Derivación e integración

Julio Mulero

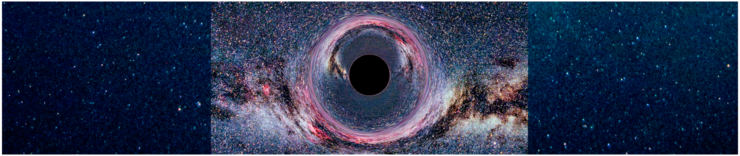
@juliomulero

julio.mulero

Departamento de Matemáticas
Universidad de Alicante

Carmen Gandía

Departamento de Matemáticas
Universidad de Alicante

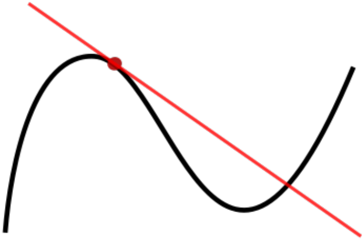


El problema

- En muchas ocasiones es necesario disponer del valor de la derivada de una función f en un punto c, o bien de su integral en un intervalo $[a, b]$, pero...
- Puede que no nos sea posible calcularlas por disponer tan solo de una tabla de valores de la función en cuestión o bien por ser su expresión analítica inmanejable.
- Una vía para abordar este problema es aproximar la derivada o la integral por las correspondientes a los polinomios de interpolación.

Outline

La derivación numérica



La derivación numérica

- Supongamos que f es una función suficientemente derivable en el intervalo $[a, b]$ y deseamos calcular:

$$f'(x_0) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h},$$

y/o las derivadas de orden superior:

$$f^{(n)}(x_0) = \lim_{h \to 0} \frac{f^{(n-1)}(x_0 + h) - f^{(n-1)}(x_0)}{h}$$

- Estas fórmulas proporcionan una primera aproximación de la derivada para valores pequeños de h:

$$\begin{aligned} f'(x_0) &\approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \\ f^{(n)}(x_0) &\approx \frac{f^{(n-1)}(x_0 + h) - f^{(n-1)}(x_0)}{h}. \end{aligned}$$

La derivación numérica

De hecho, podríamos considerar $(h_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de forma que $h_n \to 0$ y

$$\begin{aligned} f'(x_0) &\approx (=) \lim_{n\to\infty} \frac{f(x_0+h_n)-f(x_0)}{h_n} \\ f^{(n)}(x_0) &\approx (=) \lim_{n\to\infty} \frac{f^{(n-1)}(x_0+h_n)-f^{(n-1)}(x_0)}{h_n}. \end{aligned}$$

La derivación numérica

- Dada una función $f \in \mathcal{C}([a,b])$, $x_0 \in (a,b)$ y $h > 0$ de forma que $x_1 = x_0 + h \in (a,b)$, supongamos que queremos aproximar $f'(x_0)$.
- Si $P_1(x)$ es el polinomio interpolador de grado 1 para f en x_0 y x_1, sabemos que:

$$\begin{aligned} P_1(x) = f[x_0] + f[x_0,x_1](x-x_0) &= f(x_0) + \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x-x_0) \\ &= f(x_0) + \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}(x-x_0), \end{aligned}$$

La derivación numérica

- Si derivamos, obtenemos:

$$P_1'(x) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \approx f'(x).$$

- La pregunta es...¿qué error estaremos cometiendo?

La derivación numérica

- Si derivamos, obtenemos:

$$P_1'(x) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} \approx f'(x).$$

- La pregunta es. . . ¿qué error estaremos cometiendo?
- Hemos visto que:

$$f(x) = P_1(x) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2!} f''(\xi_x),$$

donde $\xi_x \in (a, b)$.

- Por tanto, una primera aproximación será:

$$f'(x) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + \left[\frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2!} f''(\xi_x)\right]',$$

donde $\xi_x \in (a, b)$.

La derivación numérica

- En este caso, el término de error que viene dado por:

$$\left[\frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2!}f''(\xi_x)\right]' = \frac{2(x-x_0)-h}{2}f''(\xi_x) + \frac{(x-x_0)(x-x_0-h)}{2!}\left(f''(\xi_x)\right)'.$$

- La evaluación del error no es sencilla debido a que $f''(\xi_x) = f''(\xi(x))$ y $(f''(\xi(x)))' = f'''(\xi(x))\xi'(x)$ y no tenemos información acerca del comportamiento de $\xi(x)$.

La derivación numérica

- Sin embargo, sí podemos evaluar el error en x_0 (el término "conflictivo" desaparece).

Fórmula de los dos puntos

Si f'' existe en el intervalo que contiene a x_0 y $x_0 + h$, entonces:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi_{x_0}),$$

para algún punto ξ_{x_0} entre x_0 y $x_0 + h$.

La derivación numérica

Las fórmulas para la derivación numérica a partir del polinomio interpolador en puntos equiespaciados (como la anterior) se agrupan en fórmulas progresivas y regresivas según si $x_k = x_0 + kh > x_0$ o $x_k = x_0 - kh < x_0$, $k = 1, \ldots, n$, respectivamente.

Además, también se puede usar el polinomio interpolador para aproximar la derivada de una función en el punto central de una secuencia de nodos equiespaciados obteniendo una fórmula centrada.

La derivación numérica

- A fin de obtener una aproximación más general, fijado $x_0 \in (a, b)$ y $h > 0$, sean $n+1$ puntos del interior del intervalo $[a, b]$:

$$x_0, x_1 = x_0 + h, x_1 = x_0 + 2h, \ldots, x_n = x_0 + nh.$$

- Para $x \in (a, b)$, se tiene que:

$$f(x) = P_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n),$$

donde P_n es el polinomio interpolador de f en $x_0, x_1, \ldots, x_n$.

La derivación numérica

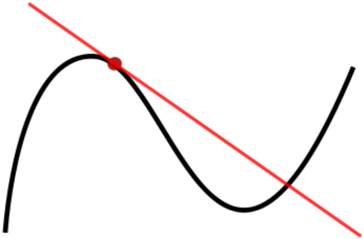
- Si derivamos la expresión anterior,

$$f'(x) = P_n'(x) + \left[\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!}\right]' f^{(n+1)}(\xi_x) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!}\left[f^{(n+1)}(\xi_x)\right]'.$$

- Obtener una cota del error global es un problema complicado porque no tenemos información acerca de $\xi(x)$.
- Sin embargo, podemos analizar el error cometido en uno de los nodos de interpolación x_j, en cuyo caso, la expresión anterior se reduce a:

$$f'(x_k) = P_n'(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_{x_k})}{(n+1)!}\prod_{k\neq j}^{n}(x_j - x_k).$$

Fórmulas centradas



La derivación numérica

- Normalmente se utilizan tres o cinco puntos para hallar el polinomio interpolador y las fórmulas difieren según se calcule la derivada en los extremos o en el punto central. A partir de ahora, presentaremos las aproximaciones de las derivadas en el punto central.
- Consideremos $x_0, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$, entonces el polinomio interpolador viene dado por:

$$P_2(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1).$$

- Su derivada, de la que se obtendrá la aproximación de la derivada de f en x_1, es:

$$P_2'(x) = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2][(x - x_0) + (x - x_1)].$$

La derivación numérica

- Entonces:

$$
\begin{aligned}
P_2'(x_1) &= \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h} + \frac{\frac{f(x_2)-f(x_1)}{h} - \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}}{2h}h \\
&= \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h} + \frac{\frac{f(x_2)-2f(x_1)+f(x_0)}{h}}{2h}h \\
&= \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h} + \frac{f(x_2)-2f(x_1)+f(x_0)}{2h} \\
&= \frac{2f(x_1)-2f(x_0)+f(x_2)-2f(x_1)+f(x_0)}{2h} \\
&= \frac{-f(x_0)+f(x_2)}{2h}.
\end{aligned}
$$

- Y la aproximación:

$$f'(x_1) = f'(x_0+h) \simeq \frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_0+2h)].$$

se conoce como la fórmula de los tres puntos.

La derivación numérica

- Si consideramos cinco puntos x_0, $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h$, $x_3 = x_0 + 3h$, $x_4 = x_0 + 4h$, obtendremos un polinomio de grado cuatro:

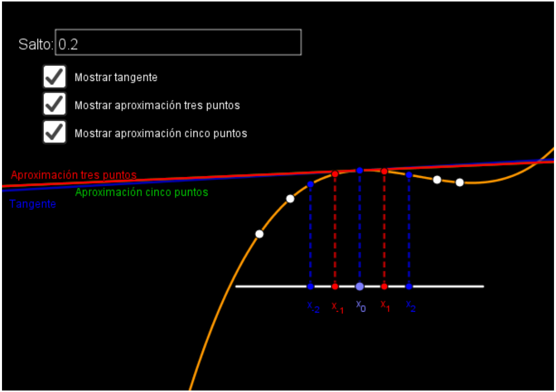
$$\begin{aligned} P_4(x) &= f[x_0] \\ &\quad + f[x_0, x_1](x - x_0) \\ &\quad + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) \\ &\quad + f[x_0, x_1, x_2, x_3](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\ &\quad + f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3). \end{aligned}$$

- El valor de su derivada en $x_2 = x_0 + 2h$ será la aproximación de $f'(x_2)$:

$$f'(x_2) = f'(x_0 + 2h) \simeq \frac{1}{12h}[f(x_0) - 8f(x_0 + h) + 8f(x_0 + 3h) - f(x_0 + 4h)],$$

y se conoce como la fórmula de los cinco puntos.

La derivación numérica



https://www.geogebra.org/m/pnaqyr8h

La derivación numérica

Ejemplo

Calcula la aproximación de la derivada de la función $f(x) = xe^x$ en el punto $x = 2.0$ usando las fórmulas de los tres y los cinco puntos.

Notemos que $f'(x) = e^x + xe^x$. Por tanto, $f'(2.0) = 22.1671$.

Fórmula de los tres puntos:

$$f'(x_1) = f'(x_0 + h) \simeq \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_0 + 2h)].$$

Sea $h = 0.2$ y $x_0 = 1.8$, $x_1 = 2.0$ y $x_2 = 2.2$:

$$f'(2.0) = f'(1.8 + 0.2) \simeq \frac{1}{2 \times 0.2}[-f(1.8) + f(2.2)] = 22.41.$$

Sea $h = 0.1$ y $x_0 = 1.9$, $x_1 = 2.0$ y $x_2 = 2.1$:

$$f'(2.0) = f'(1.9 + 0.1) \simeq \frac{1}{2 \times 0.1}[-f(1.9) + f(2.1)] = 22.2287.$$

La derivación numérica

Fórmula de los cinco puntos:

$$f'(x_2) = f'(x_0 + 2h) \simeq \frac{1}{12h}[f(x_0) - 8f(x_0 + h) + 8f(x_0 + 3h) - f(x_0 + 4h)],$$

Sea $h = 0.2$ y $x_0 = 1.6$, $x_1 = 1.8$, $x_2 = 2.0$, $x_3 = 2.2$ y $x_4 = 2.4$:

$$f'(2.0) = f'(1.6+2h) \simeq \frac{1}{12 \times 0.2}[f(1.6)-8f(1.8)+8f(2.2)-f(2.4)] = 22.1643.$$

Sea $h = 0.1$ y $x_0 = 1.8$, $x_1 = 1.9$, $x_2 = 2.0$, $x_3 = 2.1$ y $x_4 = 2.2$:

$$f'(2.0) = f'(1.8+2h) \simeq \frac{1}{12 \times 0.1}[f(1.8)-8f(1.9)+8f(2.1)-f(2.2)] = 22.167.$$

Las derivadas de orden superior

- Denotaremos como f_k a $f(x_0+kh)$, siendo x_0 el punto en el que queremos aproximar la derivada de la función f.

Con error proporcional a h^2...

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &\approx \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} \\
f''(x_0) &\approx \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} \\
f^{(3)}(x_0) &\approx \frac{f_2 - 2f_1 + 2f_{-1} - f_{-2}}{2h^3} \\
f^{(4)}(x_0) &\approx \frac{f_2 - 4f_1 + 6f_0 - 4f_{-1} + f_{-2}}{h^4}
\end{aligned}
$$

Las derivadas de orden superior

Con error proporcional a h^4...

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &\approx \frac{-f_2 + 8f_1 - 8f_{-1} + f_{-2}}{12h} \\
f''(x_0) &\approx \frac{-f_2 + 16f_1 - 30f_0 + 16f_{-1} - f_{-2}}{12h^2} \\
f^{(3)}(x_0) &\approx \frac{-f_3 + 8f_2 - 13f_1 - 8f_{-2} + f_{-3}}{8h^3} \\
f^{(4)}(x_0) &\approx \frac{-f_3 + 12f_2 - 39f_1 + 56f_0 - 39f_{-1} + 12f_{-2} - f_{-3}}{6h^4}
\end{aligned}
$$

Las derivadas parciales

- Sea $f : A \to \mathbb{R}$, con $A \subset \mathbb{R}^2$, $z = f(x, y)$, una función real de dos variables, y sea $(x_0, y_0) \in A$, un punto del interior de A.
- Las derivadas parciales de f en (x_0, y_0) vienen dadas por:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial x} &= \lim_{h\to 0} \frac{f(x_0 + h, y_0) - f(x_0, y_0)}{h}, \\
\frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial y} &= \lim_{h\to 0} \frac{f(x_0, y_0 + h) - f(x_0, y_0)}{h}.
\end{aligned}$$

- Por un lado, fijado y_0, si llamamos $f_{y_0}(x) = f(x, y_0)$, la primera expresión coincide con $f'_{y_0}(x_0)$. Por otro lado, fijado x_0, si llamamos $f_{x_0}(y) = f(x_0, y)$, la segunda expresión coincide con $f'_{x_0}(y_0)$.

Las derivadas parciales

- A fin de obtener una aproximación de las derivadas parciales de f en (x_0, y_0), aplicaremos la fórmula de los cinco puntos a f_{y_0} y f_{x_0}.

Las derivadas parciales de primer orden

$$\frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial x} \approx \frac{1}{12h}[f(x_0 - 2h, y_0) - 8f(x_0 - h, y_0) + 8f(x_0 + h, y_0) - f(x_0 + 2h, y_0)]$$

$$\frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial y} \approx \frac{1}{12h}[f(x_0, y_0 - 2h) - 8f(x_0, y_0 - h) + 8f(x_0, y_0 + h) - f(x_0, y_0 + 2h)]$$

Las derivadas parciales

Ejemplo

Aproxima la derivada parcial de la función:

$$f(x, y) = x^2 y - 3xy^2,$$

en el punto $(1, 2)$ con $h = 0.1$.

$$\frac{\partial f(1,2)}{\partial x} \approx \frac{1}{1.2}[f(0.8,2) - 8f(0.9,2) + 8f(1.1,2) - f(1.2,2)] = -8.$$

$$\frac{\partial f(1,2)}{\partial y} \approx \frac{1}{1.2}[f(1,1.8) - 8f(1,1.9) + 8f(1,2.1) - f(1,2.2)] = -11.$$

Las derivadas parciales

- Como hemos visto anteriormente, dada una función real de variable real f, entonces:
$$f''(x_0) \approx \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2},$$
(con un error proporcional a h^2.
- Si aplicamos esta fórmula a f_{y_0} y f_{x_0} se tiene una aproximación de las derivadas parciales de segundo orden de f.

Las derivadas parciales de segundo orden

$$\frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x^2} \approx \frac{1}{h^2}[f(x_0 - h, y_0) - 2f(x_0, y_0) + f(x_0 + h, y_0)]$$
$$\frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial y^2} \approx \frac{1}{h^2}[f(x_0, y_0 - h) - 2f(x_0, y_0) + f(x_0, y_0 + h)]$$

Las derivadas parciales

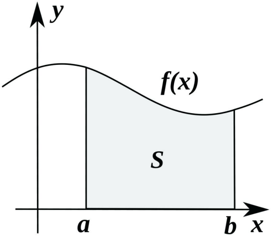
- Finalmente, para la aproximación de las derivadas parciales cruzadas usaremos la fórmula de los tres puntos en ambas variables.

Las derivadas parciales cruzadas

$$\frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x \partial y} \approx \frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{1}{2h}[-f(x_0-h, y_0)+f(x_0+h, y_0)]\right]$$
$$= \frac{f(x_0-h, y_0-h)-f(x_0+h, y_0-h)-f(x_0-h, y_0+h)+f(x_0+h, y_0+h)}{(2h)^2}$$

Outline

La integración numérica



La integración numérica

- Dada una función $f : [a, b] \to \mathbb{R}$, nuestro objetivo es calcular:

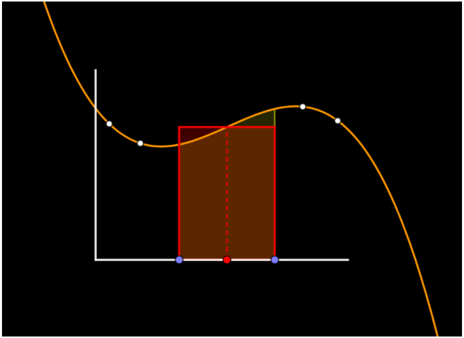
$$\int_a^b f(x)dx.$$

- Una primera (intuitiva, y poco precisa) "estimación" consiste en aproximar el área bajo la curva por el área del rectángulo con base el intervalo $[a, b]$ y altura, el valor de la función en el punto medio del intervalo $((a + b)/2)$:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq (b - a)f\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

- Este procedimiento es conocido como la regla del rectángulo. Observa que coincide con el área del rectángulo con base $[a, b]$ y altura $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$.

La integración numérica



https://www.geogebra.org/m/ybq5ryej

La integración numérica

- Dada una función $f : [a, b] \to \mathbb{R}$, nuestro objetivo es calcular:

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

donde $x_0, x_1, \ldots, x_n \in (a, b)$.

- La clave para realizar esta aproximación reside, de igual manera que para la derivación, en la interpolación polinomial.

La integración numérica

- Para ello, fijados $x_0, x_1, \ldots, x_n \in (a, b)$, utilizaremos la fórmula de interpolación polinómica de Lagrange:

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_i(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n),$$

donde $\ell_i(x)$ son los polinomios fundamentales de Lagrange.

- Por tanto,

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

La integración numérica

- La expresión anterior se puede escribir como:

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

donde $a_i = \displaystyle\int_a^b \ell_i(x)dx$, para todo $i = 0, 1, \ldots, n$.

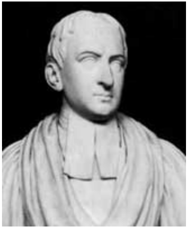
- La fórmula de la "cuadratura" es:

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

mientras que el error cometido es:

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

Las fórmulas (simples) de Newton-Cotes



Isaac Newton (1642/1643-1727) Roger Cotes (1682-1716)

Las fórmulas cerradas

[a,b]

La integración numérica con nodos equiespaciados

- Dada una función $f : [a, b] \to \mathbb{R}$, si tomamos dos puntos $x_0 = a$ y $x_1 = b$, entonces el polinomio interpolador de $(a, f(a))$ y $(b, f(b))$ es:

$$
\begin{aligned}
P_1(x) &= f[a] + f[a, b](x - a) \\
&= f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a).
\end{aligned}
$$

- Nota que este polinomio es la recta que une $(a, f(a))$ y $(b, f(b))$.

La integración numérica con nodos equiespaciados

- La aproximación viene dada por:

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &\simeq \int_a^b P_1(x)dx = \int_a^b f(a)dx + \int_a^b \frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x-a)dx \\
&= f(a)(b-a) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\left[\frac{(x-a)^2}{2}\right]_{x=a}^{x=b} \\
&= f(a)(b-a) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\left[\frac{(b-a)^2}{2}\right] \\
&= \frac{2f(a)(b-a) + (f(b)-f(a))(b-a)}{2} \\
&= \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))
\end{aligned}
$$

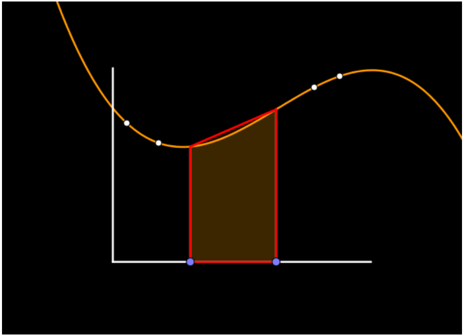
La integración numérica con nodos equiespaciados

- Esta aproximación:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)) = \frac{h}{2}(f(a)+f(b)),$$

  se conoce como la fórmula del trapecio. Observa que coincide con el área del trapecio correspondiente.
- Además, nota que $h = b - a$ es la distancia de a a b (los dos únicos nodos).

La integración numérica con nodos equiespaciados



https://www.geogebra.org/m/y58b4usv

La integración numérica con nodos equiespaciados

- Dada una función $f : [a, b] \to \mathbb{R}$, si tomamos tres puntos:

$$x_0 = a, x_1 = \frac{a+b}{2} = a + \frac{b-a}{2}, x_2 = b,$$

entonces el polinomio interpolador de $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$ y $(x_2, f(x_2))$ es:

$$P_2(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1).$$

- Este polinomio es la parábola que pasa por los puntos $(a, f(a))$, $((a+b)/2, f((a+b)/2))$ y $(b, f(b))$ (siempre y cuando no estén alineados).

La integración numérica con nodos equiespaciados

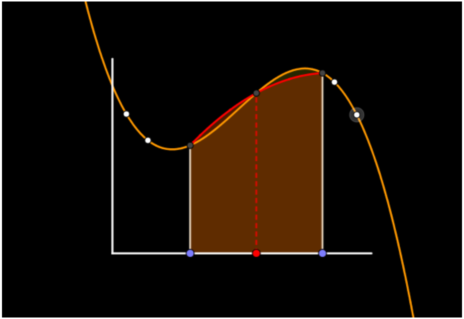
- La aproximación obtenida a partir de la integral de este polinomio viene dada por:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{\frac{b-a}{2}}{3}(f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)) = \frac{h}{3}(f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)),$$

que se conoce como la fórmula de Simpson .

- Observa que $\frac{b-a}{2}$ es la distancia de $x_0 = a$ a $x_1 = \frac{a+b}{2}$ (y también de $x_1 = \frac{a+b}{2}$ a $x_2 = b$), es decir, es la distancia entre dos nodos consecutivos cualesquiera (son equiespaciados).

La integración numérica con nodos equiespaciados



https://www.geogebra.org/m/yybbhd8h

La integración numérica con nodos equiespaciados

- Observemos que, en las fórmulas del trapecio y de Simpson, aparece el valor $b - a$ y $(b - a)/2$, que es la distancia entre dos nodos consecutivos (que están "equiespaciados").
- A partir de ahora, llamaremos h a dicha distancia y las fórmulas quedan como sigue:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) \text{ (Trapecio)}$$
$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) \text{ (Simpson)}$$

- Las fórmulas del trapecio y de Simpson son casos particulares de un grupo de fórmulas denominadas de Newton-Cotes (dependiendo del número de nodos equiespaciados que consideremos). Estas fórmulas se subdividen a su vez en fórmulas abiertas y cerradas según los extremos del intervalo formen parte, o no, de los nodos de interpolación.

La integración numérica con nodos equiespaciados

- En el caso de las fórmulas cerradas, supondremos que $a = x_0$ y $b = x_n$. Si deseamos aproximar por la integral del polinomio interpolador de grado n, debemos considerar $n + 1$ puntos y la distancia entre los nodos equiespaciados vendrá dada por:

$$h = \frac{b - a}{n}.$$

- Para obtener las distintas fórmulas, se supone que interpolamos polinomios de grado 1, 2, 3 y 4.
  - Para un polinomio de grado 1, necesitamos dos puntos y $h = b - a$.
  - Para un polinomio de grado 2, necesitamos tres puntos y $h = (b - a)/2$.
  - Para un polinomio de grado 3, necesitamos cuatro puntos y $h = (b - a)/3$.
  - Para un polinomio de grado 4, necesitamos cinco puntos y $h = (b - a)/4$.

La integración numérica con nodos equiespaciados

Fórmulas cerradas de Newton-Cotes

a) $n = 0$ (Regla del rectángulo):

$$\int_a^b f(x)dx \simeq hf\left(\frac{x_0 + x_1}{2}\right),$$

donde $h = b - a$.

b) $n = 1$ (Regla del trapecio):

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1)),$$

donde $h = b - a$.

c) $n = 2$ (Regla de Simpson):

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)),$$

donde $h = (b - a)/2$.

La integración numérica con nodos equiespaciados

d) $n = 3$ (Regla de Simpson, tres octavos):

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{3h}{8}(f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)),$$

donde $h = (b - a)/3$.

La integración numérica con nodos equiespaciados

d) $n = 3$ (Regla de Simpson, tres octavos):

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{3h}{8}(f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)),$$

donde $h = (b-a)/3$.

e) $n = 4$:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{2h}{45}(7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)),$$

donde $h = (b-a)/4$.

La integración numérica con nodos equiespaciados

Ejemplo

Calcula la aproximación de la integral de la función $f(x) = e^{-0.1x}$ en el intervalo $[2,5]$ usando las reglas de Simpson y Simpson tres octavos.

La integración numérica con nodos equiespaciados

Ejemplo

Calcula la aproximación de la integral de la función $f(x) = e^{-0.1x}$ en el intervalo $[2,5]$ usando las reglas de Simpson y Simpson tres octavos.

Notemos que

$$\int_2^5 e^{-0.1x}dx = \left[\frac{-e^{-0.1x}}{0.1}\right]_{x=2}^{x=5} = -e^{-0.5}0.1 + e^{-0.2}0.1 = 2.1200093.$$

.

Regla de Simpson:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)),$$

donde $h = (b-a)/2$. En este caso, $h = (5-2)/2 = 1.5$. Entonces:

$$\int_2^5 e^{-0.1x}dx \simeq \frac{1.5}{3}(f(2) + 4f(3.5) + f(5)) = 2.12200688.$$

La integración numérica con nodos equiespaciados

Regla de Simpson tres octavos:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{3h}{8}(f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)),$$

donde $h = (b - a)/3$. En este caso, $h = (5 - 2)/3 = 1$. Entonces:

$$\int_2^5 e^{-0.1x} dx \simeq \frac{3}{8}(f(2) + 3f(3) + 3f(4) + f(5)) = 2.122003579.$$

Las fórmulas abiertas

(a,b)

La integración numérica con nodos equiespaciados

- Notemos que, en las fórmulas anteriores, se usa el valor de la función en los extremos (la función está definida en $[a, b]$). ¿Qué ocurre si la función solo está definida en (a, b)? Por ejemplo, si queremos aproximar la integral:

$$I = \int_0^1 \frac{e^{-x}}{x^{2/3}} dx.$$

- Si $f : (a, b) \longrightarrow \mathbb{R}$, no podemos evaluar f en a ni en b, y se recurre a las llamadas fórmulas abiertas .

La integración numérica con nodos equiespaciados

- En el caso de las fórmulas abiertas, supondremos que $a = x_{-1}$ y $b = x_{n+1}$.
- Para obtener las distintas fórmulas, debemos obtener polinomios interpoladores de grado 0, 1, 2 y 3 en puntos interiores.
  - Para un polinomio de grado 0, necesitamos un punto interior y $h = (b - a)/2$.
  - Para un polinomio de grado 1, necesitamos dos puntos interiores y $h = (b - a)/3$.
  - Para un polinomio de grado 2, necesitamos tres puntos interiores y $h = (b - a)/4$.
  - Para un polinomio de grado 3, necesitamos cuatro puntos interiores y $h = (b - a)/5$.
- En este caso, por tanto, tenemos $n + 3$ puntos (contando con x_{-1} y x_{n+1}) y la distancia entre los nodos equiespaciados vendrá dada por:

$$h = \frac{b - a}{n + 2}.$$

La integración numérica con nodos equiespaciados

- Por ejemplo, si deseamos aproximar por un polinomio de grado 0, tomamos solo el punto intermedio del intervalo,

$$x_0 = \frac{a+b}{2} = a + \frac{b-a}{2},$$

y se tiene que

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \int_a^b f(x_0)dx = (b-a)f(x_0) = 2hf(x_0),$$

donde $h = (b-a)/2$.

La integración numérica con nodos equiespaciados

- Si deseamos aproximar por un polinomio de grado 1, tomamos dos puntos equiespaciados en el interior del intervalo,

$$x_0 = a + h \text{ y } x_1 = a + 2h,$$

donde $h = (b-a)/3$. En cuyo caso,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &\simeq \int_a^b \left(f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) \right) dx \\ &= \frac{b-a}{2}(f(x_0) + f(x_1)). \end{aligned}$$

La integración numérica con nodos equiespaciados

Fórmulas abiertas de Newton-Cotes

a) $n = 0$ (Regla del rectángulo):

$$\int_a^b f(x)dx \simeq 2hf(x_0),$$

donde $h = (b - a)/2$.

b) $n = 1$ (Regla del trapecio):

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{3h}{2}(f(x_0) + f(x_1)),$$

donde $h = (b - a)/3$.

La integración numérica con nodos equiespaciados

c) $n = 2$ (Regla de Simpson):

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{4h}{3}(2f(x_0) - f(x_1) + 2f(x_2)),$$

donde $h = (b-a)/4$.

d) $n = 3$ (Regla del Simpson, tres octavos):

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{5h}{24}(11f(x_0) + f(x_1) + f(x_2) + 11f(x_3)),$$

donde $h = (b-a)/5$.

La integración numérica con nodos equiespaciados

Ejemplo

Aproxima la integral:

$$I = \int_0^1 \frac{e^{-x}}{x^{2/3}} dx.$$

Si llamamos $f(x) = \dfrac{e^{-x}}{x^{2/3}}$,

a) $n = 0$ (Regla del rectángulo):

$$I \simeq 2hf(0.5),$$

donde $h = 1/2$.

b) $n = 1$ (Regla del trapecio):

$$I \simeq \frac{3h}{2}(f(0.3333) + f(0.6666)),$$

donde $h = 1/3$.

La integración numérica con nodos equiespaciados

c) $n = 2$ (Regla de Simpson):

$$I \simeq \frac{4h}{3}(2f(0.25) - f(0.5) + 2f(0.75)),$$

donde $h = 1/4$.

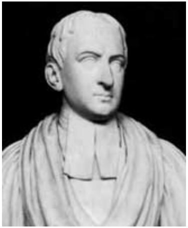
d) $n = 3$ (Regla de Simpson, tres octavos):

$$I \simeq \frac{5h}{24}(11f(0.2) + f(0.4) + f(0.6) + 11f(0.8)),$$

donde $h = 1/5$.

Las fórmulas (compuestas) de Newton-Cotes

Isaac Newton (1642/1643-1727)



Roger Cotes (1682-1716)

Las fórmulas (compuestas) de Newton-Cotes

- Las fórmulas de Newton-Cotes son útiles cuando el intervalo de integración es pequeño.
- Si este no es el caso, una opción sería aumentar el grado del polinomio de interpolación.
- Sin embargo, esto puede implicar un deterioro en la precisión de la aproximación, debido a las altas oscilaciones del polinomio.
- A fin de evitar este problema, una alternativa podría ser dividir el intervalo inicial en subintervalos y aplicar en ellos alguna de las fórmulas anteriores.
- Nos centraremos en las fórmulas compuestas cerradas, es decir, aquellas para las que podemos evaluar la función en los extremos de los intervalos.

La regla del trapecio compuesta

Regla del trapecio compuesta

- Recordemos que la regla del trapecio hace uso de los extremos del intervalo para interpolar un polinomio de grado 1 y aproximar la integral de la función por la integral del polinomio interpolador.
- Sea n un número de subintervalos de igual longitud cuyos extremos son:

$$a = x_0 \leq x_1 = x_0 + h \leq x_2 = x_0 + 2h \leq x_3 = x_0 + 3h \leq \cdots \leq x_n = b.$$

- Se tiene, por tanto, que :

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx.$$

La regla del trapecio compuesta

- Y aproximaremos las integrales en los subintervalos por:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \simeq \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_1(x)dx,$$

donde P_1 es el polinomio interpolador de grado 1 que pasa por $(x_i, f(x_i))$ y $(x_{i+1}, f(x_{i+1}))$, para todo $i = 0, 1, \ldots, n-1$.

La regla del trapecio compuesta

- La aproximación proporcionada por la regla del trapecio en el intervalo (x_i, x_{i+1}), para cada $i = 0, 1, \ldots, n-1$, es:

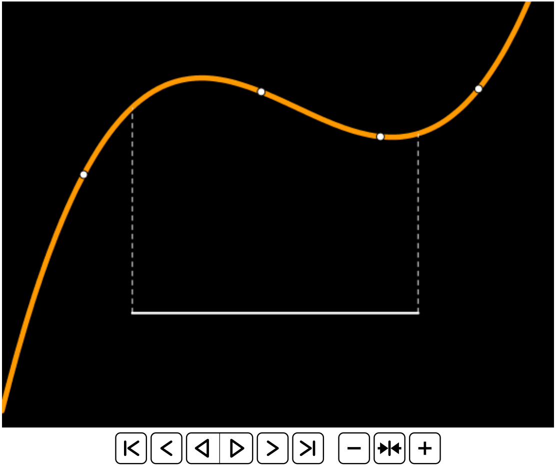
$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \simeq \frac{h}{2}(f(x_i) + f(x_{i+1})),$$

donde $h = (b-a)/n$.

- Por tanto, tendremos que:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{2}(f(x_i) + f(x_{i+1})) = \frac{h}{2}\left(f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)\right).$$

La regla del trapecio compuesta



https://www.geogebra.org/m/z5vcc9v4

La regla del trapecio compuesta

Ejemplo

Utiliza la regla del trapecio compuesta para aproximar las integrales siguientes:

a) $\int_1^2 x\log(x)dx$ con $n = 3$.

b) $\int_0^2 2/(x^2+4)dx$ con $n = 4$.

La regla del trapecio compuesta

- La pregunta natural (como siempre) es: ¿qué error estamos cometiendo?

Error de la regla del trapecio compuesta

Sea $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ es una función dos veces derivable en $[a,b]$, $h=(b-a)/n$, y $x_i=a+ih$, para todo $i=0,1,\ldots,n$ con n un número par. Entonces,

$$\int_a^b f(x)dx=\frac{h}{2}\left(f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b)\right)-\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi),$$

donde $\xi\in(a,b)$.

La regla del trapecio compuesta

Ejemplo

Determina el número de subintervalos que debemos considerar usando la regla del trapecio compuesta para obtener una aproximación de

$$\int_0^{\pi} \sin(x)dx,$$

con un error menor que 0.00002.

La regla del trapecio compuesta

Ejemplo

Determina el número de subintervalos que debemos considerar usando la regla del trapecio compuesta para obtener una aproximación de

$$\int_0^{\pi} \sin(x)dx,$$

con un error menor que 0.00002.

Debemos asegurar que:

$$\left|\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi)\right| = \left|\frac{\pi}{12}h^2 f''(\xi)\right| = \frac{\pi h^2}{12}|\sin(\xi)| < 0.00002.$$

La regla del trapecio compuesta

Dado que $|sin(x)| \leq 1$, para todo x, la condición anterior se tendrá, por ejemplo, si:

$$\frac{\pi h^2}{12}|\sin(\xi)| \leq \frac{\pi h^2}{12} < 0.00002,$$

Dado que $h = (b-a)/n = \pi/n$,

$$\frac{\pi^3}{12n^2} < 0.00002,$$

que implica que:

$$n > \left(\frac{\pi^3}{12 \times 0.00002}\right)^{1/2} = 359.44.$$

Es decir, consideraremos $n \geq 360$.

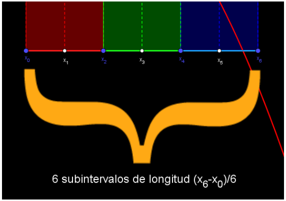
La regla de Simpson compuesta

Regla de Simpson compuesta

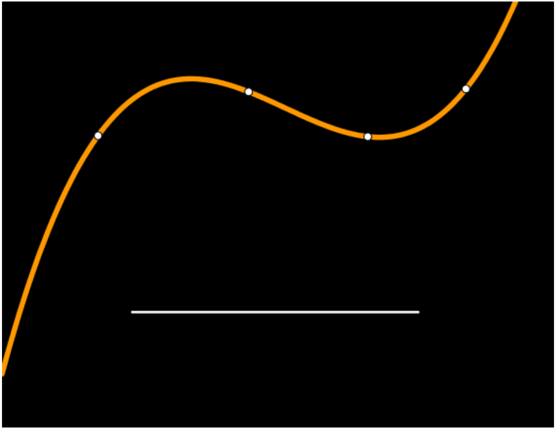
- Recordemos que, para aplicar la regla de Simpson, utilizamos tres nodos equiespaciados a fin de interpolar un polinomio de grado dos.
- Sea n un número par de subintervalos de igual longitud cuyos extremos son:

$$a = x_0 \leq x_1 = x_0 + h \leq x_2 = x_0 + 2h \leq x_3 = x_0 + 3h \leq \cdots \leq x_n = b.$$

- Aplicamos la regla de Simpson a cada subintervalo de amplitud $2h$, siendo $h = (b-a)/n$.



La regla de Simpson compuesta



https://www.geogebra.org/m/jreuqy9q

La regla de Simpson compuesta

- Los subintervalos donde aplicaremos la regla de Simpson serán:

$$[x_{2j-2}, x_{2j}], \text{ con } j = 1, 2, \ldots, n/2,$$

sobre los puntos x_{2j-2}, x_{2j-1} y x_{2j}.

- Supongamos que el intervalo actual es $[x_{2j-2}, x_{2j}]$, para cierto $j \in \{0, 1, \ldots, n/2\}$. En este caso, la fórmula de aproximación será:

$$\int_{x_{2j-2}}^{x_{2j}} f(x)dx \simeq \frac{h}{3}[f(x_{2j-2} + 4f(x_{2j-1}) + f(x_{2j})].$$

- Así pues, para todo el intervalo $[a, b]$, se tiene la fórmula:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{3}\sum_{j=1}^{n/2}[f(x_{2j-2} + 4f(x_{2j-1}) + f(x_{2j})].$$

La regla de Simpson compuesta

Ejemplo

Utiliza la regla de Simpson compuesta para aproximar las integrales siguientes:

a) $\int_1^2 x\log(x)dx$ con $n=3$.

b) $\int_0^2 2/(x^2+4)dx$ con $n=4$.

La regla de Simpson compuesta

Error de la regla de Simpson compuesta

Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función cuatro veces derivable en $[a, b]$, $h = (b-a)/n$, y $x_i = a + ih$, para todo $i = 0, 1, \ldots, n$. Entonces,

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\sum_{j=1}^{n/2}[f(x_{2j-2} + 4f(x_{2j-1}) + f(x_{2j})] - \frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi),$$

donde $\xi \in (a, b)$.

La regla de Simpson compuesta

Ejemplo

Determina el número de subintervalos que debemos considerar con la regla de Simpson compuesta para obtener una aproximación de

$$\int_0^\pi \sin(x)dx,$$

con un error menor que 0.00002.

La regla de Simpson compuesta

Ejemplo

Determina el número de subintervalos que debemos considerar con la regla de Simpson compuesta para obtener una aproximación de

$$\int_0^{\pi} \sin(x)dx,$$

con un error menor que 0.00002.

En este caso, debemos asegurar que:

$$\left| \frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\xi) \right| < 0.00002,$$

y obtendremos $n \geq 18$. Es importante observar que n es el número total de intervalos (número par). En resumen, aplicaremos la regla de Simpson nueve veces como mínimo.

La regla de Simpson compuesta

Observación

A efectos prácticos, más allá de la teoría, conviene tener en cuenta que se puede escoger un número de subintervalos (no necesariamente par) y aplicar la regla de Simpson en cada uno de ellos a partir de los extremos y el punto medio.

Derivación e integración

Julio Mulero
@juliomulero
julio.mulero
Departamento de Matemáticas
Universidad de Alicante

Carmen Gandía
Departamento de Matemáticas
Universidad de Alicante