

Integración numérica

Juan Hirschmann - jhirschmann@fi.uba.ar

1. Introducción

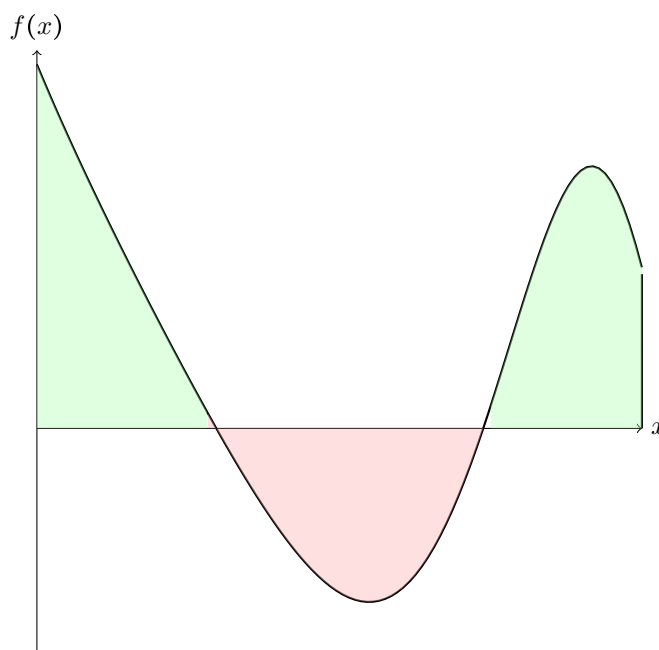
En su definición, las integrales analíticas implican realizar una sumatoria infinita de áreas infinitesimales. En la práctica, dado que la precisión de una computadora es finita, resulta imposible el cálculo de integrales por definición. Por ello, resulta necesario poder aproximar las integrales utilizando distintos métodos. A continuación, se estudiarán algunos de ellos aplicados a un caso concreto.

2. Ejemplo

Se desea obtener el valor de la siguiente integral:

$$I = \int_0^2 1 + \frac{7}{1+x} \cos(e^x) dx \quad (1)$$

Resolver esta integral es equivalente a obtener el área por debajo del gráfico de la función:



En las siguientes secciones se aproximará este área utilizando 5 métodos distintos. Luego, se buscará interpretar los resultados obtenidos y obtener conclusiones respecto a las cuestiones operativas de cada método.

2.1. Tabla de datos para los métodos que requieran nodos equiespaciados

Se tomaron muestras de la función $f(x)$ utilizando un paso de $h = 0,5$. Así, se obtuvo la siguiente tabla que se utilizará para resolver la integral por los métodos de rectángulos, trapecios, Simpson y Romberg.

x	f(x)
0	4,78
0,5	0,637
1	-2,19
1,5	0,360
2	2,04

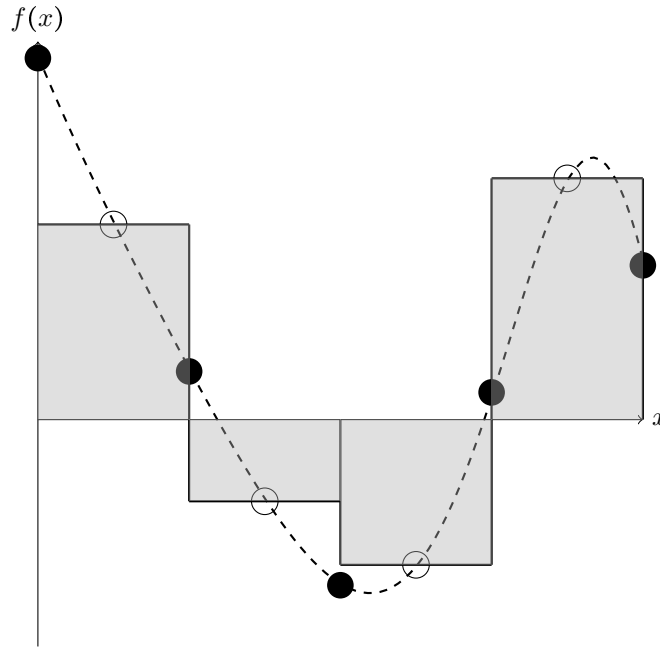
2.2. Primer método: regla del rectángulo o de punto medio

La regla del rectángulo es el método más sencillo e intuitivo de aproximar una integral. Este método pretende calcular la integral por definición pero a incrementos finitos y utilizando la función en el punto intermedio entre pares de puntos

sucesivos. Es decir:

$$I := \lim_{\Delta \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n \Delta_i f(x_i) \approx \sum_{i=2}^n h f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) \quad (2)$$

Es posible dar una interpretación gráfica al método. En ella la integral se calcula como el área de un rectángulo de altura $f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right)$ y base h :



En primera instancia, se observa que el método tiene un error asociado grande. Utilizando la expresión mencionada y la función analítica, se aproxima la integral de la siguiente manera:

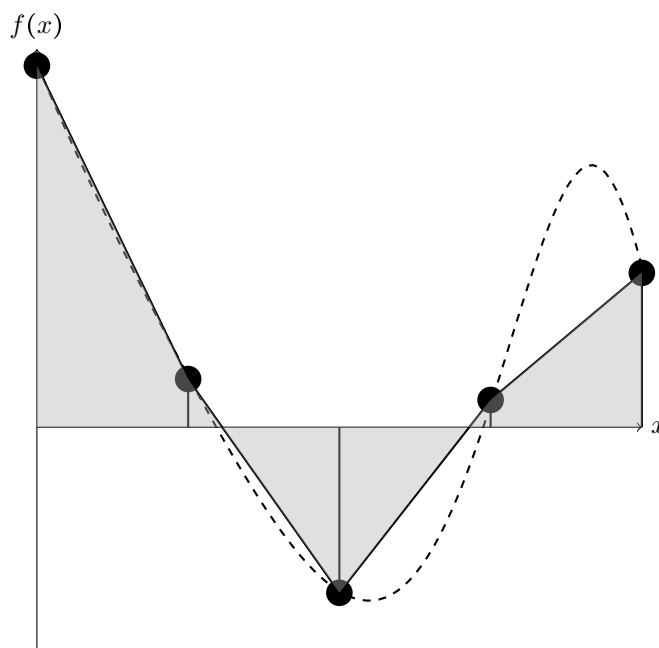
$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^n h f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) &= h f(0,25) + h f(0,75) + h f(1,25) + h f(1,75) \\ I_{rect} &= 0,5(2,58 - 1,08 - 1,92 + 3,19) = 1,385 \end{aligned} \quad (3)$$

Como principal desventaja de este método, se debe evaluar la función en los puntos intermedios a los tabulados. Por este motivo, es necesario contar con la función analítica

2.3. Segundo método: regla del trapecio

Por su parte, la regla del trapecio resulta un poco más refinada que el caso anterior. En este caso, se realiza una interpolación lineal entre pares de puntos sucesivos para luego calcular el área por debajo de estos trapecios. De esta forma, aproxima la integral de según:

$$I_{trap} = \frac{h}{2} (f(x_1) + f(x_n)) + \sum_{i=2}^{n-1} h f(x_i) \quad (4)$$



Cuando las funciones a integrar son altamente alineales u oscilan aplicar este método puede resultar muy inexacto. A continuación, se presenta el resultado y su cálculo:

$$\sum_{i=1}^5 h_i f(x_i) = \frac{h}{2} f(0) + h(f(0,5) + f(1) + f(1,5)) + \frac{h}{2} f(2) \quad (5)$$

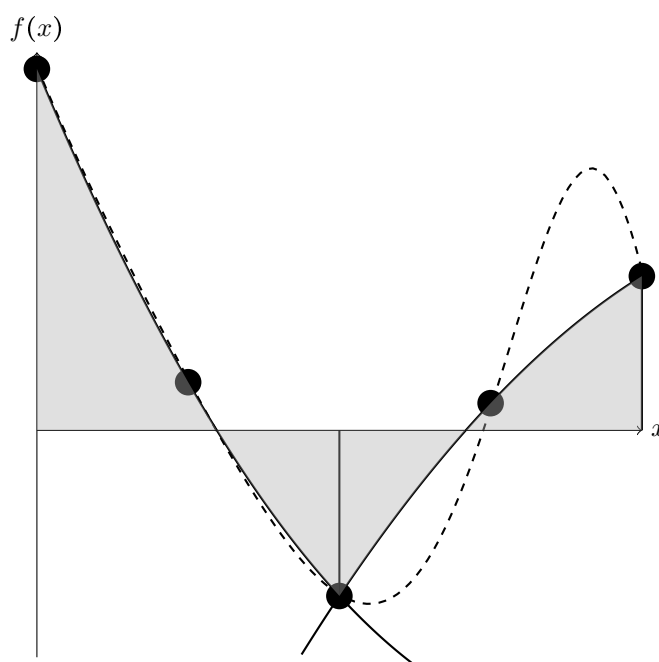
$$I_{trap} = 0,25 \times 4,78 + 0,5 \times (0,637 - 2,19 + 0,360) + 0,25 \times 2,04 = 1,109$$

2.4. Tercer método: regla de Simpson

El método de Simpson consiste en interpolar de a triadas de puntos consecutivos con un polinomio de orden 2. Por este motivo, la cantidad de segmentos, N , en los que se divide el intervalo de integración debe ser par. Luego, la integral se estima según:

$$I_{simp} = \frac{h}{3} (f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} f(x_{2i-1}) + f(x_n)) \quad (6)$$

De esta forma, la integral resulta el área por debajo de la función interpolante:



Al evaluar la expresión con los datos del ejemplo, se alcanza el resultado final:

$$\begin{aligned}
 & \frac{h}{3} (f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} f(x_{2i-1}) + f(x_n)) \\
 & \frac{0,5}{3} (f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{\frac{4}{2}-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^{\frac{4}{2}} f(x_{2i-1}) + f(x_n)) \\
 & \frac{0,5}{3} (f(x_0) + 2 \times (f(x_2)) + 4 \times (f(x_1) + f(x_3)) + f(x_4)) \\
 & \frac{0,5}{3} (4,78 + 2 \times (-2,19) + 4 \times (0,637 + 0,360) + 2,04) = 1,071
 \end{aligned} \tag{7}$$

2.5. Cuarto método: Cuadratura gaussiana

La cuadratura de Gauss es un método de relacionado con el espacio vectorial de funciones polinómicas y su ortogonalidad. Por este motivo, a diferencia de los métodos anteriores, resulta difícil visualizarlo de manera gráfica.

A grandes rasgos, el método busca sobrestimar el área lo mismo que la subestima y, de esa manera, compensar los errores. Para hacer ello, es necesario realizar un cambio de variable de forma tal que el recinto de integración sea el intervalo $[-1, 1]$. De manera genérica, este cambio de variables es el siguiente:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 \phi(\mu)d\mu \implies \begin{cases} x = \frac{b-a}{2}\mu + \frac{a+b}{2} \\ \frac{b-a}{2}d\mu = dx \end{cases} \tag{8}$$

Aplicando ello al problema en cuestión se obtiene la siguiente relación:

$$\int_0^2 1 + \frac{7}{1+x} \cos(e^x) dx = \int_{-1}^1 1 + \frac{7}{2+\mu} \cos(e^{\mu+1}) d\mu \tag{9}$$

Una vez realizado ello, se aproxima la integral como una sumatoria de la función, $\phi(\mu)$, evaluada en las raíces de los polinomios de Legendre y ponderada por los coeficientes de Gauss:

$$\int_{-1}^1 \phi(\mu)d\mu \approx \sum_{i=0}^{n-1} C_i \phi(\mu_i) \implies \begin{cases} \mu_i : \text{Raíces polinomio de Legendre de orden } n-1 \\ C_i : \text{Coeficientes de Gauss} \end{cases} \tag{10}$$

Luego, para obtener las raíces a estos polinomios, se recurre a la siguiente tabla:

Points	Function Arguments
2	$x_0 = -0.577350269$ $x_1 = 0.577350269$
3	$x_0 = -0.774596669$ $x_1 = 0.0$ $x_2 = 0.774596669$
4	$x_0 = -0.861136312$ $x_1 = -0.339981044$ $x_2 = 0.339981044$ $x_3 = 0.861136312$
5	$x_0 = -0.906179846$ $x_1 = -0.538469310$ $x_2 = 0.0$ $x_3 = 0.538469310$ $x_4 = 0.906179846$
6	$x_0 = -0.932469514$ $x_1 = -0.661209386$ $x_2 = -0.238619186$ $x_3 = 0.238619186$ $x_4 = 0.661209386$ $x_5 = 0.932469514$

Figura 1: Raíces de los polinomios de Legendre para grado 2 a 6 [Chapra - *Numerical methods for engineers*]

Como características de las raíces de los polinomios de Legendre, las raíces siempre presentan simetría respecto al eje y . Además, cuando n es impar una raíz necesariamente debe ser cero.

Aplicado al ejercicio se obtiene que:

$$\begin{aligned}\mu_0 &= -0,775 \\ \mu_1 &= 0 \\ \mu_2 &= 0,775\end{aligned}\tag{11}$$

Una vez obtenidos los puntos de Gauss, resta obtener los coeficientes. Dado que la cuadratura de Gauss integra de manera exacta polinomios de grado $2n - 1$ y que los coeficientes son iguales para toda función, entonces para $n = 3$ las siguientes relaciones son válidas:

$$\begin{aligned}\int_{-1}^1 1dx &= C_0 \times 1 + C_1 \times 1 + C_2 \times 1 = 2 \\ \int_{-1}^1 xdx &= C_0 \times \mu_0 + C_1 \times \mu_1 + C_2 \times \mu_2 = 0 \\ \int_{-1}^1 x^2dx &= C_0 \times \mu_0^2 + C_1 \times \mu_1^2 + C_2 \times \mu_2^2 = \frac{2}{3}\end{aligned}\tag{12}$$

De esta forma, se define un sistema de tres ecuaciones y tres incógnitas. Luego, se resuelve dicho sistema para obtener lo siguiente:

$$\begin{aligned}C_0 &= 0,556 \\ C_1 &= 0,889 \\ C_2 &= 0,556\end{aligned}\tag{13}$$

Así, se procede a resolver la integral:

$$\begin{aligned}I_{gauss} &= \sum_{i=0}^n C_i \phi(\mu_i) \\ \sum_{i=0}^{n-1} C_i \phi(\mu_i) &= C_0 \times \left[1 + \frac{7}{2 + \mu_0} \cos(e^{\mu_0+1})\right] + C_1 \times \left[1 + \frac{7}{2 + \mu_1} \cos(e^{\mu_1+1})\right] + C_2 \times \left[1 + \frac{7}{2 + \mu_2} \cos(e^{\mu_2+1})\right] \\ I_{gauss} &= 0,556 \times 2,79 + 0,889 \times (-2,19) + 0,556 \times 3,34 = 1,461\end{aligned}\tag{14}$$

Para poder realizar una comparación más justa con los otros métodos, se calculó la integral por cuadratura de Gauss utilizando 5 nodos. En este caso, los valores μ_i se toman de la tabla. Luego, se resuelve el siguiente sistema:

$$\begin{aligned}\int_{-1}^1 1dx &= 2 = \sum_0^4 C_i \\ \int_{-1}^1 xdx &= 0 = \sum_0^4 C_i \mu_i \\ \int_{-1}^1 x^2dx &= \frac{2}{3} = \sum_0^4 C_i \mu_i^2 \\ \int_{-1}^1 x^3dx &= 0 = \sum_0^4 C_i \mu_i^3 \\ \int_{-1}^1 x^4dx &= \frac{2}{5} = \sum_0^4 C_i \mu_i^4\end{aligned}\tag{15}$$

Así, se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}I_{gauss} &= 0,237\phi(\mu_0) + 0,479\phi(\mu_1) + 0,567\phi(\mu_2) + 0,479\phi(\mu_3) + 0,237\phi(\mu_4) \\ I_{gauss} &= 0,237 \times 3,91 + 0,479 \times 0,929 + 0,567 \times (-2,19) + 0,479 \times 0,843 + 0,237 \times 3,18 = 1,283\end{aligned}\tag{16}$$

2.6. Quinto método: Romberg

El método de Romberg consiste en utilizar la fórmula de extrapolación de Richardson para poder obtener resultados de alta calidad utilizando resultados obtenidos por métodos de menor precisión. Para poder observar las bondades del método, se calculó, utilizando la regla del trapecio, cuatro veces la integral pero con distintos pasos:

Paso	I_{trap}	$O(2)$
1	1,220	
0,5	1,109	
0,25	1,247	
0,125	1,279	

Recordando la expresión para la extrapolación de Richardson:

$$N_j(h) = N_{j-1}\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{N_{j-1}\left(\frac{h}{2}\right) - N_{j-1}(h)}{2^{j-1} - 1} \quad (17)$$

En donde j indica el orden del método y $j - 1$ el orden del método anterior. Luego, se la aplica a las integrales obtenidas a paso 1 y 0,5:

$$N_4(h) = 1,109 + \frac{1,109 - 1,220}{2^2 - 1} = 1,072 \quad (18)$$

Nuevamente se la aplica a las integrales obtenidas a paso 0,5 y 0,25

$$N_4(h) = 1,247 + \frac{1,247 - 1,109}{2^2 - 1} = 1,293 \quad (19)$$

Por último se calcula en los términos finales:

$$N_4(h) = 1,279 + \frac{1,279 - 1,247}{2^2 - 1} = 1,290 \quad (20)$$

De esta forma, se puede completar la tabla habiendo obtenido términos de mayor orden:

Paso	I_{trap}	$O(2)$	I_{Simp}	$O(4)$
1	1,220			
0,5	1,109		1,072	
0,25	1,247		1,293	
0,125	1,279		1,290	

Se observa que, al calcular I_{simp} de paso 0,5 calculada por extrapolación de Richardson coincide con aquella calculada utilizando el método. Por último, queda a voluntad del lector corroborar la siguiente tabla:

Paso	I_{trap}	$O(2)$	I_{Simp}	$O(4)$	I_{Romb}	$O(6)$	I_{Romb}	$O(8)$
1	1,220		-		-			
0,5	1,109		1,072		-			
0,25	1,247		1,293		1,308		-	
0,125	1,279		1,290		1,289		1,289	

3. Comparación de resultados

De manera analítica, se calculó la integral a 4 dígitos significativos:

$$I_{ref} = 1,286 \quad (21)$$

En el siguiente cuadro se comparan algunos de los resultados más relevantes obtenidos:

Método	Paso	Cantidad de puntos	Integral	Error absoluto
I_{ref}	0	∞	1,286	0,0005
I_{rect}	0,5	4	1,385	0,1
I_{trap}	0,5	5	1,109	0,2
I_{trap}	0,125	17	1,247	0,04
I_{simp}	0,5	5	1,071	0,3
I_{simp}	0,25	9	1,293	0,01
I_{romb}	0,125	9	1,289	0,003
I_{gauss}	-	3	1,461	0,2
I_{gauss}	-	5	1,283	0,003

Se puede observar que a medida que un aumento de la cantidad de puntos tomada reduce el error. Este efecto resulta más evidente para los métodos de orden alto, este es el caso de la cuadratura de Gauss. Este método, al evaluar la función en sólo 5 puntos, produce un mejor resultado que el método de los trapecios con 17 evaluaciones. La integral obtenida por cuadratura de Gauss es comparable con aquella obtenida por Romberg, aunque el segundo resulte más intenso computacionalmente.

4. Cuadro comparativo

Trapecios		Simpson	
Ventajas	Desventajas	Ventajas	Desventajas
Nodos pueden estar tabulados	$O(2)$ Nodos equiespaciados	$O(4)$ Nodos tabulados	La cantidad de segmentos debe ser par Nodos equiespaciados
Romberg		Gauss	
Ventajas	Desventajas	Ventajas	Desventajas
Mejora el orden de la integral	Necesita de varios resultados	Mínimo esfuerzo de cálculo Buena precisión	Cambio de variable Necesita de la función analítica