemos con $p_0(x) = 1$ y $p_1(x) = x$. Se puede observar que:

$$\int_{-1}^{1} 1 \cdot x \, \mathrm{d}x = 0$$

por lo tanto, son ortogonales.

Sigamos con $p_2(x) = x^2$:

$$\int_{-1}^{1} p_0(x) \cdot x^2 \, \mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} x^2 \, \mathrm{d}x = \frac{2}{3} \neq 0$$

Luego no son ortogonales.

Ajustemos $p_2(x) = x^2 + c$:

$$\int_{-1}^{1} p_0(x) \cdot \left(x^2 + c\right) \, \mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} \left(x^2 + c\right) \, \mathrm{d}x = \frac{2}{3} + 2c = 0$$

por lo tanto $c = -1/3$. Se invita al estudiante a comprobar que $p_2(x) = x^2 - 1/3$ es ortogonal con $p_1(x)$.

Luego, el conjunto de 3 polinomios $\{1, x, x^2 - 1/3\}$ es ortogonal sobre $[-1, 1]$.

Los 3 polinomios del ejemplo anterior, pertenecen al conjunto descubierto por **Legendre**.

El conjunto de los **polinomios de Legendre**

$$p_i(x) = \frac{1}{2^i\, i!}\frac{\mathrm{d}^i}{\mathrm{d}x^i}\left[\left(x^2-1\right)^i\right] \tag{8}$$

para $0 \leq i \leq n$ es ortogonal sobre $[-1, 1]$.

Por el Teorema 2 el polinomio n-ésimo de Legendre tiene n raíces $x_1, ..., x_n$ sobre $[-1, 1]$.

La Cuadratura Gaussiana de una función es simplemente una combinación lineal de funciones evaluadas en las raíces de Legendre.

La **Cuadratura Gaussiana** viene dada por:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} c_i\, f(x_i) \tag{9}$$

donde

$$c_i = \int_{-1}^{1} L_i(x)\,\mathrm{d}x, \qquad i = 1, ..., n \tag{10}$$

y x_i son las raíces del polinomio de Legendre de grado n.

A continuación se muestran las raíces de los polinomios de Legendre para $n = 2, 3, 4$:

n	roots x_i	coefficients c_i
2	$-\sqrt{1/3} = -0.57735026918963$	$1 = 1.00000000000000$
	$\sqrt{1/3} = 0.57735026918963$	$1 = 1.00000000000000$
3	$-\sqrt{3/5} = -0.77459666924148$	$5/9 = 0.55555555555555$
	$0 = 0.00000000000000$	$8/9 = 0.88888888888888$
	$\sqrt{3/5} = 0.77459666924148$	$5/9 = 0.55555555555555$
4	$-\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}} = -0.86113631159405$	$\frac{90-5\sqrt{30}}{180} = 0.34785484513745$
	$-\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}} = -0.33998104358486$	$\frac{90+5\sqrt{30}}{180} = 0.65214515486255$
	$\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}} = 0.33998104358486$	$\frac{90+5\sqrt{30}}{180} = 0.65214515486255$
	$\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}} = 0.86113631159405$	$\frac{90-5\sqrt{30}}{180} = 0.34785484513745$

Ejemplo 4

Aproximar

$$\int_{-1}^{1} \exp\left(-x^2\right)\, \mathrm{d}x$$

utilizando Cuadratura Gaussiana.

Para $n = 2$, la aproximación sería:

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} \exp\left(-x^2\right)\, \mathrm{d}x &\approx c_1\, f(x_1) + c_2\, f(x_2) \\ &= 1 \cdot f\left(-\sqrt{1/3}\right) + 1 \cdot f\left(\sqrt{1/3}\right) \approx 1.43306262\end{aligned}$$

Para $n = 3$, la aproximación sería:

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} \exp\left(-x^2\right)\,\mathrm{d}x &\approx c_1\, f(x_1) + c_2\, f(x_2) + c_3\, f(x_3) \\
&= \frac{5}{9}\, f\left(-\sqrt{3/5}\right) + \frac{8}{9}\, f\left(0\right) + \frac{5}{9}\, f\left(\sqrt{3/5}\right) \\
&\approx 1.498679
\end{aligned}$$

Se invita al estudiante a que realice la aproximación con $n = 4$.

Aproximación de integrales en el intervalo $[a, b]$.

Se utiliza la substitución $t = (2x - a - b)/(b - a)$.

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{(b-a)}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{(b-a)t}{2} + \frac{(b+a)}{2}\right)\mathrm{d}t$$

Ejemplo 5

Aproximar la integral

$$\int_1^2 \log(x)\,\mathrm{d}x$$

utilizando cuadratura Gaussiana con $n = 4$.