Cálculo Numérico I

Integración Numérica

La integral resuelve el problema de calcular el área bajo la gráfica de una función positiva definida sobre un intervalo cerrado. El cálculo elemental de funciones de una variable real proporciona un método elegante de calcular la integral de una función. El teorema fundamental del cálculo nos dice que el problema de calcular la integral de una función continua se reduce al de buscar una segunda función cuya derivada sea la función dada, es decir una *primitiva* de ella. Sin embargo el problema de hallar una primitiva de una función dada puede resultar muy difícil si no imposible. De hecho sabemos que existen funciones elementales —es decir, combinaciones algebraicas de funciones trigonométricas y logarítmicas y sus inversas— cuyas primitivas no son expresables de esta forma (p. ej. e^{-x^2}). Por esta razón es por la que estudiamos métodos numéricos que aproximen el valor de la integral buscada. Ya la definición de integral de Riemann proporciona un método de aproximación numérica: las sumas de Riemann. Sin embargo su convergencia es muy lenta y no resultan útiles para obtener resultados prácticos. Los métodos numéricos que vamos a estudiar consisten en sustituir la función dada por una aproximación suya y tomar como valor de la integral de la función el valor de la integral de su aproximada.

Veremos en primer lugar los resultados que se obtienen aproximando la función por medio de un polinomio interpolador con especial énfasis en los casos lineal (regla del trapecio) y cuadrático (regla de Simpson). A continuación estudiaremos las cuadraturas de Gauss.

18 Regla del Trapecio

Si para calcular el valor aproximado de la función f en el intervalo $[a, b\,]$ sustituimos dicha función por el polinomio lineal que la interpola con nodos en los extremos del intervalo obtenemos

$$Tf = \int_a^b \frac{(x-a)f(b) + (b-x)f(a)}{b-a} = (b-a)\frac{f(b)+f(a)}{2}.$$

¿Cuál será el error cometido?

$$E(Tf) = Tf - I(f) = -\int_a^b (x-a)(x-b)f[a,b,x]dx$$

Por el teorema del valor medio generalizado del cálculo integral

$$\exists \xi \in (a,b) : E(Tf) = -f[a,b,\xi]\int_a^b (x-a)(x-b)dx$$

y por tanto, si $f \in C^2([a,b])$,

$$\exists \zeta \in (a,b) : E(Tf) = \frac{(b-a)^3}{12} f''(\zeta).$$

Si $b-a$ no es pequeño la regla del trapecio no será muy útil para calcular $I(f)$. En ese caso podríamos aplicarla dividiendo antes el intervalo $[a,b]$ en un cierto número n de subintervalos de longitud $h = (b-a)/n$ con extremos $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \ldots, n$. Tendríamos entonces

$$I(f) = \sum_{j=1}^{n} \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx = \sum_{j=1}^{n} \left\{ \frac{h}{2}[f(x_{j-1}) + f(x_j)] - \frac{h^3}{12} f''(\xi_j) \right\}$$

$$= h[\tfrac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \cdots + f(x_{n-1}) + \tfrac{1}{2}f(x_n)] - \frac{h^3}{12}\sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j).$$

Llamamos *regla del trapecio compuesta* a REGLA DEL TRAPECIO COMPUESTA

$$\boxed{T_n f = \frac{b-a}{n}[\tfrac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \cdots + f(x_{n-1}) + \tfrac{1}{2}f(x_n)].}$$

El error que se comete al tomar $T_n f$ en vez de If es

$$E(T_n f) = T_n(f) - I(f) = \frac{h^3}{12}\sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j)$$

$$= \frac{h^2}{12}(b-a)\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j) = \frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi), \qquad \xi \in (a,b).$$

Este error puede estimarse asintóticamente de la siguiente manera:

$$\lim_{n\to\infty} \frac{E(T_n f)}{h^2} = \lim_{n\to\infty} \left\{ \frac{h}{12}\sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j) \right\}$$

cantidad esta última que se puede interpretar como una suma de Riemann de forma que

$$\lim_{n\to\infty} \frac{E(T_n f)}{h^2} = \frac{1}{12}\int_a^b f''(x)dx = \frac{f'(b) - f'(a)}{12}$$

y así se obtiene

$$E(T_n f) \approx \frac{h^2}{12}[f'(b) - f'(a)] \equiv \tilde{E}(T_n f)$$

Se dice que $\tilde{E}(T_n f)$ es una estimación asintótica del error $E(f)$.
Utilizando esta estimación asintótica del error se puede mejorar la regla del trapecio con la llamada *regla del trapecio corregida*:

regla del trapecio corregida

$$\boxed{CT_n(f) = T_n f - \frac{(b-a)^2}{12n^2}[f'(b) - f'(a)].}$$

Ejemplo 18.1. Calcular por medio de la regla del trapecio la integral

$$\int_0^1 \frac{4dx}{1+x^2} \qquad (= \pi).$$

Determinar utilizando la formula del error cuantas veces habrá que componer la regla del trapecio para calcular la integral anterior con dos cifras decimales correctas (error menor que $5 \cdot 10^{-3}$). Aplicar esta regla compuesta y corregirla después por medio del error asintótico calculado.

$$|E| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} \sup_{x\in[a,b]} |f''(x)| \leq \frac{2}{3n^2}$$

buscamos n tal que $2(3n^2)^{-1} \leq 5 \cdot 10^{-3}$ es decir $10^2 \leq 0'75 \cdot n^2$, es suficiente tomar $n = 12$.
Aplicando la regla compuesta del trapecio con $n = 12$ y trabajando con mantisa de 12 dígitos con una casio fx-3600G se obtiene:

$$T_{12} f = 3'14043525 \qquad CT_{12} f = 3'14159265$$

El valor correcto de π con nueve dígitos es 3'14159265.

19 Regla de Simpson

Thomas Simpson, 1710–1761

Si en vez de aproximar la función f linealmente se aproxima por medio del polinomio cuadrático $\mathbb{P}_2$ que interpola a f con nodos en los puntos $a, c = (a+b)/2, b$ entonces el valor de la integral de f sobre el intervalo $[a, b\,]$ se aproximará por medio de

$$Sf = \int_a^b \mathbb{P}_2(x)dx$$

Escribiendo el polinomio $\mathbb{P}_2$ en su forma de Lagrange se obtiene fácilmente que su integral sobre $[a, b\,]$ resulta ser

$$S(f) = \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(c) + f(b)].$$

Para determinar el error en $S(f)$ integraremos el error en el polinomio interpolador de segundo grado

$$E(Sf) = -\int_a^b (x-a)(x-c)(x-b)f[a,c,b,x]dx.$$

Para calcular esta integral no podemos aplicar directamente el teorema del valor intermedio del cálculo integral ya que ahora la función $(x-a)(x-c)(x-b)$ cambia de signo en el punto c. Sorteamos este problema por medio de la función

$$w(x) = \int_a^x (t-a)(t-c)(t-b)dt,$$

primitiva de la anterior, que verifica las propiedades: $w(a) = 0 = w(b)$ y $\forall x \in (a,b), w(x) > 0$. Calculamos entonces la integral en $E(Sf)$ integrando por partes:

$$\begin{aligned} \int_a^b (P_2(x) - f(x))dx &= -\int_a^b w'(x)f[a,b,c,x]dx \\ &= -(w(x)f[a,b,c,x])\big|_a^b + \int_a^b w(x)\frac{d}{dx}f[a,b,c,x]dx \\ &= \int_a^b w(x)\frac{d}{dx}f[a,b,c,x]dx. \end{aligned}$$

Y a esta última integral sí que puede aplicarse el teorema del valor medio:

$\frac{d}{dx}f[a,b,c,x] = f[a,b,c,x,x]$

$$= f[a,b,c,\xi,\xi]\int_a^b w(x)dx.$$

Dado que, si escribimos, $h = (b-a)/2$,

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x)dx &= \int_a^b \int_a^x (t-a)(t-b)(t-c)dtdx \\ &= \int_a^b \int_{-h}^{x-a-h} (u+h)(u-h)u\,dudx \\ &= \int_{-h}^h \int_{-h}^y (u^3 - h^2u)\,dudy \\ &= 4h^5/15. \end{aligned}$$

Obtenemos

$$E = \frac{f^{(4)}(\xi)}{24}\frac{4}{15}(\frac{b-a}{2})^5.$$

Nuevamente, si $h = (b-a)/2$ es grande el error será inadmisible. Como hicimos en el caso de la regla del trapecio podemos aplicar la regla de Simpson a trozos sobre el intervalo $[a,b]$:

sea $h = (b-a)/2n$, $x_k = a + kh$, $jk = 0, 1, \ldots, 2n$,

$$\begin{aligned}\int_a^b f &= \sum_{j=1}^{n} \int_{x_{2j-2}}^{x_{2j}} f \\ &= \sum_{j=1}^{n} \frac{h}{3}[f(x_{2j-2}) + 4f(x_{2j-1}) + f(x_{2j})] - \sum_{j=1}^{n} \frac{h^5}{90} f^{IV}(\xi_j).\end{aligned}$$

Llamamos *regla de Simpson compuesta* a regla de Simpson compuesta

$$\boxed{\begin{aligned}S_n f = \ & \frac{b-a}{6n}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \\ & \cdots + 2f(x_{2n-2}) + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n})]\end{aligned}}$$

El error que se comete al tomar $S_n f$ en vez de If es

$$E(S_n f) = \frac{h^5}{90} \sum_{j=1}^{n} f^{\mathrm{IV}}(\xi_j) = \frac{h^4}{90}(b-a)\frac{1}{2n} \sum_{j=1}^{n} f^{\mathrm{IV}}(\xi_j) = \frac{h^4}{180}(b-a) f^{\mathrm{IV}}(\xi).$$

También ahora podemos estimar el error por medio de

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{h^5}{90} f^{\mathrm{IV}}(\xi_j) = \frac{h^4}{180} \sum_{j=1}^{n} 2h f^{\mathrm{IV}}(\xi_j) \approx \frac{h^4}{180} \int_a^b f^{\mathrm{IV}}(\xi) d\xi = \frac{h^4}{180}(f'''(b) - f'''(a)).$$

Si se corrige la regla de Simpson compuesta por medio de este error asintótico se obtiene la *regla de Simpson corregida*: regla de Simpson corregida

$$\boxed{CS_n(f) = S_n f - \frac{(b-a)^4}{2880 n^4}[f'''(b) - f'''(a)].}$$

Ejemplo 19.1. Tratando ahora el ejemplo anterior

$$\int_0^1 \frac{4dx}{1+x^2}$$

con la regla de Simpson compuesta, y observando que 96 es una cota superior para $|\frac{d}{dx}\frac{4}{1+x^2}|$ en el intervalo $[0, 1]$, se obtiene que

$$|E(S_n f)| \leq \frac{96}{90 n^4};$$

buscamos n tal que

$$\frac{96}{90 n^4} \leq 5 \cdot 10^{-3}$$

para lo que será suficiente tomar $n = 4$.

El resultado será $S_4 f = 3'14159250$. Vemos que, aunque la acotación del error que hemos obtenido para la regla de Simpson nos garantiza solamente dos cifras decimales, hemos obtenido cinco cinco cifras correctas. La corrección asintótica resulta ser *cero* ya que la derivada tercera se anula tanto en $x = 0$ como en $x = 1$.

20 Reglas de Newton–Cotes

En general las reglas de integración numérica que se obtienen por medio de la interpolación polinómica —como las del trapecio y de Simpson— reciben el nombre de *reglas de Newton–Cotes*. Para obtenerlas se escribe el polinomio interpolador en su forma de Lagrange

ROGER COTES, 1682–1716

$$P(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + \cdots + L_n(x)f(x_n)$$

y se obtienen los pesos a partir de las integrales de los polinomios L_i

$$I_n f = \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i); \qquad w_i = \int_a^b L_i(x)dx.$$

Las reglas que se obtienen para $n = 3$ y $n = 4$ son:

Regla de los tres octavos

$$I_3 f = \frac{3}{8}h[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)]$$

Regla de Boole

GEORGE BOOLE, 1815–1864

$$I_4 f = \frac{2}{45}h[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$$

El error en el caso de la regla de los tres octavos viene dado por

$$I_3 f - \int_a^b f(x)dx = \frac{3}{80}h^5 f^{\text{IV}}(\xi) \qquad \xi \in [a, b].$$

El error para la regla de Boole es

$$I_4 f - \int_a^b f(x)dx = \frac{8}{945}h^7 f^{\text{VI}}(\xi), \qquad \xi \in [a, b].$$

Todos estos resultados pueden obtenerse como ejercicio.

En general la expresión del error en las reglas de Newton–Cotes es de naturaleza distinta según la paridad de n:

1. Si n es par y $f \in C^{n+2}[a,b]$, $\exists \xi \in (a,b)$ tal que

$$I_n f - If = C_n h^{n+3} f^{(n+2)}(\xi)$$

donde

$$C_n = -\frac{1}{(n+2)!}\int_0^n t^2(t-1)\dots(t-n)dt.$$

2. Si n es impar y $f \in C^{n+1}[a,b]$, $\exists \xi \in [a,b]$ tal que

$$I_n f - \int_a^b f = C_n h^{n+2} f^{(n+1)}(\xi)$$

donde

$$C_n = -\frac{1}{(n+1)!}\int_0^n t(t-1)\dots(t-n)dt.$$

21 Reglas Gaussianas

Las reglas de Newton–Cotes garantizan la integración exacta de polinomios hasta un determinado grado: el error en las reglas impares (*trapecio*, *tres octavos*,...) depende de la derivada de un orden superior (segunda, cuarta,...) y por tanto la regla integra exactamente polinomios hasta el mismo grado que indica la regla (primero, tercero,...); el error en las reglas pares (*punto medio*, *Simpson*, *Boole*,...) depende de la derivada de orden dos unidades por encima de la regla (segunda, cuarta, sexta,...) y por tanto integra exactamente polinomios polinomios hasta un grado por encima del orden de la regla (primero, tercero, quinto,...).

A la vista de este comportamiento vamos a buscar reglas de integración numérica de la forma $\sum w_i f(x_i)$ que integren todos los polinomios hasta un determinado grado, el mayor posible para el número de sumandos elegidos para la regla. Obtendremos así las llamadas *reglas Gaussianas* o *cuadraturas de Gauss*.

REGLAS GAUSSIANAS
CUADRATURAS DE GAUSS

Si utilizamos un sólo nodo la regla resultante integrará exactamente polinomios de grado menor o igual a *uno*: (normalizamos el cálculo al intervalo $[-1,1]$). Sea x_0 el nodo y w_0 el *peso* correspondiente,

PESO

$$\int_{-1}^1 dx = w_0, \qquad \int_{-1}^1 x dx = w_0 x_0.$$

De aquí resulta $x_0 = 0$, $w_0 = 2$.

Si utilizamos dos nodos podemos integrar exactamente todos los polinomios de grado menor o igual que *tres*:

$$I_2 f = w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2)$$

$$\begin{array}{rcll} I_2(1) & = & w_1 + w_2 & = 2 \\ I_2(x) & = & w_1 x_1 + w_2 x_2 & = 0 \\ I_2(x^2) & = & w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2 & = \frac{2}{3} \\ I_2(x^3) & = & w_1 x_1^3 + w_2 x_2^3 & = 0 \end{array}$$

Este sistema no lineal resulta tener solución única. Ésta verifica $w_1 = w_2 = 1$ y $x_1 = -x_2 = -\sqrt{3}/3$. Así

$$I_2(f) = f(-\frac{\sqrt{3}}{3}) + f(\frac{\sqrt{3}}{3}).$$

En general y por el mismo procedimiento, utilizando n nodos podemos integrar exactamente todos los polinomios de grado $\leq 2n-1$. Para obtener los nodos y los pesos de I_n debemos resolver el sistema no lineal

$$\begin{array}{rcl} 2 & = & w_1 + \cdots + w_n \\ 0 & = & w_1 x_1 + \cdots + w_n x_n \\ \frac{2}{3} & = & w_1 x_1^2 + \cdots + w_n x_n^2 \\ \cdots & & \cdots \quad \cdots \quad \cdots \\ \frac{2}{2n-1} & = & w_1 x_1^{2n-2} + \cdots + w_n x_n^{2n-2} \\ 0 & = & w_1 x_1^{2n-1} + \cdots + w_n x_n^{2n-1} \end{array} \tag{21.1}$$

La resolución de este sistema no lineal no es en general sencilla, de hecho no está claro *a priori* que el sistema tenga solución o que, en caso de existir, ésta sea única.

Abordamos el problema de su resolución por otros medios. Supongamos primeramente que existen los x_i y que son distintos y están en el intervalo $[0,1]$. El polinomio $L_n(x) = (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)$ debe tener integral exacta por medio de la regla de Gauss y por tanto esta debe ser cero, ya que $L_n(x_i) = 0$. Si $L_n(x) = x^n + a_1 x^{n-1} + \cdots + a_{n-1}x + a_n$ podemos determinar los coeficientes a_i por medio del sistema lineal de ecuaciones

$$0 = \int_{-1}^{1} x^k L_n(x) dx \qquad k = 1, \ldots, n.$$

De hecho se obtienen dos sistemas lineales separados, uno que contiene solamente a los coeficientes de índice par, y el otro solamente a los de índice impar. Uno de ellos será homogéneo con solución trivial, por tanto el polinomio obtenido tendrá solamente términos cuyo grado tenga la misma paridad que n. Los ceros de este polinomio son los nodos x_i buscados. En general se obtendrán por algún método de resolución de ecuaciones no lineales (Newton,...).

Los polinomios L_n reciben el nombre de *polinomios mónicos de Legendre* y han sido estudiados extensivamente. POLINOMIOS MÓNICOS DE LEGENDRE

Una vez calculados (aproximados) los nodos, podemos volver al sistema 21.1, que resultará un sistema lineal en las w_i con un exceso de ecuaciones. También podemos recurrir al siguiente método para calcular los pesos. Para calcular el peso w_i consideramos el polinomio

$$p_i(x) = \frac{L_n(x)}{x - x_i}$$

es decir, le quitamos al polinomio L_n el factor $x - x_i$. La integral de este polinomio debe ser exacta por la regla de Gauss (su grado es menor que $2n - 1$) y por tanto

$$w_i p_i(x_i) = \int_{-1}^{1} p_i(x)dx.$$

Los dos cálculos anteriores resultan más sencillos si se observa que los nodos son simétricos respecto de cero y por tanto los pesos para dos nodos simétricos son iguales.