Aplicaciones del Cálculo diferencial e integral

Integración numérica con Maxima

http://euler.us.es/~renato/

Renato Álvarez-Nodarse
Universidad de Sevilla

¿Por qué necesitamos la integración numérica?

Sea $f(x)$ una función continua definida en el intervalo $[a, b]$. Nuestro objetivo será encontrar fórmulas aproximadas para calcular la integral $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$.

En caso de conocer la primitiva $F(x)$ es evidente que podemos encontrar el valor exacto de la integral utilizando el Teorema fundamental del cálculo integral:

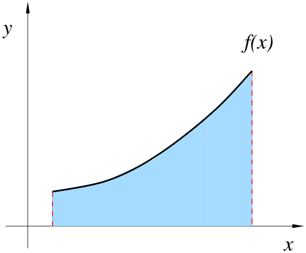
$$\int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a).$$

Sin embargo no siempre esto es posible.

Por ejemplo, para la función $f(x) = e^{-x^2}$ no existe ninguna primitiva que podamos escribir utilizando funciones elementales. ¿Cómo proceder?

Fórmula de los rectángulos

Aproximamos el área $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$ bajo la curva f por un rectángulo de base $b-a$ y altura $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$



$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \underbrace{\frac{(b-a)^2}{24}f''(\xi)}_{R(\xi)},\ \ \xi \in [a,b],$$

donde para el cálulo el error $R(\xi)$, asumimos que f tiene primera y segunda derivadas continuas en $[a,b]$

Fórmula de los rectángulos

Así, dividimos el intervalo $[a, b]$ en n puntos

$$[a, b] = [a, x_1] \cup [x_1, x_2] \cup \cdots \cup [x_{n-2}, x_{n-1}] \cup [x_{n-1}, b],$$

donde

$$x_k = a + \frac{b-a}{n} k, \quad n = 0, 1, 2, ..., n, \quad x_0 = a, x_n = b.$$

Entonces

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^{x_1} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{b} f(x)\,dx \quad \Rightarrow$$

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f\left(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}\right) + R(\xi),$$

$$|R(\xi)| \leq M \frac{(b-a)^2}{24 n^2}, \quad M = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|.$$

Ejemplo: $\int_0^1 x^2 dx$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f\left(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}\right)$$

Veamos como podemos implementar lo anterior con MAXIMA CAS. Definimos el intervalo $[a, b]$, el número de puntos en que vamos a dividir en intervalo y definimos la partición que usaremos:

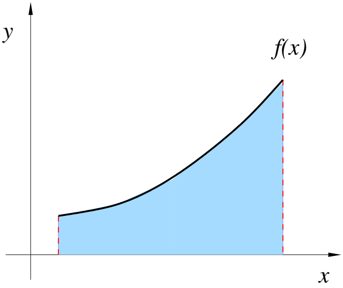
```
a:0; b:1; x[0]:a; Nu:20;
x[n]:=x[0]+n*(b-a)/Nu;
```

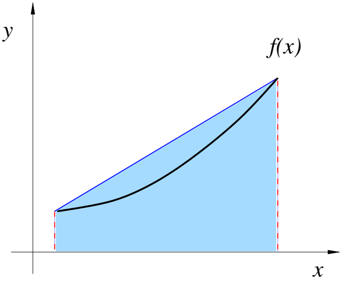
Definimos la función y escribimos el código

```
define(f(x),x^2);
rec:sum(f((x[k]+x[k+1])/2),k,0,Nu-1)*((b-a)/Nu);
float(%);
```

Fórmula de los trapecios.

Otra aproximación de $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$ consiste en aproximar el área bajo la curva $y = f(x)$ por un trapecio de base $b - a$





$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a)\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right)\underbrace{-\frac{(b-a)^2}{12}f''(\xi)}_{R(\xi)}$$

donde $R(\xi)$ es el error.

Fórmula de los trapecios.

Tomando la partición

$$[a,b] = [a,x_1] \cup [x_1,x_2] \cup \cdots \cup [x_{n-2},x_{n-1}] \cup [x_{n-1},b],$$

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad k = 0,1,2,\ldots,n, \quad x_0 = a, x_n = b.$$

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^{x_1} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{b} f(x)\,dx \quad \Rightarrow$$

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{2n}\left(f(a) + f(b) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) \right) + R(\xi)$$

donde

$$|R(\xi)| \le M\frac{(b-a)^2}{12n^2}, \quad M = \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|.$$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{2n}\left(f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)\right)$$

Implementación con MAXIMA: Volvemos a definir la partición:

```
kill(all)$
a:0;b:1;x[0]:a;Nu:20;
x[n]:=x[0]+n*(b-a)/Nu;
```

y definimos la función y la suma numérica

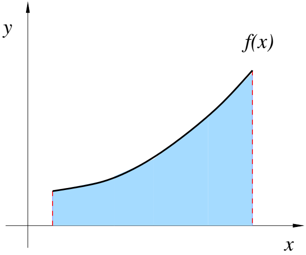
```
define(f(x),x^2);
tra: (f(a)+f(b)+ 2*sum(f(x[k]),k,1,Nu-1))*((b-a)/(2*Nu))$
float(%);
```

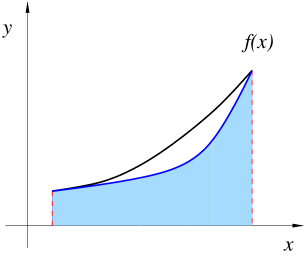
Fórmula de Simpson (método de Newton-Cotes)

Idea: aproximar la integral $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$ de la siguiente forma

$$\int_a^b f(x)\,dx = A\,f(a) + B\,f\left(\frac{a+b}{2}\right) + C\,f(b) + R(\xi),$$

donde A, B, C se eligen de forma que la fórmula anterior sea exacta $(R(\xi) = 0)$ si $f(x) = 1$, $f(x) = x$ y $f(x) = x^2$.





Lo anterior equivalente a aproximar el área debajo de f por una parábola.

Fórmula de Simpson

Escojamos

$$[a,b]=[a,x_1]\cup[x_1,x_2]\cup\cdots\cup[x_{2n-2},x_{2n-1}]\cup[x_{2n-1},b],$$

$$x_k=a+\frac{b-a}{2n}k,\quad k=0,1,2,...,2n,\quad x_0=a,x_{2n}=b\quad\Rrightarrow$$

y apliquemos el método de Simpson a cada uno de los sumandos

$$\int_a^b f(x)\,dx=\int_a^{x_2} f(x)\,dx+\cdots+\int_{x_{2k}}^{x_{2k+2}} f(x)\,dx+\cdots+\int_{x_{2n-2}}^{b} f(x)\,dx$$

$$\approx\frac{b-a}{6n}\left(f(a)+f(b)+4\sum_{k=1}^{n}f(x_{2k-1})+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_{2k})\right)+R(\xi),$$

$$|R(\xi)|\le M\frac{(b-a)^5}{2880n^4},\qquad M=\max_{x\in[a,b]}|f^{(4)}(x)|.$$

Ejemplo: $\int_0^1 x^2 dx$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{6n}\left(f(a)+f(b)+4\sum_{k=1}^{n} f(x_{2k-1})+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_{2k})\right)$$

Implementación con MAXIMA: Volvemos a definir la partición:

```
kill(all)$
a:0;b:1;x[0]:a;Nu:10;
x[n]:=x[0]+n*(b-a)/(2*Nu);
```

y definimos la función y la suma numérica

```
define(f(x),x^2);
simp: (f(a)+f(b)+ 4*sum(f(x[2*k-1]),k,1,Nu)
           +2*sum(f(x[2*k]),k,1,Nu-1))*((b-a)/(6*Nu))$
float(%);
```

MAXIMA tiene incorporado un potente paquete de integración numérica: el QUADPACK.

El comando más sencillo para calcular la integral de una función en un intervalo acotado es quad_qag. Su sintaxis es

```
quad_qag (f(x), x, a, b, key, [epsrel, epsabs, limit])
```

donde $f(x)$ es la función a integrar, x es la variable, a y b los extremos del intervalo.

El valor `key` es un número del 1 al 6 (es el orden de la regla de integración de Gauss-Kronrod).
`epsrel` que es el error relativo de la aproximación (por defecto es 10^{-8},

`epsabs` es el error absoluto de la aproximación (el valor por defecto es 0) y

`limit` es el número máximo de subintervalos a utilizar (el valor por defecto es 200).

El paquete QUADPACK

La función `quad_qag` devuelve una lista de cuatro elementos:

[int,err abs, nº ev, cod]

int = la aproximación a la integral,
err abs = el error absoluto estimado de la aproximación,
nº ev = el número de evaluaciones del integrando,
cod = código de error.

Es deseable que la salida del último argumento (el código de error) sea 0 (no hay errores).

Como ejemplo calculemos la integral $\int_0^1 x^2 dx$.

```
quad_qag (x^(2), x, 0, 1, 3, 'epsrel=1d-10);
```

Ejercicios:

Usando los métodos anteriores calcula las siguientes integrales:

$$I = \int_0^1 f(x)\, dx \qquad f(x) = \begin{cases} \dfrac{\operatorname{sen} x}{x}, & x \neq 0 \\ 1, & x = 0 \end{cases}$$

$$I = \int_0^1 e^{-x^2} dx, \qquad \int_0^1 x^{\frac{1}{2}} (1-x)^{\frac{3}{2}} dx.$$

Usa también un polinomio de Taylor en cero para aproximarlas.

Utiliza la integración simbólica de MAXIMA. Compara los resultados.

Ejercicios:

Calcular los valores aproximados de las siguintes integrales usando sumas de Riemann:

$$\int_0^1 \sqrt{1+x^2}dx, \qquad \int_{-1}^1 e^{-x^2}dx, \qquad \log x = \int_1^x \frac{dt}{t}$$

Ejercicios:

Calcular los valores aproximados de las siguintes integrales usando sumas de Riemann:

$$\int_0^1 \sqrt{1+x^2}dx, \qquad \int_{-1}^1 e^{-x^2}dx, \qquad \log x = \int_1^x \frac{dt}{t}$$

Identifica las sumas siguientes con integrales (usando sumas de Riemann) y calcúlalas.

$$\lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{n+k} = ? \qquad \lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} \frac{3n}{n^2+k^2} = ?$$