

Capítulo 4

Derivación e integración numérica

4.1. Fórmulas para aproximar a la derivada primera

Consideremos $n + 1$ puntos distintos $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ pertenecientes a un intervalo I y sea además $f \in C^{n+1}[I]$. De acuerdo a lo que vimos con los polinomios de interpolación de Lagrange, podemos escribir

$$f(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k)L_k(x) + \frac{f^{(n+1)}[\zeta(x)]}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n), \quad \zeta \in I. \quad (4.1)$$

Derivando $f(x)$ con respecto a x

$$f'(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k)L'_k(x) + \frac{d}{dx} \left[(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n) \right] \frac{f^{(n+1)}[\zeta(x)]}{(n+1)!} + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)}{(n+1)!} \frac{d}{dx} f^{(n+1)}[\zeta(x)]. \quad (4.2)$$

Si $x = x_j$, con $j = 0, 1, \dots, n$

$$f'(x_j) = \sum_{k=0}^n f(x_k)L'_k(x_j) + \frac{f^{(n+1)}[\zeta(x_j)]}{(n+1)!} \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^n (x_j - x_k). \quad (4.3)$$

Esta expresión se denomina “fórmula de $n + 1$ puntos para aproximar $f'(x_j)$ ”.

* * *

La fórmula más básica que podemos generar resulta de considerar tan sólo dos puntos ($n = 1$):

$$f'(x_0) \approx f(x_0)L'_0(x_0) + f(x_1)L'_1(x_0), \quad (4.4)$$

donde

$$L_0(x) = \frac{x-x_1}{x_0-x_1} \Rightarrow L'_0(x) = \frac{1}{x_0-x_1}, \quad (4.5)$$

$$L_1(x) = \frac{x-x_0}{x_1-x_0} \Rightarrow L'_1(x) = \frac{1}{x_1-x_0}. \quad (4.6)$$

Reemplazando en la expresión de más arriba

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0)}{x_0-x_1} + \frac{f(x_1)}{x_1-x_0} = \boxed{\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}. \quad (4.7)$$

El error de truncamiento es

$$E = \frac{f''(\zeta)}{2}(x_0 - x_1). \quad (4.8)$$

A partir de acá vamos a llamar h a la distancia entre puntos contiguos. Así, tenemos que $x_1 = x_0 + h$ y podemos escribir las expresiones para dos puntos como

$$\boxed{f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}}, \quad \boxed{E = -\frac{f''(\zeta)}{2}h.} \quad (4.9)$$

Si $h > 0$ se llama “diferencia hacia adelante” (forward difference), mientras que si $h < 0$ “diferencia hacia atrás” (backward difference).

Ejemplo

Vamos a calcular con la fórmula anterior el valor de la derivada de $f(x) = \ln(x)$ en $x_0 = 1,8$. El valor exacto es $f'(x_0) = 0,5$.

$$h = 0,1 \quad f'(x_0) \approx 0,5407 \quad (4.10)$$

$$h = 0,01 \quad f'(x_0) \approx 0,5540 \quad (4.11)$$

$$h = 0,001 \quad f'(x_0) \approx 0,5554 \quad (4.12)$$

La aproximación resulta mejor a medida que achicamos el paso (el error es de $O(h)$).

Observaciones

- Las fórmulas más utilizadas para aproximar la derivada primera de una función son las que realizan evaluaciones de la función $f(x)$ en tres o cinco puntos.
- En condiciones normales la utilización de un polinomio de Lagrange de mayor grado nos permite obtener el resultado con menor error (esto no siempre se cumple). El precio que hay que pagar es, por un lado, un mayor número de evaluaciones de la función y, por el otro, un crecimiento del error de redondeo.
- La experiencia indica que los casos mencionados (cálculo con tres o cinco puntos) dan un buen balance entre el esfuerzo adicional que hay que hacer y la disminución del error que se produce.

* * *

Si en la fórmula general de aproximación de $f'(x_j)$ consideramos los puntos x_0, x_1 y x_2 , con $x_1 = x_0 + h$ y $x_2 = x_0 + 2h$ y hacemos las cuentas, resulta:

$$f'(x_0) = \frac{1}{h} \left(-\frac{3}{2}f(x_0) + 2f(x_1) - \frac{1}{2}f(x_2) \right) + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\zeta_0), \quad (a)$$

$$f'(x_1) = \frac{1}{h} \left(-\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_2) \right) - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\zeta_1), \quad (b)$$

$$f'(x_2) = \frac{1}{h} \left(\frac{1}{2}f(x_0) - 2f(x_1) + \frac{3}{2}f(x_2) \right) + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\zeta_2). \quad (c)$$

Vamos a reescribir las expresiones (b) y (c). En (c) vamos a rebautizar lo que llamábamos x_2 como x_0 . Así, lo que antes era x_1 ahora será $x_0 - h$ y x_0 pasará a ser $x_0 - 2h$. Por su parte, en (b) rebautizamos a x_1 como x_0 y entonces el x_0 de antes será $x_0 - h$ ahora y x_2 pasará a ser $x_0 + h$. Resumiendo, las 3 expresiones anteriores pasarán a ser

$$f'(x_0) = \frac{1}{h} \left(-\frac{3}{2}f(x_0) + 2f(x_0 + h) - \frac{1}{2}f(x_0 + 2h) \right) + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\zeta_0) \quad (a)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{h} \left(-\frac{1}{2}f(x_0 - h) + \frac{1}{2}f(x_0 + h) \right) - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\zeta_1) \quad (e)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{h} \left(\frac{1}{2}f(x_0 - 2h) - 2f(x_0 - h) + \frac{3}{2}f(x_0) \right) + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\zeta_2) \quad (f)$$

(4.13)

Noten que las expresiones (a) y (f) son en realidad la misma fórmula si uno cambiara h por $-h$. Ambas nos dan la derivada en un punto extremo de un intervalo, utilizando dos puntos que se encuentran a un mismo lado. Por otro lado, la expresión (e) es distinta, ya que calcula la derivada en un punto utilizando la información en dos puntos vecinos que están uno a cada lado. En resumen, de las tres fórmulas que obtuvimos sólo dos son en realidad distintas, las expresiones (a) y (e). A éstas se les llama **fórmulas de tres puntos para aproximar la derivada primera de una función**.

Es importante reconocer que el error cometido es menor en la expresión (e). Esto proviene del hecho de usar información a ambos lados de x_0 , mientras que en las otras fórmulas sólo lo hacemos de un solo lado. De manera análoga puede derivarse la fórmula de 5 puntos para aproximar también la derivada primera, ahora con un error proporcional a h^4 .

* * *

4.2. Aproximación de la derivada segunda

Es posible aproximar la derivada segunda, o de orden superior, usando polinomios de Taylor. Para ello, primero desarrollaremos la función $f(x)$ hasta orden 3 alrededor de x_0 y, luego, la evaluaremos en $x_0 + h$ y en $x_0 - h$. Así, obtenemos

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{1}{2}f''(x_0)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x_0)h^3 + \frac{1}{24}f^{(4)}(\xi_1)h^4, \quad x_0 < \xi_1 < x_0 + h \quad (4.14)$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{1}{2}f''(x_0)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x_0)h^3 + \frac{1}{24}f^{(4)}(\xi_2)h^4. \quad x_0 - h < \xi_2 < x_0 \quad (4.15)$$

Sumando miembro a miembro

$$f(x_0 + h) + f(x_0 - h) = 2f(x_0) + f''(x_0)h^2 + \frac{h^4}{24} [f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2)], \quad (4.16)$$

y despejando $f''(x_0)$

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2} [f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)] - \frac{h^2}{24} [f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2)]. \quad (4.17)$$

Si $f^{(4)}(x)$ es continua en $(x_0 - h, x_0 + h)$, existe ξ tal que

$$f^{(4)}(\xi) = \frac{1}{2} [f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2)]. \quad (4.18)$$

Por lo tanto, podemos calcular $f''(x_0)$ con la siguiente expresión

$$\boxed{f''(x_0) = \frac{1}{h^2} [f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)] - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi)}. \quad (4.19)$$

4.3. Errores y derivación numérica

Supongamos que estamos calculando $f'(x_0)$ mediante una de las aproximaciones que usa 3 puntos:

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [f(x_0 + h) - f(x_0 - h)] - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1). \quad (4.20)$$

Como la computadora introduce errores de redondeo, vamos a explicitarlos de la siguiente forma:

$$f(x_0 + h) = \tilde{f}(x_0 + h) + e_+, \quad (4.21)$$

$$f(x_0 - h) = \tilde{f}(x_0 - h) + e_-, \quad (4.22)$$

donde e_+ y e_- son los errores de redondeo que aparecen al calcular $f(x_0+h)$ y $f(x_0-h)$, respectivamente. Es importante reconocer que en este caso estamos hablando de errores absolutos. Introduciendo estas expresiones en la fórmula para calcular la derivada

$$f'(x_0) - \frac{\tilde{f}(x_0+h) - \tilde{f}(x_0-h)}{2h} = \frac{e_+ - e_-}{2h} - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1). \quad (4.23)$$

Esta expresión nos dice que el error (miembro derecho) tiene una contribución por redondeo y otra por truncamiento. Si suponemos que el error de redondeo está acotado por $\varepsilon > 0$ y que $|f^{(3)}(\xi)| < M$, tenemos finalmente

$$\left| f'(x_0) - \frac{\tilde{f}(x_0+h) - \tilde{f}(x_0-h)}{2h} \right| < \frac{\varepsilon}{h} + \frac{Mh^2}{6}. \quad (4.24)$$

En consecuencia, si reducimos h disminuye el error de truncamiento pero aumenta el de redondeo. A esto se denomina **inestabilidad de la derivación numérica** y es una característica de las técnicas de aproximación de derivadas. Disminuyendo mucho h se puede producir un aumento muy importante del error de redondeo ya que éste va con ε/h .

4.4. Extrapolación de Richardson

La extrapolación de Richardson combina fórmulas de aproximación de bajo orden para obtener aproximaciones de mayor orden. Para poder utilizarla, es necesario que la técnica de aproximación tenga un error de forma predecible y que éste dependa de un parámetro, por ejemplo, el tamaño de la discretización (h).

Supongamos entonces que tenemos una fórmula de aproximación $N(h)$ (por ejemplo, la fórmula para la derivada primera o segunda de una función en un punto) para aproximar un valor desconocido M y que el error de truncamiento es

$$M - N(h) = K_1h + K_2h^2 + K_3h^3 + \dots \quad (4.25)$$

donde K_1, K_2, \dots son constantes desconocidas, pero que no dependen de h . En esta expresión veo que mi aproximación es $O(h)$, por lo tanto, para h pequeño podemos escribir

$$M - N(h) \approx K_1h. \quad (4.26)$$

Lo que quiero hacer es generar una nueva aproximación $\tilde{N}(h)$ a partir de $N(h)$, tal que

$$\tilde{N}(h) \approx O(h^2), \quad (4.27)$$

o, si fuera posible, de mayor orden. Veamos cómo se puede lograr esto. Comencemos por escribir (4.25) como

$$M = N(h) + K_1h + K_2h^2 + K_3h^3 + \dots \quad (A)$$

Evaluemos ahora usando $h/2$:

$$M = N(h/2) + \frac{K_1}{2}h + \frac{K_2}{4}h^2 + \frac{K_3}{8}h^3 + \dots \quad (B)$$

Si hacemos 2(B)-(A) es posible eliminar el término en h y obtener

$$\begin{aligned} M &= [2N(h/2) - N(h)] + K_2 \left(\frac{h^2}{2} - h^2 \right) + K_3 \left(\frac{h^3}{4} - h^3 \right) + \dots \\ &= [2N(h/2) - N(h)] - \frac{1}{2}K_2h^2 - \frac{3}{4}K_3h^3 + \dots \end{aligned} \quad (4.28)$$

Por lo tanto, si llamamos al algoritmo inicial N como N_1 , podemos identificar como algoritmo “mejorado” al siguiente

$$N_2(h) = 2N_1(h/2) - N_1(h) = \boxed{N_1(h/2) + [N_1(h/2) - N_1(h)]}, \quad (4.29)$$

que nos da una aproximación $O(h^2)$ para M :

$$M = N_2(h) - \frac{1}{2}K_2h^2 - \frac{3}{4}K_3h^3 + \dots \quad (4.30)$$

* * *

Ejemplo

Sea la función $f(x) = e^x$ cuya derivada en $x = 0,5$ es

$$f'(0,5) = e^x|_{x=0,5} \approx 1,64872 \quad (4.31)$$

Para realizar el cálculo numérico vamos a usar el algoritmo

$$N_1(h) = \frac{e^{x+h} - e^x}{h}. \quad (4.32)$$

Implementándolo para $x = 0,5$ y aplicando la extrapolación de Richardson se obtiene:

$$N_1(0,1) \approx 1,73398 \quad (4.33)$$

$$N_2(0,1) \approx 1,69063 \quad (4.34)$$

* * *

Es posible continuar el proceso descrito más arriba. Para mayor claridad, repetimos acá la expresión (4.30) y la rebautizamos:

$$M = N_2(h) - \frac{1}{2}K_2h^2 - \frac{3}{4}K_3h^3 + \dots \quad (C)$$

Ahora tomemos $h/2$ en esta expresión para obtener

$$M = N_2(h/2) - \frac{1}{8}K_2h^2 - \frac{3}{32}K_3h^3 + \dots \quad (D)$$

Finalmente, hagamos 4(D)-(C) con el objetivo de eliminar el término en h^2

$$4M - M = 4 \left[N_2(h/2) - \cancel{\frac{1}{8}K_2h^2} - \frac{3}{32}K_3h^3 + \dots \right] - \left[N_2(h) - \cancel{\frac{1}{2}K_2h^2} - \frac{3}{4}K_3h^3 + \dots \right] \quad (4.35)$$

con lo cual nos queda

$$3M = 4N_2(h/2) - N_2(h) + \frac{3}{8}K_3h^3 + \dots \quad (4.36)$$

que podemos escribir como

$$M = N_2(h/2) + \frac{N_2(h/2) - N_2(h)}{3} + \frac{1}{8}K_3h^3 + \dots \quad (4.37)$$

Así, es posible identificar

$$N_3(h) = N_2(h/2) + \frac{N_2(h/2) - N_2(h)}{3}, \quad (4.38)$$

como una fórmula de $O(h^3)$. Noten cómo esta fórmula no requiere del diseño de un nuevo algoritmo, tan sólo se basa en la implementación del algoritmo inicial combinando luego los resultados obtenidos para diferentes pasos h .

El proceso puede continuarse para obtener la siguiente expresión general:

$$N_j(h) = N_{j-1}(h/2) + \frac{N_{j-1}(h/2) - N_{j-1}(h)}{2^{j-1} - 1}, \quad (4.39)$$

que nos provee una aproximación de orden $O(h^j)$. Esta expresión va a ser utilizada cuando integremos numéricamente.

4.5. Integración numérica

La idea básica es aproximar la integral definida

$$\int_a^b f(x)dx, \quad (4.40)$$

mediante una suma

$$\sum_{i=1}^n a_i f(x_i), \quad (4.41)$$

donde los x_i son puntos dentro del intervalo $[a, b]$ o (a, b) , y los pesos a_i se obtienen como veremos a continuación. Esta manera de aproximar una integral se llama “cuadratura” y uno suele decir “integrando por cuadraturas...” cuando utiliza estas técnicas para integrar.

Vamos a utilizar los polinomios de Lagrange que definimos para interpolación:

$$f(x) = P_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{k=0}^n (x - x_k). \quad (4.42)$$

Integrando $f(x)$ entre a y b obtenemos

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_n(x)dx + \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x)) \prod_{k=0}^n (x - x_k)dx, \quad a \leq \xi(x) \leq b. \quad (4.43)$$

Trabajemos con la primera integral:

$$\int_a^b P_n(x)dx = \int_a^b \sum_{k=0}^n f(x_k)L_k(x)dx = \sum_{k=0}^n f(x_k) \underbrace{\int_a^b L_k(x)dx}_{a_k}. \quad (4.44)$$

De acá puede verse que la idea para aproximar la integral de una función dada consiste en evaluar a la función en un cierto número de puntos y luego sumar los productos de estas evaluaciones por las integrales de los polinomios $L_k(x)$. Estas últimas integrales son las que nos brindan los pesos.

Veamos un caso particular. Sea el intervalo $[a, b]$ y consideremos dos puntos $x_0 = a$ y $x_1 = b$:

$$\int_a^b f(x)dx \approx f(x_0) \int_{x_0}^{x_1} L_0(x)dx + f(x_1) \int_{x_0}^{x_1} L_1(x)dx. \quad (4.45)$$

Haciendo las cuentas podemos verificar que

$$\int_{x_0}^{x_1} L_0(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx = \frac{1}{2}(x_1 - x_0), \quad (4.46)$$

$$\int_{x_0}^{x_1} L_1(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} dx = \frac{1}{2}(x_1 - x_0). \quad (4.47)$$

En consecuencia

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(x_1 - x_0)}{2} [f(x_0) + f(x_1)]. \quad (4.48)$$

¿Qué pasa con el error?

$$E = \int_{x_0}^{x_1} \frac{f''(\xi(x))}{2} (x - x_0)(x - x_1)dx, \quad x_0 \leq \xi(x) \leq x_1. \quad (4.49)$$

Como $(x - x_0)(x - x_1)$ no cambia de signo en el intervalo $[x_0, x_1]$, podemos escribir la expresión anterior de la siguiente manera

$$E = \frac{f''(\xi_1)}{2} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)dx, \quad x_0 \leq \xi_1 \leq x_1. \quad (4.50)$$

Calculando la integral y haciendo $x_1 - x_0 = h$ obtenemos para el error

$$E = -\frac{f''(\xi_1)}{12}h^3. \quad (4.51)$$

En resumen, cuando usamos dos puntos para aproximar la integral el algoritmo resultante es

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)], \quad (4.52)$$

que contiene un error de

$$E = -\frac{f''(\xi_1)}{12}h^3. \quad (4.53)$$

Esta fórmula de aproximación se denomina **regla del trapecio** ya que si $f(x) > 0$, se aproxima la integral de $f(x)$ por el área del trapecio siguiente (realizaremos la figura en clase):

(*) Observen que esta integral es exacta si $f(x)$ es de la forma $ax + b$, ya que el error va con $f''(x)$.

* * *

Consideremos ahora otro caso, cuando tenemos 3 puntos. Gráfico:

Aproximamos la integral ahora de la siguiente manera

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^2 f(x_k)a_k, \quad (4.54)$$

donde

$$a_0 = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} dx, \quad (4.55)$$

$$a_1 = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} dx, \quad (4.56)$$

y

$$a_2 = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} dx. \quad (4.57)$$

Resolviendo estas integrales y haciendo nuevamente $x_1 - x_0 = h$ y $x_2 - x_1 = h$ resulta la expresión

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]}, \quad (4.58)$$

que se llama **regla de Simpson**. Puede probarse que

$$\boxed{E = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)}, \quad (4.59)$$

de modo que esta regla de cuadratura es exacta hasta polinomios de grado 3 (aunque estemos considerando 3 puntos, es decir, un polinomio interpolador de grado 2). Veremos luego por qué esto es así.

Tanto la regla del trapecio como la fórmula de Simpson son dos casos particulares de un conjunto de métodos llamados **fórmulas de Newton-Cotes**, que tienen validez cuando las abscisas están equiespaciadas. Existen dos tipos de estas fórmulas, las ABIERTAS y CERRADAS. Se diferencian en que en las cerradas los extremos del intervalo de integración forman parte del conjunto de puntos a interpolar, mientras que en el caso de las abiertas no lo hacen.

Veamos entonces la forma general de las fórmulas cerradas de Newton-Cotes.

4.5.1. Fórmulas de Newton-Cotes cerradas

De acuerdo con lo que vimos al principio

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_{a=x_0}^{b=x_n} P_n(x)dx = \sum_{k=0}^n f(x_k)a_k, \quad (4.60)$$

donde

$$a_k = \int_{x_0}^{x_n} L_k(x)dx. \quad (4.61)$$

Sea $x_k = x_0 + hk$, con $k = 0, 1, \dots, n$ y $h = (b - a)/n$. Hagamos el cambio de variable de x a s

$$x = a + hs \quad \Rightarrow \quad dx = h ds, \quad (4.62)$$

de manera tal que

$$\begin{aligned} x = x_0 &\quad \Rightarrow \quad s = 0, \\ x = x_n &\quad \Rightarrow \quad s = n. \end{aligned} \quad (4.63)$$

Veamos cómo escribir

$$L_k(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\dots(x - x_n)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1)\dots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\dots(x_k - x_n)} \quad (4.64)$$

en términos de la nueva variable. Los factores del numerador se transforman en

$$\begin{aligned} x - x_0 &= a + hs - a = hs \\ x - x_1 &= a + hs - (a + h) = h(s - 1) \\ x - x_2 &= h(s - 2) \\ x - x_{k-1} &= h(s - k + 1) \\ x - x_{k+1} &= h(s - k - 1) \\ x - x_n &= h(s - n), \end{aligned} \quad (4.65)$$

mientras que los del denominador

$$\begin{aligned} x_k - x_0 &= a + hk - a = hk \\ x_k - x_{k-1} &= a + hk - [a + h(k - 1)] = h \\ x_k - x_n &= a + hk - (a + hn) = h(k - n). \end{aligned} \quad (4.66)$$

Reemplazando en la expresión de a_k

$$a_k = \int_{x_0}^{x_n} L_k(x) dx = h \int_0^n \frac{s(s-1)(s-2)\dots(s-(k-1))(s-(k+1))\dots(s-n)}{k(k-1)(k-2)\dots(k-(k-1))(k-(k+1))\dots(k-n)} ds. \tag{4.67}$$

De modo que aquí se ve claramente que los pesos no dependen de la función que estamos integrando sino sólo del número de puntos de los que dispongo y de la abscisa que estoy considerando.

Podemos corroborar estas fórmulas tomando 3 puntos:

$$a_0 = h \int_0^2 \frac{(s-1)(s-2)}{(-1)(-2)} ds = \frac{h}{3}, \tag{4.68}$$

$$a_1 = h \int_0^2 \frac{(s-0)(s-2)}{(1-0)(1-2)} ds = \frac{4}{3}h, \tag{4.69}$$

$$a_2 = h \int_0^2 \frac{(s-0)(s-1)}{(2-0)(2-1)} ds = \frac{h}{3}, \tag{4.70}$$

con lo que obtenemos

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = h \left[\frac{1}{3}f(x_0) + \frac{4}{3}f(x_1) + \frac{1}{3}f(x_2) \right]}. \tag{regla de Simpson} \tag{4.71}$$

Es posible probar que el error se porta como:

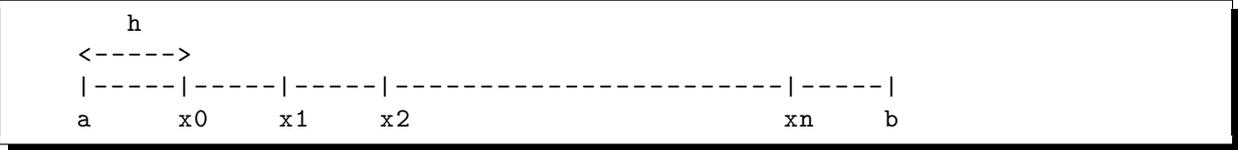
$$\boxed{E = \frac{h^{n+3} f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_0^n s^2(s-1)\dots(s-n) ds}, \tag{para } n \text{ par} \tag{4.72}$$

$$\boxed{E = \frac{h^{n+2} f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_0^n s(s-1)\dots(s-n) ds}. \tag{para } n \text{ impar} \tag{4.73}$$

Entonces se ve aquí por qué la fórmula de Simpson tiene error de orden $O(h^5)$: como $n = 2$, debemos usar la fórmula del error para n par, que se porta mejor que la de los impares. En general, conviene usar fórmulas de cuadraturas con un número impar de puntos y, en caso de agregar, hacerlo de a pares y no de a uno.

4.5.2. Fórmulas de Newton-Cotes abiertas

Para el caso de las fórmulas abiertas tenemos $n + 1$ puntos que están dentro del intervalo $[a, b]$. Se suele usar la siguiente notación: $a = x_{-1}$ y $b = x_{n+1}$, de modo que tenemos



donde

$$h = \frac{b-a}{n+2}, \quad x_0 = a+h, \quad x_1 = a+2h, \dots \quad x_n = a+(n+1)h = b-h. \tag{4.74}$$

Con esta notación, hacemos

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{x_{-1}}^{x_{n+1}} f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n a_k f(x_k) \tag{4.75}$$

donde, como antes

$$a_k = \int_{x_{-1}}^{x_{n+1}} L_k(x) dx. \tag{4.76}$$

Ojo, notar que los coeficientes no son iguales que los de las fórmulas cerradas.

Es posible probar que las fórmulas de error para este caso son muy parecidas a las cerradas, variando sólo el coeficiente de las mismas.

Hay que tener en cuenta que sobre la base de un número fijo de subintervalos en los que se divide al intervalo $[a, b]$ las fórmulas cerradas interpolan $(n + 1)$ puntos y las abiertas $(n - 1)$, por lo que la precisión de la cerrada es mayor, al precio de dos evaluaciones más de la función.

Ejemplos de fórmulas abiertas

Caso $n = 0$ (un punto, x_0):

$$\boxed{\int_{x_{-1}}^{x_1} f(x)dx = 2hf(x_0) + \frac{h^3}{3}f''(\xi)}, \quad x_{-1} \leq \xi \leq x_1, \quad (4.77)$$

que se denomina la **regla del punto medio**.

Caso $n = 1$ (dos puntos, x_0 y x_1):

$$\boxed{\int_{x_{-1}}^{x_2} f(x)dx = \frac{3}{2}h[f_0 + f_1] + \frac{3h^3}{4}f''(\xi)}, \quad x_{-1} \leq \xi \leq x_2 \quad (4.78)$$

aquí se ve claro por qué no conviene agregar de a UN único punto. Notación: $f(x_0) \equiv f_0$, $f(x_1) \equiv f_1$.

Caso $n = 2$ (tres puntos, x_0 , x_1 y x_2):

$$\boxed{\int_{x_{-1}}^{x_3} f(x)dx = \frac{4}{3}h[2f_0 - f_1 + 2f_2] + \frac{14h^5}{25}f^{(iv)}(\xi)}, \quad x_{-1} \leq \xi \leq x_3 \quad (4.79)$$

aquí se ve claro por qué no conviene agregar de a UN único punto.

4.6. Integración numérica compuesta

¿Qué sucede si el intervalo de integración es grande? En este caso, debemos usar, si utilizamos las fórmulas de Newton-Cotes, polinomios interpoladores de grado alto, lo que necesariamente nos lleva a resultados imprecisos, dada la naturaleza oscilatoria de los mismos (efecto Runge). Una alternativa es utilizar repetidamente las fórmulas de orden bajo en el intervalo.

Ejemplo

$$\int_{-1}^4 x^2 dx = 21.\widehat{6} \quad (4.80)$$

Usando la fórmula del trapecio obtenemos

$$\frac{1}{2}h[f(x_0) + f(x_1)] = \frac{5}{2}[(-1)^2 + 4^2] = \frac{5 \times 17}{2} = 42,5, \quad (4.81)$$

un resultado muy malo. Tomemos ahora la siguiente partición:

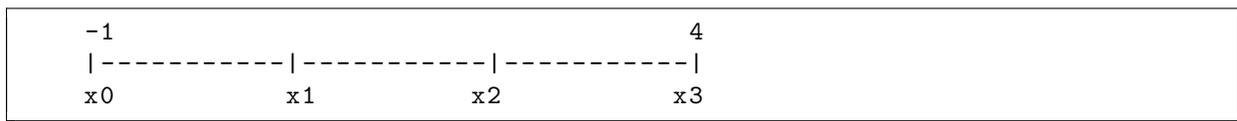
-1	4
----- -----	
x_0	x_1 x_2

donde ahora $h = [4 - (-1)]/2 = 2,5$. Apliquemos la fórmula del trapecio entre x_0 y x_1 primero, y luego entre x_1 y x_2 . Esto claramente puede hacerse, ya que

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] + \frac{h}{2} [f(x_1) + f(x_2)] \\
&= \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + f(x_2)] \\
&= \frac{2,5}{2} [(-1)^2 + 2 \times 1,5^2 + 16] \\
&= 24,0625,
\end{aligned} \tag{4.82}$$

un resultado mucho mejor que el anterior. Si en lugar de considerar 3 puntos consideráramos 4:



ahora $h = [4 - (-1)]/3 = 5/3$ y la solución aproximada que obtendríamos sería

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx &= \frac{5}{6} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + f(x_3)] \\
&= \frac{5}{6} \left[(-1)^2 + 16 + \frac{8}{9} + \frac{98}{9} \right] \\
&= 23,98
\end{aligned} \tag{4.83}$$

Para la extensión a cualquier número de puntos, damos el siguiente teorema.

Teorema. Sea $f \in C^2[a, b]$, $h = (b - a)/n$ y $x_j = a + jh$, con $j = 0, 1, \dots, n$. Entonces, existe $\mu \in (a, b)$ tal que la regla del trapecio compuesta para n subintervalos es

$$\int_{a=x_0}^{b=x_n} f(x)dx = \frac{h}{2} \left[f(x_0) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(x_n) \right] - \frac{b-a}{12} h^2 f''(\mu). \tag{4.84}$$

Para el caso de la regla de Simpson compuesta, tenemos este otro teorema.

Teorema. Sea $f \in C^4[a, b]$, n par, $h = (b - a)/n$ y $x_j = a + jh$, con $j = 0, 1, \dots, n$. Entonces existe $\mu \in (a, b)$ tal que la regla de Simpson compuesta para n subintervalos es

$$\int_{a=x_0}^{b=x_n} f(x)dx = \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 2 \sum_{k=1}^{n/2-1} f(x_{2k}) + 4 \sum_{k=1}^{n/2} f(x_{2k-1}) + f(x_n) \right] - \frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\mu). \tag{4.85}$$

Observen que en estos dos teoremas no hay mucho secreto, ya que lo único que hay que hacer es sumar los aportes en los subintervalos de las fórmulas de aproximación en ellas; lo mismo para el error, en este último caso hay que encontrar una expresión compacta que sale usando teoremas del Análisis I.

4.7. Estabilidad

Vimos que la derivación numérica es inestable, en el sentido que si $h \rightarrow 0$ el error de redondeo crece indefinidamente. ¿Pasa lo mismo con la integración numérica?

Analicemos lo que pasa utilizando la regla de Simpson compuesta aplicada a una función $f(x)$ en subintervalos de $[a, b]$. Haciendo lo mismo que antes, vamos a escribir

$$f(x_i) = \tilde{f}(x_i) + e_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n \tag{4.86}$$

donde $\tilde{f}(x_i)$ es el resultado impreciso que nos da la computadora y e_i el error de redondeo. Así, el error de redondeo que se acumula por todos los subintervalos será

$$\begin{aligned} e(h) &= \left| \frac{h}{3} \left[e_0 + 2 \sum_{j=1}^{n/2-1} e_{2j} + 4 \sum_{j=1}^{n/2} e_{2j-1} + e_n \right] \right| \\ &\leq \frac{h}{3} \left[|e_0| + 2 \sum_{j=1}^{n/2-1} |e_{2j}| + 4 \sum_{j=1}^{n/2} |e_{2j-1}| + |e_n| \right]. \end{aligned} \quad (4.87)$$

Podemos acotar los errores de redondeo, $|e_i| < \varepsilon$, $\forall i = 0, \dots, n$ y así encontramos que

$$\begin{aligned} e(h) &\leq \frac{h}{3} \left[\varepsilon + 2 \sum_{j=1}^{n/2-1} \varepsilon + 4 \sum_{j=1}^{n/2} \varepsilon + \varepsilon \right] \\ &\leq \frac{h}{3} \left[\cancel{\varepsilon} + 2 \left(\frac{n}{2} - \cancel{1} \right) \varepsilon + 4 \frac{n}{2} \varepsilon + \cancel{\varepsilon} \right] \\ &= nh\varepsilon. \end{aligned} \quad (4.88)$$

Recordando que $h = (b - a)/n$ obtenemos finalmente

$$\boxed{e(h) \leq (b - a)\varepsilon.} \quad (4.89)$$

De modo que la integración numérica (lo probamos para Simpson, pero tiene validez general), es tal que un aumento en el número de puntos no implica un incremento en el error por redondeo.

4.8. Integración por Romberg

En este método, la regla del trapecio compuesta es mejorada con la aplicación de la técnica de extrapolación de Richardson. La idea consiste en calcular una secuencia de aproximaciones con la regla del trapecio compuesto, y luego usarla para generar el resultado mediante extrapolación. Lo que debe ser notado es que el integrando es evaluado solamente durante la utilización de la regla del trapecio, pero no cuando extrapolamos. Recordemos que la fórmula del trapecio compuesta es:

$$\int_{a=x_0}^{b=x_m} f(x)dx = \frac{h}{2} \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{k=1}^{m-1} f(x_k) \right] - \frac{b-a}{12} h^2 f''(\mu), \quad (4.90)$$

donde $a < \mu < b$, $h = (b - a)/m$ y $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \dots, m$. Sea ahora

$$m_1 = 1, \quad m_2 = 2, \quad m_3 = 4, \dots \quad m_n = 2^{n-1}. \quad (4.91)$$

Luego, el paso correspondiente a m_k será

$$h_k = \frac{b-a}{m_k} = \frac{b-a}{2^{k-1}}. \quad (4.92)$$

Con esta notación, reescribimos la fórmula del trapecio compuesta como:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h_k}{2} \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{j=1}^{2^{k-1}-1} f(a + jh_k) \right] - \frac{b-a}{12} h_k^2 f''(\mu_k) \quad (4.93)$$

donde para cada k , corresponde un $a < \mu_k < b$.

Veamos cómo podemos escribir las expresiones para distintos valores de k . Para $k = 1$:

$$R_{1,1} = \frac{h_1}{2} [f(a) + f(b)], \quad (4.94)$$

donde $h_1 = b - a$. Para $k = 2$

$$R_{2,1} = \frac{h_2}{2}[f(a) + f(b) + 2f(a + h_2)], \quad (4.95)$$

con $h_2 = (b - a)/2 = h_1/2$. Haciendo unas cuentas sencillas podemos constatar que

$$\begin{aligned} R_{2,1} &= \frac{1}{2} \frac{h_1}{2} [f(a) + f(b) + 2f(a + h_2)] \\ &= \frac{1}{2} [R_{1,1} + h_1 f(a + h_2)]. \end{aligned} \quad (4.96)$$

De la fórmula general tenemos para $k = 3$:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \frac{h_3}{2} \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{j=1}^3 f(a + jh_3) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{h_2}{2} (f(a) + f(b)) + 2 \frac{h_2}{2} \sum_{j=1}^3 f(a + jh_3) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{h_2}{2} (f(a) + f(b) + 2f(a + h_2)) + h_2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^3 f(a + jh_3) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[R_{2,1} + h_2 (f(a + h_3) + f(a + 3h_3)) \right]. \end{aligned} \quad (4.97)$$

En general, para m_k de la forma elegida, vale

$$R_{k,1} = \frac{1}{2} \left[R_{k-1,1} + h_{k-1} \sum_{j=1}^{2^{k-2}} f(a + (2j-1)h_k) \right]. \quad k = 2, 3, \dots, n. \quad (4.98)$$

De esta manera y por la forma elegida para partir el intervalo, podemos calcular una aproximación a la integral en el paso k en base al anterior. Bueno, como ya sabemos, la regla del trapecio converge lento. Ahora introduciremos Richardson. Es posible probar (aunque no es trivial) que, si $f \in C^\infty[a, b]$, vale que

$$\int_a^b f(x)dx - R_{k,1} = \sum_{j=1}^{\infty} K_j h_k^{2j} = K_1 h_k^2 + K_2 h_k^4 + \dots, \quad (4.99)$$

donde los K_j son constantes que dependen de los valores de $f^{(2j-1)}(x)$, a y b , pero son independientes de h_k . Esto lo necesito para poder usar la fórmula de extrapolación de Richardson, puesto que la fórmula del error original no tiene la forma adecuada.

Consideremos

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx - R_{k+1,1} &= \sum_{j=1}^{\infty} K_j h_{k+1}^{2j} \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} K_j \left(\frac{h_k}{2} \right)^{2j} \\ &= \frac{K_1 h_k^2}{4} + \sum_{j=2}^{\infty} K_j \left(\frac{h_k}{2} \right)^{2j} \end{aligned} \quad (4.100)$$

Haciendo (4.99) $- 4 \times (4.100)$

$$\int_a^b f(x)dx - R_{k,1} - 4 \left(\int_a^b f(x)dx - R_{k+1,1} \right) = \cancel{K_1} h_k^2 + \sum_{j=2}^{\infty} K_j h_k^{2j} - 4 \left(\frac{\cancel{K_1} h_k^2}{4} + \sum_{j=2}^{\infty} K_j \left(\frac{h_k}{2} \right)^{2j} \right) \quad (4.101)$$

$$- 3 \int_a^b f(x)dx - R_{k,1} + 4R_{k+1,1} = \sum_{j=2}^{\infty} K_j \left(h_k^{2j} - \frac{h_k^{2j}}{4^{j-1}} \right) \quad (4.102)$$

$$\int_a^b f(x)dx - \left[R_{k+1,1} + \frac{R_{k+1,1} - R_{k,1}}{3} \right] = \sum_{j=2}^{\infty} \frac{K_j}{3} \left(\frac{h_k^{2j}}{4^{j-1}} - h_k^{2j} \right) \quad (4.103)$$

De modo que si tomo como aproximación a la integral la expresión

$$R_{k,2} = R_{k,1} + \frac{R_{k+1,1} - R_{k,1}}{3}, \quad (4.104)$$

tengo un error $O(h_k^4)$, y no de orden h_k^2 como antes de extrapolar. En general, voy a tener entonces

$$R_{k,j} = R_{k,j-1} + \frac{R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}, \quad (4.105)$$

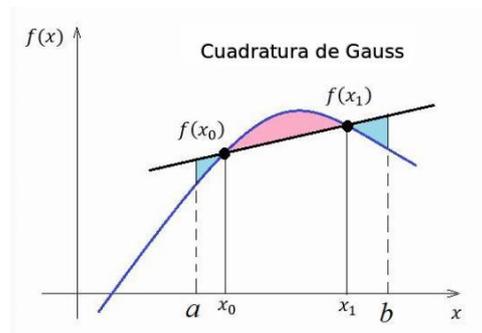
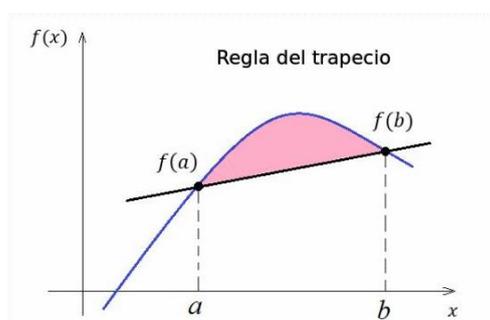
para tener un error de $O(h_k^{2j})$.

¿Cómo procedemos en la práctica? Si deseo extrapolar debo seguir la siguiente un camino que podemos representar con la siguiente tabla:

(completar con esquema)

Con esto terminamos la parte de integración utilizando las fórmulas de Newton-Cotes. Después retomaremos el tema al tratar las fórmulas adaptativas.

4.9. Cuadratura de Gauss



En la figura de la izquierda usamos la fórmula del trapecio, donde los puntos pasan por los extremos del intervalo. En la de la derecha usamos la misma cantidad de puntos pero no necesariamente tienen que estar equidistantes (válido para más de 2 puntos), sino que los fijamos utilizando algún criterio de conveniencia.

Como para otras cuadraturas, la idea de Gauss fue aproximar la integral definida

$$\int_a^b f(x)dx, \quad (4.106)$$

por medio de la sumatoria

$$\sum_{i=1}^n c_i f(x_i), \quad (4.107)$$

de modo tal que esta fórmula sea exacta para polinomios del máximo grado posible.

¿Cómo elegir las abscisas x_i y los pesos c_i para cumplir con este objetivo? En principio no existen restricciones para los pesos c_i , pero sí para los x_i , que deben pertenecer al intervalo de integración. La libertad para elegir los pesos y las abscisas nos da $2n$ grados de libertad (parámetros a fijar). Por otro lado, si consideramos como parámetros a los coeficientes de un polinomio, un polinomio de grado $2n - 1$ poseerá $2n$ parámetros. Por lo tanto, resulta “razonable” pensar que éste, y no otro, va a ser el grado máximo posible.

Observen que esta forma de encarar el problema es más ambiciosa que las fórmulas de Newton-Cotes, ya que antes con $n + 1$ puntos las fórmulas eran exactas, como máximo, para polinomios de grado $n + 1$.

Como ejemplo, tomemos $n = 2$, entonces

$$\int_{a=-1}^{b=1} f(x)dx \approx c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) \quad (4.108)$$

Supongamos que buscamos los pesos y abscisas tales que la cuadratura sea EXACTA para polinomios de grado $2n - 1 = 3$, es decir, para

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3. \quad (4.109)$$

Hagamos las cuentas para ver si esto es posible. Reemplazando $f(x)$ en el miembro derecho de la expresión de más arriba tenemos

$$\begin{aligned} \int_{a=-1}^{b=1} f(x)dx &= c_1(a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + a_3 x_1^3) + c_2(a_0 + a_1 x_2 + a_2 x_2^2 + a_3 x_2^3) \\ &= (c_1 + c_2)a_0 + (c_1 x_1 + c_2 x_2)a_1 + (c_1 x_1^2 + c_2 x_2^2)a_2 + (c_1 x_1^3 + c_2 x_2^3)a_3. \end{aligned} \quad (4.110)$$

El miembro izquierdo es fácil de calcular, de lo que resulta

$$2a_0 + \frac{2}{3}a_2 = (c_1 + c_2)a_0 + (c_1 x_1 + c_2 x_2)a_1 + (c_1 x_1^2 + c_2 x_2^2)a_2 + (c_1 x_1^3 + c_2 x_2^3)a_3. \quad (4.111)$$

Igualando los coeficientes de ambos miembros encontramos cuatro ecuaciones que deben cumplirse simultáneamente:

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 2 \\ c_1 x_1 + c_2 x_2 = 0 \\ c_1 x_1^2 + c_2 x_2^2 = \frac{2}{3} \\ c_1 x_1^3 + c_2 x_2^3 = 0 \end{cases} \quad (4.112)$$

Resolviendo el sistema no lineal encontramos que la solución es

$$c_1 = c_2 = 1, \quad x_1 = -\frac{\sqrt{3}}{3}, \quad x_2 = \frac{\sqrt{3}}{3}. \quad (4.113)$$

De modo que si hago

$$\boxed{\int_{-1}^1 f(x)dx \approx f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)}, \quad (4.114)$$

esta integral va a ser exacta para polinomios de hasta grado 3 (aunque esté evaluando en sólo 2 puntos).

De igual manera podría continuar para los demás casos pero existe una forma más elegante de hacer las cosas, a través de los polinomios de Legendre.

4.9.1. Polinomios de Legendre

Estos polinomios pueden obtenerse, para un dado n , a partir de la fórmula de Rodrigues

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n. \quad (4.115)$$

Así, es fácil encontrar que los primeros polinomios de Legendre son:

$$P_0(x) = 1 \quad (4.116)$$

$$P_1(x) = x \quad (4.117)$$

$$P_2(x) = x^2 - \frac{1}{3} \quad (4.118)$$

$$P_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x. \quad (4.119)$$

Como ven, se trata de polinomios “normales” pero que sin embargo, tienen ciertas propiedades que van a ser muy convenientes para la integración.

Propiedades

1. Para cada n , $P_n(x)$ es un polinomio mónico de grado n
2. Satisfacen la siguiente condición de ortogonalidad:

$$\int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x)dx = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ \frac{2}{2n+1} & n = m \end{cases} \quad (4.120)$$

3. Como consecuencia de la propiedad anterior

$$\int_{-1}^1 P(x)P_n(x)dx = 0, \quad (4.121)$$

si el grado de $P(x)$ es menor que n .

4. Los ceros de $P_n(x) \in (-1, 1)$ y son simétricos respecto del origen.

* * *

Dadas estas propiedades, podemos enunciar el siguiente teorema.

Teorema. Sean x_1, x_2, \dots, x_n las raíces del n -ésimo polinomio de Legendre $P_n(x)$ y sean c_i , con $i = 1, 2, \dots, n$ números definidos por

$$c_i = \int_{-1}^1 \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx = \int_{-1}^1 L_i(x) dx. \quad (4.122)$$

Entonces, si $P(x)$ es un polinomio de grado menor que $2n$, se cumple que

$$\int_{-1}^1 P(x) dx = \sum_{i=1}^n c_i P(x_i). \quad (4.123)$$

Demostración

Vamos primero a considerar a $P(x)$ un polinomio de grado menor que n . $P(x)$ puede escribirse como un polinomio de Lagrange de grado máximo $n - 1$, con nodos en las n raíces del polinomio de Legendre $P_n(x)$. Por lo tanto,

$$P(x) = \sum_{j=1}^n P(x_j) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n \frac{x - x_k}{x_j - x_k} \quad (4.124)$$

e integrando

$$\int_{-1}^1 P(x) dx = \sum_{j=1}^n P(x_j) \int_{-1}^1 \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n \frac{x - x_k}{x_j - x_k} dx = \sum_{j=1}^n P(x_j) c_j. \quad (4.125)$$

En consecuencia, vale para polinomios de grado menor que n .

Consideremos ahora polinomios $P(x)$ de grado mayor o igual a n pero menor que $2n$. Podemos hacer

$$P(x) = Q(x)P_n(x) + R(x), \quad (4.126)$$

donde $Q(x)$ y $R(x)$ son polinomios de grado menor que n . Si evaluamos en las raíces de los polinomios de Legendre x_i , $i = 1, 2, \dots, n$ tenemos

$$P(x_i) = Q(x_i)P_n(x_i) + R(x_i) = R(x_i). \quad (4.127)$$

Por ser el grado de $Q(x)$ menor que n , se cumple que

$$\int_{-1}^1 Q(x)P_n(x) dx = 0. \quad (4.128)$$

Además, por lo que demostramos para polinomios de grado menor que n , vale que

$$\int_{-1}^1 R(x) dx = \sum_{i=1}^n c_i R(x_i). \quad (4.129)$$

En consecuencia,

$$\int_{-1}^1 P(x) dx = \int_{-1}^1 Q(x)P_n(x) dx + \int_{-1}^1 R(x) dx = \sum_{i=1}^n c_i R(x_i) = \sum_{i=1}^n c_i P(x_i), \quad (4.130)$$

y vale también para polinomios de grado menor que $2n$, que era lo que queríamos demostrar.

Observaciones

- Tanto los ceros de los polinomios de Legendre como los pesos c_i están tabulados, no es necesario calcularlos.
- Si sólo pudiéramos aplicar la cuadratura de Gauss a integrales definidas en el intervalo $[-1, 1]$ no sería de gran utilidad. Para integrales definidas en otros intervalos podemos hacer lo siguiente. Sea una integral

$$\int_a^b f(x) dx. \quad (4.131)$$

Proponemos el cambio de variables

$$x = \frac{1}{2}[(b-a)t + a + b] \quad \Rightarrow \quad dx = \frac{b-a}{2} dt, \quad (4.132)$$

de manera tal que para $t = -1$ tendremos que $x = a$ y en $t = 1$, $x = b$. Reemplazando en la integral

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{1}{2}(b-a)t + \frac{b+a}{2}\right) dt. \quad (4.133)$$

En consecuencia

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n c_i f\left(\frac{1}{2}(b-a)x_i + \frac{b+a}{2}\right), \quad (4.134)$$

y podemos usar la cuadratura de Gauss sobre cualquier intervalo $[a, b]$.

- El error de la cuadratura con $P_n(x)$ es

$$\int_a^b f(x)dx - \sum_{i=1}^n c_i f(x_i) = \frac{(b-a)^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)(2n!)^3} f^{(2n)}(\xi). \quad (4.135)$$

4.10. Cálculo de integrales impropias

Recordemos que hablamos de integrales impropias cuando sucede una de dos cosas:

1. dentro del intervalo de integración la función diverge, o
2. uno o más límites de integración es infinito.

Consideremos el caso en el que el integrando es singular en el límite inferior de integración

$$\lim_{x \rightarrow a^+} f(x) = \pm\infty, \quad (4.136)$$

Del análisis sabemos que

$$\int_a^b \frac{1}{(x-a)^p} dx, \quad (4.137)$$

converge sí y sólo sí $0 < p < 1$, en cuyo caso resulta igual a:

$$\frac{(x-a)^{1-p}}{1-p} \Big|_a^b = \frac{(b-a)^{1-p}}{1-p}. \quad (4.138)$$

Consideremos el caso en que $f(x)$ puede escribirse como

$$f(x) = \frac{g(x)}{(x-a)^p}. \quad (4.139)$$

Si $0 < p < 1$ y $g(x) \in C[a, b]$ entonces $f(x)$ es integrable en $[a, b]$. Para este caso particular es posible usar, por ejemplo, la regla de la Simpson compuesta, exigiendo además que $g(x) \in C^5[a, b]$ (esto es un poco más de lo que se exigía para Simpson). Si esto se cumple, podemos desarrollar a $g(x)$ en polinomio de Taylor hasta orden 4 alrededor de $x = a$. Sea $P_4(x)$ este polinomio. Así, podemos escribir

$$\int_a^b \frac{g(x)}{(x-a)^p} dx = \int_a^b \frac{g(x) - P_4(x)}{(x-a)^p} dx + \int_a^b \frac{P_4(x)}{(x-a)^p} dx. \quad (4.140)$$

La segunda integral puede ser calculada analíticamente

$$\int_a^b \frac{P_4(x)}{(x-a)^p} dx = \sum_{k=0}^4 \int_a^b \frac{g^{(k)}(a)}{k!} (x-a)^{k-p} dx = \sum_{k=0}^4 \frac{g^{(k)}(a)}{k!(k-p+1)} (b-a)^{k-p+1}. \quad (4.141)$$

Este término contiene la principal contribución a la integral, especialmente cuando $P_4(x)$ está cercano a $g(x)$ en todo el intervalo $[a, b]$.

Calculemos ahora la otra integral

$$\int_a^b \frac{g(x) - P_4(x)}{(x-a)^p} dx. \quad (4.142)$$

Para ello, definimos

$$G(x) = \begin{cases} \frac{g(x) - P_4(x)}{(x-a)^p} & \text{si } a < x \leq b \\ 0 & \text{si } x = a. \end{cases} \quad (4.143)$$

Noten que $g^{(k)}(x)|_{x=a} = P_4^{(k)}(x)|_{x=a}$ para $k = 0, 1, 2, 3, 4$ y que $G(x) \in C^4[a, b]$. En consecuencia, se puede usar la fórmula de Simpson compuesta para aproximar esta integral.

El resultado final, que es la suma de los dos términos que analizamos, tiene el error de la regla de Simpson compuesta (ya que el otro término pudo resolverse en forma analítica).

Ejemplo

Integrar numéricamente

$$\int_0^1 \frac{e^x}{\sqrt{x}} dx, \quad (4.144)$$

utilizando la regla de Simpson compuesta con paso $h = 0,25$. Notamos la naturaleza impropia de la integral dada la singularidad en $x = 0$.

Para resolver la integral utilizando el método descrito más arriba primero debemos calcular el polinomio de Taylor de grado 4 del numerador

$$P_4(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24}. \quad (4.145)$$

La integral que podemos calcular analíticamente es

$$\begin{aligned} \int_0^1 \frac{P_4(x)}{\sqrt{x}} dx &= \int_0^1 \left(x^{-1/2} + x^{1/2} + \frac{1}{2}x^{3/2} + \frac{1}{6}x^{5/2} + \frac{1}{24}x^{7/2} \right) dx \\ &= \lim_{a \rightarrow 0^+} \left[2x^{1/2} + \frac{2}{3}x^{3/2} + \frac{1}{5}x^{5/2} + \frac{1}{21}x^{7/2} + \frac{1}{108}x^{9/2} \right]_a^1 \\ &= 2 + \frac{2}{3} + \frac{1}{5} + \frac{1}{21} + \frac{1}{108} \approx 2,9235450. \end{aligned} \quad (4.146)$$

Definimos ahora la función $G(x)$

$$G(x) = \begin{cases} \frac{e^x - P_4(x)}{\sqrt{x}} & \text{para } 0 < x \leq 1, \\ 0 & \text{para } x = 0. \end{cases} \quad (4.147)$$

Tabulamos los valores aproximados de $G(x)$ para $h = 0,25$:

x	$G(x)$
0.00	0
0.25	0.0000170
0.50	0.0004013
0.75	0.0026026
1.00	0.0099485

y aplicamos la regla de Simpson compuesta

$$\int_0^1 G(x) dx \approx \frac{0,25}{3} [0 + 4 \times 0,0000170 + 2 \times 0,0004013 + 4 \times 0,0026026 + 0,0099485] = 0,0017691. \quad (4.148)$$

Juntando ambos resultados

$$\int_0^1 \frac{e^x}{\sqrt{x}} dx \approx 2,9235450 + 0,0017691 = 2,9253141. \quad (4.149)$$

El error está dado por el de la regla de Simpson compuesta que usamos para integrar $G(x)$. Como $|G^4(x)| < 1$ en $[0, 1]$, podemos acotar el error por

$$\left| \frac{b-a}{180} h^4 G^4(\xi) \right| < \frac{1-0}{180} \times 0,25^4 = 0,0000217. \quad (4.150)$$

* * *

Para resolver un problema donde la singularidad esté en el límite superior de integración, se puede:

1. desarrollar por Taylor alrededor de b y repetir el proceso anterior, o
2. hacer

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-b}^{-a} f(-z)dz, \quad (4.151)$$

que tiene la singularidad en $-b$, así usamos el desarrollo previo.

- Si la singularidad está en algún punto interior del intervalo, hay que tratarlo como la suma de dos integrales, una con singularidad en el límite inferior y otra con singularidad en el límite superior.

Finalmente, consideremos el caso

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx \quad (4.152)$$

y supongamos que $f(x)$ es integrable. Hacemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = \int_{-\infty}^c f(x)dx + \int_c^{\infty} f(x)dx. \quad (4.153)$$

La segunda integral puede resolverse haciendo un cambio de variables

$$\int_c^{\infty} f(x)dx = \int_0^{1/c} t^{-2} f(1/t)dt, \quad (4.154)$$

que tiene una singularidad en $t = 0$. Esta integral puede resolverse como vimos antes.

- Otra posibilidad es la utilización de cuadraturas gaussianas, esta vez, usando en vez de polinomios de Legendre los polinomios de Laguerre, que son ortogonales sobre el intervalo $[0, \infty)$, o los polinomios de Hermite, que son ortogonales en el intervalo $(-\infty, \infty)$.

4.10.1. Integración vía polinomios de Laguerre

Los polinomios de Laguerre pueden obtenerse de la siguiente manera:

$$\mathcal{L}_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n), \quad n \geq 0, \quad (4.155)$$

o bien, a través del siguiente método recursivo:

$$\mathcal{L}_{-1}(x) = 0,$$

$$\mathcal{L}_0(x) = 1,$$

$$\mathcal{L}_{n+1}(x) = (2n + 1 - x)\mathcal{L}_n(x) - n^2\mathcal{L}_{n-1}(x), \quad n \geq 0. \quad (4.156)$$

Para aproximar una integral de la forma

$$\int_0^{\infty} f(x)dx, \quad (4.157)$$

lo primero que hacemos es definir una función $\varphi(x) = e^x f(x)$ de manera tal que podemos escribir

$$I = \int_0^{\infty} f(x)dx = \int_0^{\infty} e^{-x}\varphi(x)dx. \quad (4.158)$$

Luego, basta aplicar la cuadratura de Laguerre que nos da

$$\boxed{I = \sum_{k=1}^n \alpha_k \varphi(x_k) + E}, \quad (4.159)$$

donde el error está dado por

$$E = \frac{(n!)^2}{(2n)!} \varphi^{(2n)}(\xi), \quad 0 < \varphi < \infty. \quad (4.160)$$

Los x_k , $k = 1, 2, \dots, n$ son los ceros de $\mathcal{L}_n(x)$ y

$$\alpha_k = \frac{(n!)^2 x_k}{(\mathcal{L}_{n+1}(x_k))^2}. \quad (4.161)$$

4.10.2. Integración vía polinomios de Hermite

La cuadratura de Hermite permite aproximar integrales impropias de la forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx. \quad (4.162)$$

Para lograr esto, necesitamos de los polinomios de Hermite que pueden hallarse por 2 caminos, haciendo

$$\mathcal{H}_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}), \quad n \geq 0, \quad (4.163)$$

o a través del siguiente método recursivo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{-1}(x) &= 0, \\ \mathcal{H}_0(x) &= 1, \\ \mathcal{H}_{n+1}(x) &= 2x\mathcal{H}_n(x) - 2n\mathcal{H}_{n-1}(x), \quad n \geq 0. \end{aligned} \quad (4.164)$$

Definiendo una función $\varphi = f(x)e^{x^2}$, podemos escribir

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \varphi(x) dx = \sum_{k=1}^n \alpha_k \varphi(x_k) + E, \quad (4.165)$$

donde x_k , $k = 1, 2, \dots, n$ son los ceros de $\mathcal{H}_n(x)$ y

$$\alpha_k = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{(\mathcal{H}_{n+1}(x_k))^2}, \quad E = \frac{n! \sqrt{\pi}}{2^n (2n)!} \varphi^{(2n)}(\xi), \quad \xi \in \mathbb{R} \quad (4.166)$$

4.11. Métodos adaptativos

El objetivo de un algoritmo adaptativo es producir una aproximación a una integral dentro de una dada tolerancia ε utilizando pasos de integración NO UNIFORMES dentro del intervalo $[a, b]$. Un buen algoritmo adaptativo debe ser capaz de establecer automáticamente el tamaño del paso de integración incrementando la densidad de los nodos cuando ésta presenta fuertes variaciones y espaciándolos cuando la función es suave. Veremos ahora, usando el caso particular de las fórmulas de Newton-Cotes, y dentro de ellas a Simpson, cómo es posible construir un método adaptativo para no sólo reducir el error de aproximación sino para escribir el mismo en una forma que no dependa de las derivadas de distinto orden del integrando. Obviamente la metodología puede extenderse a otras cuadraturas.

Consideremos la integral

$$\int_a^b f(x) dx, \quad (4.167)$$

y sea $[\alpha, \beta] \subseteq [a, b]$ un subintervalo cualquiera de $[a, b]$. Elijo este subintervalo, ya que el método está dirigido a intervalos de cualquier longitud. Sea

$$I_f(\alpha, \beta) = \int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx, \quad h = \frac{\beta - \alpha}{2}. \quad (4.168)$$

La aproximación de Simpson para esta integral es

$$S_f(\alpha, \beta) = \frac{h}{3} [f(\alpha) + 4f(\alpha + h) + f(\beta)], \quad (4.169)$$

y su fórmula del error

$$I_f(\alpha, \beta) - S_f(\alpha, \beta) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta), \quad \alpha < \eta < \beta. \quad (4.170)$$

Ahora quiero una estimación del error SIN usar la derivada de $f(x)$. Usemos Simpson compuesto, ahora el paso será $h_1 = (\beta - \alpha)/4$. Así, los subintervalos sobre los que aplicaremos Simpson serán:

$$\left[\alpha, \frac{\alpha + \beta}{2} \right], \quad y \quad \left[\frac{\alpha + \beta}{2}, \beta \right], \quad (4.171)$$

y la integral se puede aproximar haciendo

$$S_f^2(\alpha, \beta) = \frac{h_1}{3} \left\{ \left[f(\alpha) + 4f(\alpha + h_1) + f\left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right) \right] + \left[f\left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right) + 4f(\beta - h_1) + f(\beta) \right] \right\}, \quad (4.172)$$

con un error igual a

$$I_f(\alpha, \beta) - S_f^2(\alpha, \beta) = -\frac{h_1^5}{90} \left(f^{(4)}(\eta_1) + f^{(4)}(\eta_2) \right), \quad (4.173)$$

donde $\alpha < \eta_1 < (\alpha + \beta)/2$ y $(\alpha + \beta)/2 < \eta_2 < \beta$. Si suponemos (y esta suposición puede ser fuerte) que

$$f^{(4)}(\eta_1) \approx f^{(4)}(\eta_2) \approx f^{(4)}(\eta), \quad (4.174)$$

entonces podríamos escribir

$$I_f(\alpha, \beta) - S_f^2(\alpha, \beta) = -\frac{h^5}{2^5 \cdot 90} 2f^{(4)}(\eta), \quad (4.175)$$

lo que reduce el error en un factor 16, comparado con el caso anterior. Comparando esta fórmula del error con la que obtuvimos para Simpson

$$\begin{aligned} I_f(\alpha, \beta) - S_f(\alpha, \beta) - \left[I_f(\alpha, \beta) - S_f^2(\alpha, \beta) \right] &= -\frac{h^5}{90} f^{(iv)}(\eta) + \frac{h^5}{2^5 \cdot 90} 2f^{(4)}(\eta) \\ - \left[S_f(\alpha, \beta) - S_f^2(\alpha, \beta) \right] &= -\frac{15}{16} \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta). \end{aligned} \quad (4.176)$$

Despejando encontramos

$$\frac{1}{16} \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta) \approx \frac{1}{15} \underbrace{\left[S_f(\alpha, \beta) - S_f^2(\alpha, \beta) \right]}_{\varepsilon_f(\alpha, \beta)}. \quad (4.177)$$

Por lo tanto, podemos escribir finalmente

$$\boxed{|I_f(\alpha, \beta) - S_f^2(\alpha, \beta)| \approx \frac{|\varepsilon_f(\alpha, \beta)|}{15}}. \quad (4.178)$$

Esta fórmula nos permite estimar el error cometido al aproximar la integral SIN usar las derivadas del integrando; esto la hace útil en algoritmos empaquetados. Usualmente conviene usar, en vez de $1/15$, $1/10$ para hacer una estimación más conservadora del error (estimamos que el error cometido es mayor).

Así, para asegurar una tolerancia ε para el error total cometido en $[a, b]$ basta con pedir que para cada subintervalo $[\alpha, \beta] \subseteq [a, b]$ se cumpla

$$\boxed{\frac{|\varepsilon_f(\alpha, \beta)|}{10} \leq \varepsilon \frac{\beta - \alpha}{b - a}}. \quad (4.179)$$

Si esta relación no se cumple, hay que achicar el intervalo $[\alpha, \beta]$. Este método usa el error de truncamiento para adaptar los subintervalos de integración.