Derivación e integración numéricas

José Luis Bravo

Índice

Planteamiento del problema

Dada una función f y $a, b \in \mathbb{R}$, queremos calcular el valor de

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx.$$

En muchas ocasiones no existe una primitiva de f, por lo que necesitaremos otro método para evaluar la integral.

Supondremos que disponemos de valores

$$(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \ldots (x_n, f(x_n)), \; x_0 < x_1 < \ldots < x_n \in [a, b]$$

Obtendremos valores aproximados de $I(f)$ a partir de los valores de la función en los puntos anteriores.

Fórmulas de Cuadratura

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

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

- $x_0 < x_1 < \ldots < x_n \in [a, b]$ son los **nodos de cuadratura**.
- $a_0, a_1, \ldots, a_n \in \mathbb{R}$ son los **pesos de cuadratura**.

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

Nótese que una fórmula de cuadratura es de orden m si y sólo si

$$E[x^k] = 0, \quad k = 0, 1, \dots, m.$$

Se dice que el orden es exactamente m si además

$$E[x^{m+1}] \neq 0.$$

Fórmulas de cuadratura de tipo interpolatorio

Las **fórmulas de cuadratura de tipo interpolatorio** consisten en, dados $a < b \in \mathbb{R}$, $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ y f integrable en $[a, b]$, considerar el polinomio de interpolación de $f(x)$ en los puntos $x_0, x_1, \ldots, x_n$, P_n, y definir la fórmula de cuadratura

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

Nótese que en particular el grado de precisión es, al menos, el grado del polinomio interpolador, n.

En el caso de tomar $x_0 = a, x_1 = a + h, \ldots, x_n = a + nh = b$, $h = (b - a)/n$, se denominan **Fórmulas de Newton-Cotes**.

Fórmulas de cuadratura de tipo interpolatorio

Sean $l_i(x)$, $0 \leq i \leq n$ los polinomios de Lagrange de $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Entonces

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x).$$

Sustituyendo en la fórmula de cuadratura,

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x)dx = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i),$$

donde

$$a_i = \int_a^b l_i(x)\, dx.$$

Error de cuadratura

Recordemos que si P_n es el polinomio interpolador, el error de interpolación es

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i), \quad \xi_x \in [a, b].$$

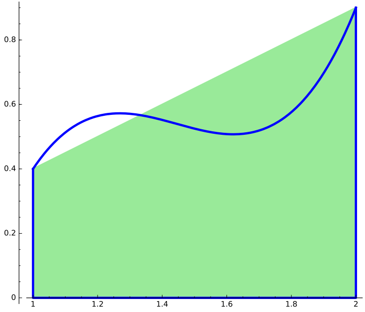
Por tanto, el error de cuadratura será

$$E[f] = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)\, dx, \quad \xi_x \in [a, b].$$

Otra formulación equivalente es, utilizando la interpolación de Newton,

$$E[f] = \int_a^b f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x] \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)\, dx.$$

Regla del Trapecio



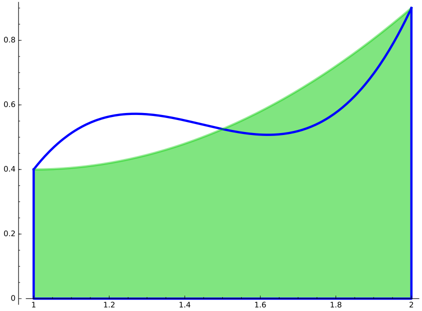
Tomando $x_0 = a$, $x_1 = b$, obtenemos

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

Y el error de cuadratura es

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

Regla de Simpson



Tomando $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $x_2 = b$, $h = (b-a)/2$, obtenemos la regla de Simpson:

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}(f(a) + 4f(x_1) + f(b))}$$

Regla de Simpson

Proposición

Sea $f \in \mathcal{C}^4[a,b]$. Entonces existe $\xi \in (a,b)$ tal que el error cometido con la regla de Simpson es

$$\int_a^b f(x)\,dx - \frac{h}{3}(f(a) + 4f(x_1) + f(b)) = -\frac{f^{(4)}(\xi)}{90}h^5.$$

Grado de precisión de las fórmulas de tipo interpolatorio

Proposición

Una fórmula de cuadratura con $(n+1)$-nodos distintos,

$$I(f) = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i),$$

es de interpolación si y sólo si tiene grado de precisión al menos n.

Fórmulas de cuadratura compuestas

Las **reglas compuestas** consisten en descomponer el intervalo en subintervalos y aproximar la integral aproximando la integral en cada subintervalo con un método simple.

1. Si aplicamos la regla del trapecio simple en cada subintervalo, tenemos la regla del trapecio compuesta.
2. Si el número de subintervalos es par y aplicamos la regla de Simpson en cada par de subintervalos, tendremos la regla de Simpson compuesta.

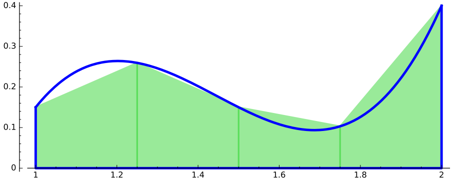
Regla del Trapecio Compuesta

Dado $h = (b-a)/n$, tomamos los nodos $x_i = a + ih$, $0 \leq i \leq n$. Entonces

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

Y el error de cuadratura

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



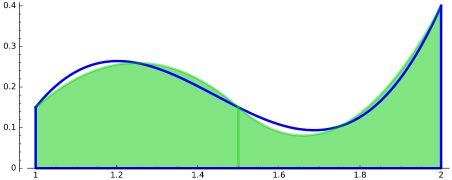
Regla de Simpson Compuesta

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

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



Cuadratura adaptativa

Los métodos anteriores toman los nodos de cuadratura equiespaciados. Esto hace que se dedique el mismo esfuerzo computacional a cada subintervalo, independientemente de cómo se comporte la función en el mismo.

El **método de cuadratura adaptativa** estima el error cometido en cada intervalo. En caso de que dicha estimación sea menor que una tolerancia fijada, se usa la aproximación obtenida. Sin embargo, si la estimación del error es mayor que la tolerancia, se divide el intervalo en dos, asignando a cada uno la mitad de la tolerancia.

Una vez subdividido un intervalo, se aplica el mismo proceso para cada una de las dos subdivisiones.

Cuadratura adaptativa (de Simpson)

Vamos a ilustrarlo usando el método de Simpson como fórmula de cuadratura para un intervalo. Fijada f y $a, b \in \mathbb{R}$, denotaremos

$$S(a, b) = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f((a+b)/2) + f(b)\right).$$

Entonces

$$\int_a^b f(x)\,dx - S(a, b) = -\frac{f^{(4)}(\xi_1)}{90} h^5, \quad \xi_1 \in [a, b].$$

Por otra parte, si $c = (a+b)/2$,

$$\int_a^b f(x)\,dx - S(a, c) - S(c, b) = -\frac{f^{(4)}(\xi_2)}{16 \cdot 90} h^5, \quad \xi_2 \in [a, b].$$

Cuadratura adaptativa (de Simpson)

Supongamos que $f^{(4)}(\xi_1) = f^{(4)}(\xi_2)$. Despejando de las dos ecuaciones anteriores, obtenemos

$$S(a,b) - S(a,c) - S(c,b) = \frac{15}{16}\frac{f^{(4)}(\xi_1)}{90}h^5.$$

De donde

$$-\frac{f^{(4)}(\xi_1)}{16 \cdot 90}h^5 = -\frac{S(a,b) - S(a,c) - S(c,b)}{15}.$$

Es decir, $(S(a,c) + S(c,b) - S(a,b))/15$ es una estimación del error cometido aplicando Simpson con dos intervalos.

Cuadratura adaptativa (de Simpson)

Resumiendo, el procedimiento (recursivo) es el siguiente:

1. Dada una tolerancia T, se comprueba si el error estimado $(S(a,c)+S(c,b)-S(a,b))/15$ en valor absoluto es menor que dicha tolerancia.
2. Si es menor, se toma como aproximación de la integral
$$\int_a^b f(x)dx \approx S(a,c)+S(c,b)+\frac{S(a,c)+S(c,b)-S(a,b)}{15}.$$
3. Si es mayor, se consideran las integrales en los intervalos $[a,c]$ y $[c,b]$, asignando a cada una una tolerancia $T/2$ y se procede análogamente. Una vez aproximadas las dos integrales, se suman los valores de las dos aproximaciones y ese es el valor utilizado como aproximación de la integral entre a y b.

Cuadratura Gaussiana

Consideremos una fórmula de cuadratura sobre $n+1$ nodos,

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i).$$

Vamos a buscar los valores de los pesos y de los nodos para que el orden de la fórmula de cuadratura sea máximo.

Por la sección anterior, sabemos que para tener grado de precisión al menos n, la fórmula de cuadratura será de tipo interpolatorio, por lo que sólo tendremos que obtener los nodos $x_0, \dots, x_n$.

Cuadratura Gaussiana

Proposición

Dados $n \in \mathbb{N}$, $r \geq 0$, una fórmula de cuadratura de tipo interpolatorio, $I(f) = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$, tiene grado de precisión $n + r$ si y sólo si

$$\int_a^b x^j \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)\, dx = 0, \quad 0 \leq j \leq r - 1.$$

Cuadratura Gaussiana

La Proposición anterior muestra que para obtener una fórmula de cuadratura de grado $n+r$ basta tomar

$$\Pi_n = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$$

ortogonal a x^j, $0 \leq i \leq r-1$ con el producto escalar

$$\langle g, h\rangle = \int_a^b g(x)h(x)\,dx.$$

Consideremos una sucesión de polinomios ortogonales (con la norma anterior), $\{Q_k\}_{k=0,1,\ldots}$ tal que el grado de Q_k sea k.

Cuadratura Gaussiana

Proposición

Fijado $n \in \mathbb{N}$ sean $x_0, \ldots, x_n$ las raíces de Q_{n+1}. Entonces la fórmula de cuadratura de tipo interpolatorio cuyos nodos son $x_0, \ldots, x_n$ tiene orden $2n + 1$.

Teorema

Si f es continua en $[a, b]$, entonces las fórmulas de cuadratura gaussianas convergen a la integral.

Polinomios de Legendre

Vamos a calcular las fórmulas de cuadratura gaussianas para la integral $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx$.
Para ello, comenzamos calculando los polinomios de Legendre, que forman base ortogonal. Los dos primeros serán $Q_0(x) = 1$, $Q_1(x) = x$. Los siguientes se pueden calcular mediante la fórmula recursiva

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x).$$

Ahora bastará tomar como nodos las raíces de dichos polinomios y como pesos los dados por ser una fórmula de tipo interpolatorio.