Integración numérica

Cálculo Numérico y Estadística
Grado en Química y Grado en Enología

J.L. Bravo

Curso 2021-2022

Planteamiento del problema

- Queremos calcular el valor de

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

  pero no existe una expresión analítica de la integral.

  - Por ejemplo, la capacidad calórica de un sólido es $\int_0^x \frac{t^3}{e^t - 1}dt$

- Disponemos de los valores

$$(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \dots (x_n, f(x_n)),\ \ x_0, \dots, x_n \in [a, b]$$

- La **integración numérica** es una herramienta que permite obtener valores aproximados de integrales definidas mediante los valores de la función en un conjunto de puntos.

Fórmulas de cuadratura

Denominamos **fórmula de cuadratura** a una expresión del tipo

$$Q[f] = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} \omega_i f(x_i)$$

- $x_0, x_1, \ldots, x_n$ son los **nodos de cuadratura**, que son puntos de $[a, b]$.
- Generalmente, $x_0 = a$, $x_n = b$
- Los nodos suelen estar equiespaciados
- $\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_n$ son los **pesos**.

El **error de truncamiento** de la fórmula es

$$E[f] = \int_a^b f(x)dx - Q[f]$$

Grado de precisión de una fórmula de cuadratura

El **grado de precisión** de la fórmula de cuadratura es el mayor número natural n de modo que $E[P] = 0$ para cualquier polinomio P de grado $\leq n$.

Las fórmulas de cuadratura de Newton-Cotes consisten en

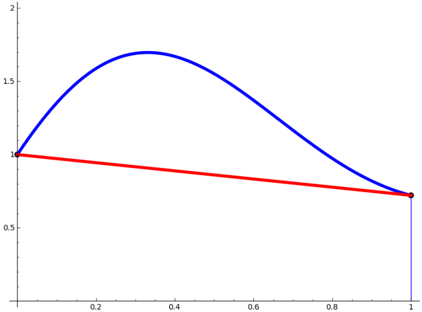
$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x)dx$$

donde P_n es el polinomio interpolador de los puntos

$$(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \ldots (x_n, f(x_n))$$

Así, el grado de precisión coincide con el grado del polinomio interpolador, n.

Regla del Trapecio



Aproximamos el área bajo la curva f mediante el área bajo la recta que interpola $(a, f(a))$ y $(b, f(b))$.

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))}$$

$$\boxed{Error = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)}$$

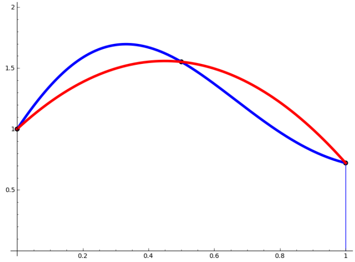
1. Regla del Trapecio

La recta que interpola a $(a, f(a))$ y $(b, f(b))$es:

$$P_1(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a)$$

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &\approx \int_a^b \left(f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a) \right) dx \\
&= f(a) \left[x \right]_a^b + \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \left[\frac{x^2}{2} - ax \right]_a^b \\
&= \frac{(b - a)}{2} (f(a) + f(b))
\end{aligned}$$

Regla de Simpson



Aproximamos el área bajo la curva f mediante el área bajo el polinomio interpolador de

$$(a, f(a)), (c, f(c)), (b, f(b))$$

siendo $c = \frac{a+b}{2}$ el punto medio del intervalo $[a, b]$.

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(c) + f(b))}$$

$$\boxed{Error = -\frac{(b-a)^5}{180 \cdot 2^4} f^{(4)}(\xi)}$$

Reglas Compuestas

Otra forma de aproximar el valor de

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

conociendo

$$(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \dots, (x_n, f(x_n))$$

es dividir el intervalo $[a, b]$ en subintervalos y aplicar una regla simple en cada uno de ellos:

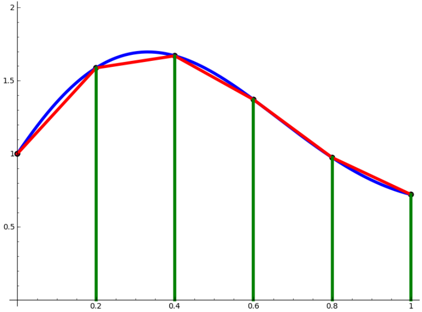
1. Si aplicamos la regla del trapecio simple en cada subintervalo, tenemos la regla del trapecio compuesta.
2. Si aplicamos la regla de Simpson en cada dos subintervalos, tendremos la regla de Simpson compuesta.

Regla del Trapecio Compuesta

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n))}$$

Y el error de cuadratura es

$$\boxed{E[f] = -\frac{f^{(2)}(\xi)}{12n^2}(b-a)^3,\ \xi \in [a,b].}$$



$$x_0 = a, x_i = a + ih, x_n = b$$

$$h = (b-a)/n$$

Aproximamos el área bajo la curva f mediante el área bajo el spline lineal interpolador de $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$,..., $(x_n, f(x_n))$

Ejemplo 8

Aproximemos la $\int_0^1 (1 + e^{-x}\sin(4x))dx$:

- Mediante el trapecio simple: Los nodos que tomamos son $x_0 = 0, x_1 = 1$, con $f(0) = 1,\ f(1) = 0.72158792$

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{2}(f(0) + f(1)) = 0.86079396$$

- Simpson: $x_0 = 0,\ x_1 = 0.5,\ x_2 = 1,$

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1/2}{3}(f(0) + 4f(0.5) + f(1)) = 1.32127583$$

Ejemplo 8

- Mediante el trapecio compuesto para los nodos

$$x_0 = 0, x_1 = 0.2, x_2 = 0.4, x_3 = 0.6, x_4 = 0.8, x_5 = 1$$

$h = 1/5$

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(x)dx &\approx \frac{1/5}{2}(f(0) + 2f(0.2) + 2f(0.4) + 2f(0.6) + 2f(0.8) + f(1)) \\ &= 1.29252451 \end{aligned}$$

El valor real, en este caso fácilmente calculable, es

$$\int_0^1 f(x)dx = \frac{21e - 4\cos 4 - \sin 4}{17e} = 1.30825060$$

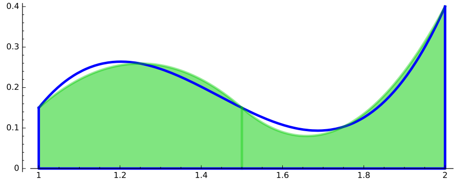
Regla de Simpson Compuesta

Dado $n = 2k$, $h = (b-a)/n$, tomamos $x_i = a + ih$, $0 \le i \le n$. Entonces

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{k-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=0}^{k-1} f(x_{2i+1}) + f(x_n)\right).}$$

Y el error de cuadratura es

$$\boxed{E[f] = -\frac{f^{(4)}(\xi)}{180n^4}(b-a)^5, \ \xi \in [a,b].}$$



Cuadratura adaptativa de Simpson

Vamos a denotar $S(f, a, b)$ la aproximación de $\int_a^b f(x)\,dx$ por el método de Simpson.

Queremos calcular la integral $\int_a^b f(x)\,dx$, con un error fijado E.

1. Calculamos las aproximaciones $S(f, a, b)$, $S(f, a, c)$, $S(f, c, b)$, con $c = (a+b)/2$.
2. Estimamos el error cometido por $E_1 = (S(f, a, c) + S(f, c, b) - S(f, a, b))/15$.
3. Si $abs(E_1) < E$, terminamos y la integral vale $S(f, a, c) + S(f, c, b) + E_1$.
4. En caso contrario, volvemos al primer paso y calculamos las integrales

$$\int_a^c f(x)\,dx, \quad \int_c^b f(x)\,dx,$$

cada una de ellas con error menor que $E/2$.

Ejemplo 8

Aproximemos la $\int_0^1 (1 + e^{-x}\sin(4x))dx$ con un error inferior a 0.0005.

1. Calculamos:

$$S(f,0,1) = 1.321276$$

$$S(f,0,0.5) = \frac{1/2-0}{6}(f(0) + 4f(0.25) + f(0.5)) = 0.764406$$

$$S(f,0.5,1) = \frac{1/2-0}{6}(f(0.5) + 4f(0.75) + f(1)) = 0.544979$$

2. Estimación del error:

$$E_1 = (S(f,0,0.5) + S(f,0.5,1) - S(f,0,1))/15 = -0.000792$$

3. Como $abs(E_1) > 0.0001$, debemos continuar, estimando

$$\int_0^{0.5} (1 + e^{-x}\sin(4x))dx, \ \int_{0.5}^{1} (1 + e^{-x}\sin(4x))dx$$

cada una con un error menor que 0.00025

$\int_0^{0.5}(1+e^{-x}\sin(4x))dx$ con error < 0.00025

1. Sabemos que $S(f,0,0.5) = 0.764406$. Calculamos:

$$S(f,0,0.25) = \frac{0.25}{6}(f(0) + 4f(0.125) + f(0.25)) = 0.347821$$

$$S(f,0.25,0.5) = \frac{0.25}{6}(f(0.25) + 4f(0.375) + f(0.5)) = 0.414547$$

2. Estimación del error:

$$E_2 = (S(f,0,0.25) + S(f,0.25,0.5) - S(f,0,0.5))/15 = -0.000136$$

3. Como $abs(E_2) < 0.00025$, la estimación de la integral es

$$\int_0^{0.5}(1+e^{-x}\sin(4x))dx \approx S(f,0,0.25) + S(f,0.25,0.5) + E_2 = 0.762232$$

$\int_{0.5}^{1}(1+e^{-x}\sin(4x))dx$ con error < 0.00025

1. Sabemos que $S(f,0.5,1) = 0.544979$. Calculamos:

$$S(f,0.5,0.75) = \frac{0.25}{6}(f(0.5)+4f(0.625)+f(0.75)) = 0.329147$$

$$S(f,0.75,1) = \frac{0.25}{6}(f(0.75)+4f(0.875)+f(1)) = 0.216806$$

2. Estimación del error:

$$E_3 = (S(f,0.5,0.75)+S(f,0.75,1)-S(f,0.5,1))/15 = 0.000065$$

3. Como $abs(E_3) < 0.00025$, la estimación de la integral es

$$\int_{0.5}^{1}(1+e^{-x}\sin(4x))dx \approx S(f,0.5,0.75)+S(f,0.75,1)+E_3 = 0.546018$$

Ejemplo 8

Finalmente,

$$
\begin{aligned}
\int_0^1 (1 + e^{-x}\sin(4x))dx &= \\
&= \int_0^{0.5} (1 + e^{-x}\sin(4x))dx + \int_{0.5}^1 (1 + e^{-x}\sin(4x))dx \\
&\approx 0.762232 + 0.546018 \\
&= 1.308250,
\end{aligned}
$$

muy cercano al valor real, que es 1.30825060.