Clase 13 - Integración numérica

La integración numérica es una herramienta de gran utilidad en las siguientes aplicaciones:

- Se desea calcular la integral definida de f en el intervalo $[a,b]$, pero f es muy complicada o no tiene primitiva, como por ejemplo

$$\int_0^1 e^{-x^2}\,dx$$

- no se tiene la función f en forma explícita sino sólo se conocen algunos valores funcionales, por ejemplo una lista de pares ordenados (x_i,y_i) para $i=0,\ldots,n$ representados en un gráfico.

En ambos casos se desea estimar aproximadamente el valor de

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

Los métodos básicos que veremos son también conocidos como **cuadratura numérica** y tienen la forma

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

Los método de cuadratura numérica se basan en interpolación numérica. Consideremos el conjunto de nodos distintos $\{x_0,\ldots,x_n\}$ en el intervalo $[a,b]$. Sea P_n el polinomio, que interpola a f en esos puntos, en la forma de Lagrange y e_n el término del error correspondiente

$$P_n(x)=\sum_{i=0}^{n} f(x_i)L_i(x), \qquad e_n(x)=\frac{f^{n+1}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i),$$

para algún $\xi_x\in(x_0,x_n)$. Es decir $f(x)=P_n(x)+e_n(x)$. Luego integrando

$$\begin{aligned}
\textstyle\int_a^b f(x)\,dx &= \int_a^b P_n(x)\,dx+\int_a^b e_n(x)\,dx\\
&= \int_a^b \sum_{i=0}^{n} f(x_i)L_i(x)\,dx+\int_a^b \frac{f^{n+1}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\\
&= \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)+\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{n+1}(\xi_x)\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)
\end{aligned}$$

para algún $\xi_x\in(x_0,x_n)$ y $\int_a^b L_i(x)\,dx$ para $i=0,\ldots,n$.

Por lo tanto las fórmulas de cuadratura numérica están dadas por

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

con un error de integración numérica dado por

$$E_n(f)=\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{n+1}(\xi_x)\prod_{i=0}^{n}(x-x_i).$$

Cuando los puntos de interpolación estén igualmente espaciados, estás reglas o fórmulas se llaman cuadratura de Newton–Cotes. Inicialmente veremos las reglas simples y luego las reglas compuestas.

Reglas simples

Las variantes que veremos a continuación dependen de la cantidad de puntos que se utilicen.

Regla del trapecio

Para integrar $\int_a^b f(x)\,dx$ vamos a considerar dos puntos $x_0 = a$, $x_1 = b$ y $h = b - a = x_1 - x_0$. Ver Figura 1. De esta manera se aproxima a la función f por el polinomio interpolante

$$P_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1), \tag{1}$$

y su correspondiente error es

$$e_1(x) = \frac{f''(\xi_x)}{2!}(x - x_0)(x - x_1). \tag{2}$$

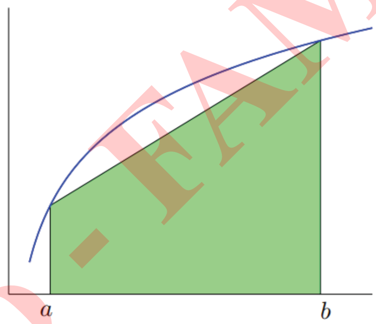

Figura 1: Regla del trapecio

Luego por (1),

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)\,dx &\approx \int_a^b \left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1) \right) dx \\ &= f(x_0) \int_a^b \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\,dx + f(x_1) \int_a^b \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1)\,dx. \end{aligned}$$

Es muy fácil verificar que ambas integrales son iguales a $\frac{(x_1 - x_0)}{2} = \frac{b - a}{2} = \frac{h}{2}$, y por lo tanto,

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx I_T(f; a, b) = \frac{(b - a)}{2}\,[f(a) + f(b)] = \frac{h}{2}\,[f(a) + f(b)].$$

Para poder expresar el error de la integral numérica de una manera más simple se va utilizar el siguiente teorema de Análisis Matemático, cuya demostración no se incluirá pero puede consultarse en libros de Cálculo.

Teorema 1. *Supongamos que $f \in C[a, b]$, que g es una función integrable en $[a, b]$ y que g no cambia de signo en $[a, b]$. Entonces existe $c \in (a, b)$ tal que*

$$\int_a^b f(x)g(x)\,dx = f(c) \int_a^b g(x)\,dx.$$

En particular, si $g(x) \equiv 1$, entonces $\int_a^b f(x)\,dx = f(c)(b - a)$, esto es, $f(c) = \frac{1}{b-a} \int_a^b f(x)\,dx$.

Como $g(x) = (x-x_0)(x-x_1) = (x-a)(x-b)$ no cambia de signo en $[a,b]$ y aplicando el teorema anterior se sabe que existe ξ independiente de x tal que

$$\begin{aligned}
\int_a^b f''(\xi_x)(x-a)(x-b)\,dx &= f''(\xi)\int_a^b (x-a)(x-b)\,dx \\
&= f''(\xi)\int_a^b (x^2-(a+b)x+ab)\,dx \\
&= f''(\xi)\left[\frac{x^3}{3}-\frac{(a+b)}{2}x^2+abx\right]_a^b. \qquad (3)
\end{aligned}$$

Luego,

$$\begin{aligned}
\left[\frac{x^3}{3}-\frac{(a+b)}{2}x^2+abx\right]_a^b &= \frac{b^3}{3}-\frac{ab^2}{2}-\frac{b^3}{2}+ab^2-\frac{a^3}{3}+\frac{a^3}{2}+\frac{a^2b}{2}-a^2b \\
&= \frac{1}{6}(2b^3-3ab^2-3b^3+6ab^2-2a^3+3a^3+3a^2b-6a^2b) \\
&= \frac{1}{6}(-b^3+3ab^2+a^3-3a^2b) \\
&= \frac{(a-b)^3}{6} = -\frac{(b-a)^3}{6} = -\frac{h^3}{6}. \qquad (4)
\end{aligned}$$

Entonces, por (2), (3) y (4), el error de la fórmula del trapecio está dado por:

$$\begin{aligned}
E_T &= E_1(x) = \int_a^b e_1\,dx = \frac{1}{2!}\int_a^b f''(\xi_x)(x-a)(x-b)\,dx \\
&= \frac{1}{2!}f''(\xi)\left(-\frac{h^3}{6}\right) = -\frac{h^3}{12}f''(\xi) = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi),
\end{aligned}$$

para algún $\xi \in (a,b)$.

Resumiendo, la regla del trapecio simple para integración numérica en el intervalo $[a,b]$ está dada por

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx I_T(f;a,b) = \frac{(b-a)}{2}\,[f(a)+f(b)] = \frac{h}{2}\,[f(a)+f(b)],$$

y su correspondiente error es

$$E_T = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi) = -\frac{h^3}{12}f''(\xi),$$

para algún $\xi \in (a,b)$.

Observación: como el término del error tiene f'', se dice que la regla del trapecio será **exacta** cuando se aplica a una función tal que $f''(x) \equiv 0$, esto es, cualquier polinomio de grado menor o igual que 1. Se puede verificar esta conclusión estudiando el comportamiento de la regla del trapecio cuando se integran polinomios.

- Si $f(x) \equiv 1$, por un lado $\displaystyle\int_a^b 1\,dx = b-a$,

  y por otro, $I_T(f;a,b) = \dfrac{(b-a)}{2}(1+1) = b-a$. Luego, la regla del trapecio integra exactamente cualquier polinomio de grado 0.

- Si $f(x) \equiv x$, por un lado $\int_a^b x\,dx = \frac{b^2-a^2}{2}$,
  y por otro, $I_T(f;a,b) = \frac{(b-a)}{2}(a+b) = \frac{b^2-a^2}{2}$. Luego, la regla del trapecio integra exactamente cualquier polinomio de grado 1.

- Si $f(x) \equiv x^2$, entonces $\int_a^b x^2\,dx = \frac{b^3-a^3}{3}$,
  y en cambio, $I_T(f;a,b) = \frac{(b-a)}{2}(a^2+b^2) = \frac{b^3+a^2b-ab^2-a^3}{2}$. Por lo tanto la regla del trapecio no integra exactamente a polinomios de grado 2.

Regla de Simpson

En este caso, para integrar $\int_a^b f(x)\,dx$ vamos a considerar tres puntos $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ y $x_2 = b$. Si llamamos $h = \frac{b-a}{2}$ entonces, $x_1 = x_0 + h$ y $x_2 = a + 2h = b$. Ver Figura 2. Con tres puntos ($n = 2$) se construye un polinomio interpolante de grado 2, de manera análoga a la aplicada en la regla del trapecio.

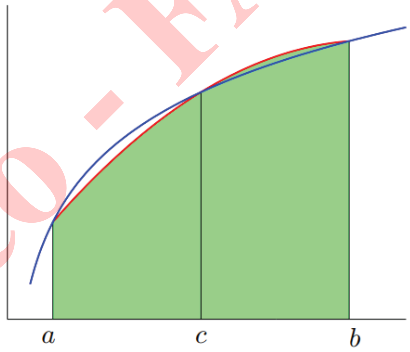

Figura 2: Regla de Simpson

La deducción completa de la regla de Simpson es un ejercicio del práctico. El cálculo del error es un poco más complicado y no será demostrado por falta de tiempo. En resumen, la regla de Simpson está dada por:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx I_S(f;a,b) = \frac{h}{3}[f(a)+4f(a+h)+f(a+2h)] = \frac{(b-a)/2}{3}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right],$$

y su correspondiente error es

$$E_S = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi) = -\frac{((b-a)/2)^5}{90}f^{(4)}(\xi),$$

para algún $\xi \in (a,b)$.

Observación: como el término del error tiene una derivada de orden 4, la regla de Simpson integrará exactamente cuando $f^{(4)} \equiv 0$, esto es, para polinomios de grado menor o igual a 3.

Por último veremos 2 reglas más sencillas que utilizan en único punto.

Regla del rectángulo

Esta regla utiliza sólo uno de los extremos de integración para construir el polinomio interpolante, por ejemplo se considera sólo $x_0 = a$ y por lo tanto el polinomio interpolante será una constante ($n = 0$). Ver Figura 3.

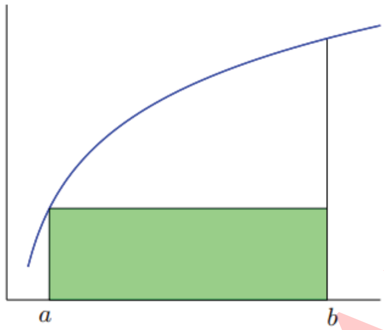

Figura 3: Regla del rectángulo

En este caso, la regla del rectángulo está dada por:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx I_R(f;a,b) = f(a)(b-a),$$

y su correspondiente error es

$$E_R = \frac{(b-a)^2}{2} f'(\xi),$$

para algún $\xi \in (a,b)$.

Observación: también es posible tomar $x_0 = b$, haciendo los cambios correspondientes en la fórmula de I_R, Además, como el término del error tiene una derivada de orden 1, la regla del rectángulo integrará exactamente a polinomios de grado 0.

Regla del punto medio

Esta regla también utiliza sólo un punto pero en este caso es el punto medio del intervalo $x_0 = (a+b)/2$. Así, el polinomio interpolante será una constante ($n = 0$). Ver Figura 4.

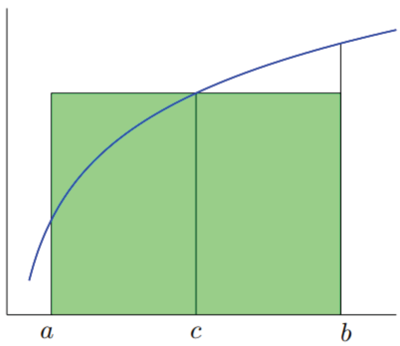

Figura 4: Regla del punto medio

En este caso, la regla del punto medio está dada por:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx I_{PM}(f;a,b) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a),$$

y su correspondiente error es

$$E_{PM} = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi),$$

para algún $\xi \in (a,b)$.

Observación: como el término del error tiene una derivada de orden 2, la regla del punto medio integrará exactamente a polinomios de grado 1.

La siguiente definición es de fundamental importancia en el estudio de las reglas de integración numérica.

Definición 1. *La* **precisión** *o* **grado de exactitud** *de una fórmula o regla de cuadratura es el mayor entero positivo n tal que la fórmula de integración es exacta para x^k, para todo $k = 0, \dots n$.*

Así los métodos considerados en esta clase tienen la siguiente precisión.

Regla de cuadratura	**Precisión**
Rectángulo	0
Punto medio	1
Trapecio	1
Simpson	3

En la siguiente tabla se resumen las reglas simples de integración numérica para estimar $\int_a^b f(x)\,dx$:

Regla	**Puntos**	**Fórmula**	**Error**	**Precisión**
Rectángulo	1	$f(a)(b-a)$	$\frac{(b-a)^2}{2} f'(\xi)$	0
Punto medio	1	$f(\frac{a+b}{2})(b-a)$	$\frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi)$	1
Trapecio	2	$\frac{(b-a)}{2}[f(a)+f(b)]$	$-\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)$	1
Simpson	3	$\frac{(b-a)/2}{3}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$	$-\frac{((b-a)/2)^5}{90} f^{(4)}(\xi)$	3