Tema 5 Derivación e integración numéricas

Dada una función f y $a, b \in \mathbb{R}$, queremos aproximar 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 conocemos los valores de la función en $n+1$ coordenadas $x_0 < x_1 < \ldots < x_n \in [a, b]$, es decir, que tenemos los puntos

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

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

5.1 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

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

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 $\leq m$. Se dice que el orden es exactamente m si existe un polinomio P de grado m tal que $E[P] \neq 0$

Proposición 5.1

Una fórmula de cuadratura es de orden m si y sólo si

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

El orden es exactamente m si además

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

♠

Demostración Ejercicio. □

5.1.1 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

$$\int_a^b f(x)dx \approx Q[f] = \int_a^b P_n(x)dx.$$

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

En el caso de tomar puntos equiespaciados se denominan **Fórmulas de Newton-Cotes**. Si los puntos equiespaciados incluyen a y b se denominan fórmulas cerradas. En ese caso, los nodos de cuadratura son

$$x_0 = a, x_1 = a + h, \ldots, x_n = a + nh = b, \quad h = (b-a)/n.$$

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

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

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,

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

5.1.1.1 Trapecio simple

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

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

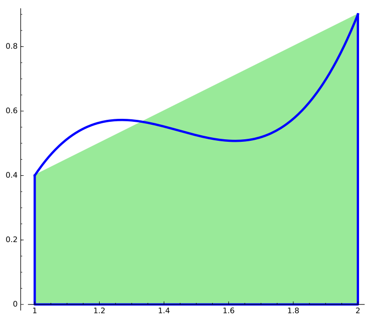


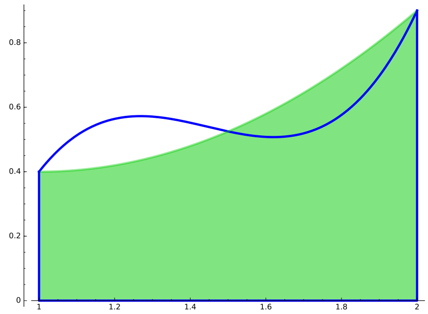
Figura 5.1: Trapecio simple

El error de curvatura se obtiene usando que $(x-a)(b-x)$ es positiva en $[a, b]$ y por el Teorema del valor medio del cálculo integral, el término de la derivada sale fuera de la integral.

5.1.1.2 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:

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



Proposición 5.2

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

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

Demostración Desarrollamos la función de h en $h = 0$ la expresión del error

$$\int_a^{a+2h} f(x)\,dx - \frac{h}{3}(f(a) + 4f(a+h) + f(a+2h)).$$

Si

$$F(x) = \int_a^x f(t)\,dt,$$

entonces

$$F(x) = F(a)+F'(a)(x-a)+F''(a)(x-a)^2/2+F'''(a)(x-a)^3/3!+F''''(a)(x-a)^4/4!+F'''''(\xi)(x-a)^5/5!$$

Luego

$$\int_a^{a+2h} f(x)\,dx = 0 + f(a)2h + f'(a)2h^2 + f''(a)4h^3/3 + f'''(a)2h^4/3 + f''''(\xi)32h^5/5!$$

Po otro lado

$$(h/3)(f(a)+4f(a+h)+f(a+2h)) = 0+f(a)2h+f'(a)2h^2+f''(a)4h^3/3+f'''(a)2h^4/3+f''''(\xi)(4+16)h^5/(34!)$$

Es decir, el resto es

$$(32\cdot 3 - 20\cdot 5)/(3\cdot 5!) = -4/(3\cdot 5!) = -1/(3\cdot 5\cdot 3\cdot 2) = -1/90.$$

$\square$

5.1.2 Grado de precisión de las fórmulas de tipo interpolatorio

Proposición 5.3

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.

Demostración

En primer lugar, si la fórmula es de interpolación, es decir,

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

donde $P_n(x)$ es el polinomio de interpolación de f en $x_0, x_1, \ldots, x_n$, entonces, si f es un polinomio de grado $\leq n$, tenemos que $P_n = f$ y la fórmula es exacta.

Recíprocamente, supongamos que la fórmula tiene grado de precisión al menos n. Entonces, si $E_n(f)$ es el error de interpolación, $E_n(x^k) = 0$, $0 \leq k \leq n$, es decir,

$$\frac{1}{k+1}\left(b^{k+1} - a^{k+1}\right) = \sum_{i=0}^{n} a_i x_i^k, \quad 0 \leq k \leq n.$$

El sistema anterior es compatible determinado (su determinante es el de Vandermonde).

Por otra parte, si $\bar{a}_i$ son los pesos de cuadratura de la fórmula de cuadratura de tipo interpolatorio, como tiene grado de precisión al menos n, tenemos que son solución del sistema anterior. Luego la fórmula de cuadratura anterior es de tipo interpolatorio.

□

5.1.3 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.

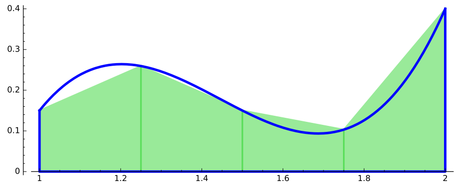
5.1.3.1 Regla del Trapecio Compuesta

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

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



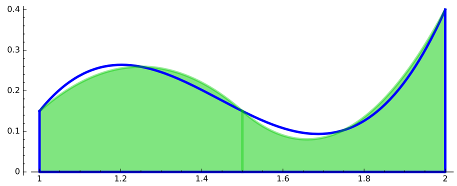
5.1.3.2 Regla de Simpson Compuesta

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

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



5.2 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.

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 $c = (a+b)/2$,

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

Supongamos que $f^{(4)}(\xi_1) \approx f^{(4)}(\xi_2)$. 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.

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.

5.3 Fórmulas de 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. 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 $x_0, \ldots, x_n$.

Proposición 5.4

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

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

♠

Demostración

Si la fórmula de cuadratura tiene grado de precisión $n+r$ entonces para todo polinomio de grado menor o igual a $n+r$ el error es cero. En particular, para los siguientes polinomios

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

Entonces su integral en $[a,b]$ coincide con la fórmula de cuadratura, que es cero pues se anulan en los nodos.

Supongamos que se verifica la fórmula. Denotemos

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

La fórmula será de grado $n+r$ si el error de cuadratura de todo polinomio de grado menor o igual a $n+r$, P, es cero. Ahora bien, $P = Q\Pi_n + R$, donde Q tiene grado menor o igual a r y R tiene grado menor o igual a n. Entonces

$$E[P] = E[Q\Pi_n] + E[R].$$

Por hipótesis, $E[Q\Pi_n] = 0$ y por ser una fórmula de cuadratura de tipo interpolatorio, $E[R] = 0$.

□

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 el producto escalar anterior), $\{Q_k\}_{k=0,1,\ldots}$ tal que el grado de Q_k sea k.

Proposición 5.5

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 $2n + 1$.

Demostración Hay que probar que las raíces han de ser reales. Si no lo fuesen, entonces tendríamos un polinomio de grado menor con el mismo número de raíces reales, que al multiplicarlo por Q_{n+1} nos daría un polinomio positivo y por tanto no ortogonal. □

Proposición 5.6

Los pesos de cuadratura son positivos.

Demostración Ver ejercicios. □

Teorema 5.1

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

Demostración Por el Teorema de Aproximación de Weierstrass, existe un polinomio tal que $|f - p| < \epsilon$. Para n suficientemente grande, las fórmulas de cuadratura son exactas para ese polinomio, luego

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - \sum A_i f(x_i)\right| = \left|\int_a^b f(x) - p(x)\,dx\right| + \left|\sum A_i(p(x_i) - f(x_i))\right| \leq (b-a)\epsilon + \epsilon\sum A_i = 2(b-a)\epsilon.$$

□

Vamos a calcular las fórmulas de cuadratura gaussianas para la integral $\int_{-1}^1 f(x)\,dx$, denominadas fórmulas de Gauss-Legendre.

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.