Diferenciación e Integración Numérica

Cálculo Numérico (2514) Lectura 4

Prof. Gilberto Noguera

Universidad Central de Venezuela
Facultad de Ingeniería
Escuela de Ingeniería Eléctrica

Resumen El documento contiene los elementos mínimos y necesarios para discutir y profundizar, en clases, el tema Derivación e Integración numérica.

1. Diferenciación e Integración

Suponiendo necesario el estimar la derivada de una función en un punto a, partiendo de los valores de f en ciertos puntos, digamos $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Procedemos aproximar usando interpolación o diferencias finitas.

1.1. Aproximación por Interpolación

Supongamos que $x_0, x_1, \ldots, x_n$, son $n+1$ puntos distintos pertenecientes al intervalo $[a, b]$. Supongamos también que $f \in C^{n+1}[a, b]$.

Sea $P_n(x)$ el polinomio interpolante de grado a lo sumo n que interpola a $f(x)$ en los puntos $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Se tiene que

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

De esta forma, podemos utilizar el polinomio $P_n(x)$ para aproximar la j-ésima derivada de $f(x)$ para cada $x \in [a, b]$, es decir,

$$\frac{d^j}{dx^j} f(x) \approx \frac{d^j}{dx^j} P_n(x), \qquad \text{para } j = 1, 2, \ldots, n.$$

1.2. Aproximación por Diferencias Finitas

Una manera de evaluar la derivada numérica de primer orden de una función f, es usar la definición de derivada, esto es

$$\frac{df}{dx} = f'(x) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(x+\epsilon) - f(x)}{\epsilon}$$

En la práctica esta definición no se puede aplicar literalmente, en su lugar se usa la tabla de datos,

$$\begin{array}{c|cccc} x_i & x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ \hline y_i & y_0 & y_1 & \cdots & y_n \end{array}$$

se toman los valores de la función en los puntos x_0 y $x_1 = x_0 + h$ para estimar

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}(f_1 - f_0)$$

Es posible definir la primera derivada utilizando una formulación hacia atrás,

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}(f_0 - f_{-1})$$

o una formulación centrada, $f'(x_0) = \frac{1}{2h}(f_1 - f_{-1})$. Las siguientes tablas muestran los coeficientes para las derivadas de primer y segundo orden.

Coeficientes para derivadas de primer orden f'

f_{-2}	f_{-1}	f_0	f_1	f_2	Denominador (h)	$O(h^n), n =$
		-1	1		1	1
	-1	1			1	1
		-3	4	-1	2	2
	-1	0	1		2	2
1	-4	3			2	2

Coeficientes para derivadas de segundo orden f''

f_{-3}	f_{-2}	f_{-1}	f_0	f_1	f_2	f_3	Denominador (h^2)	$O(h^n), n =$
			1	-2	1		1	1
		1	-2	1			1	2
	1	-2	1				1	
			2	-5	4	-1	1	2
		1	-2	1	0		1	2
	0	1	-2	1			1	2
-1	4	-5	2				1	2

1.3. Integración Numérica

Consideramos el problema de obtener un valor numérico de la integral definida

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx, \quad b > a,$$

con cierta precisión. Asumamos que $f \in C^{n+1}[a,b]$ y que $[a,b]$ es un intervalo finito.

Definición 1 (Cuadratura) *Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función integrable en $[a,b]$. Una cuadratura $Q(f)$ es un valor numérico que aproxima la integral $I(f)$ y que está definida como*

$$Q(f) = \sum_{k=0}^{n} \omega_k f(x_k),$$

donde $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a,b]$ y $\omega_0, \omega_1, \ldots, \omega_n \in \mathbb{R}$ se denominan pesos.

Fórmulas de Newton-Cotes Las fórmulas de Newton-Cotes son cuadraturas que están basadas en la interpolación polinómica. Asumamos que conocemos el valor de $f(x)$ en cada punto del conjunto de nodos $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$.

Sea

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_i(x)$$

el polinomio interpolante en su forma de Lagrange que interpola a $f(x)$ en los puntos x_i. De esta forma,

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

Integrando a $f(x)$ en el intervalo $[a, b]$ obtenemos

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

lo que implica

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

De esta forma,

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

donde

$$\omega_i = \int_a^b \ell_i(x)\,dx, \quad \text{para } i = 0, 1, \ldots, n,$$

son los pesos, y

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

es el error cometido.

Regla del Trapecio Consideremos el caso $n = 1$ y los nodos $x_0 = a$, $x_1 = b$. Así, el polinomio interpolante $P_1(x)$ es

$$P_1(x) = \frac{b - x}{b - a}\, f(a) + \frac{x - a}{b - a}\, f(b).$$

Luego,

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \int_a^b P_1(x)\,dx + \frac{1}{2} \int_a^b f''(\xi_x)(x - x_0)(x - x_1)\,dx \\
&= \frac{f(a)}{b - a} \int_a^b (b - x)\,dx + \frac{f(b)}{b - a} \int_a^b (x - a)\,dx \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_a^b f''(\xi_x)(x - a)(x - b)\,dx \\
&= \frac{(b - a)}{2}[f(a) + f(b)] + \frac{1}{2} \int_a^b f''(\xi_x)(x - a)(x - b)\,dx
\end{aligned}$$

Así, la Regla del Trapecio es $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{(b-a)}{2}[f(a)+f(b)]$ cuyo término de error es $-\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\xi)$, donde $\xi \in (a,b)$.

Regla de Simpson Consideremos el caso $n=2$ y los nodos $x_0 = a$, $x_1 = (a+b)/2$, $x_2 = b$. Así, el polinomio interpolante $P_2(x)$ es

$$
\begin{aligned}
P_2(x) = {} & \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\,f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\,f(x_1) \\
& + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\,f(x_2)
\end{aligned}
$$

Luego,

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \int_a^b P_2(x)\,dx + \frac{1}{6}\int_a^b f^{(3)}(\xi_x)\prod_{i=0}^{2}(x-x_i)\,dx \\
&= \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] + \\
& \quad \frac{1}{6}\int_a^b f^{(3)}(\xi_x)\prod_{i=0}^{2}(x-x_i)\,dx
\end{aligned}
$$

Así, la Regla de Simpson es

$$
\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]
$$

cuyo término de error es

$$
-\frac{1}{90}(b-a)^5 f^{(4)}(\xi),
$$

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

Regla de Simpson Compuesta Sean n un número par y los nodos

$$
x_i = a + ih, \quad h = \frac{b-a}{n} \quad (0 \le i \le n).
$$

Luego, aplicando la Regla de Simpson en cada uno de los subintervalos $[x_{2i-2}, x_{2i}]$, $i = 1, 2, \ldots, n/2$, obtenemos la Regla de Simpson Compuesta

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

cuyo término de error es $-\frac{1}{180}(b-a)^2 h^4 f^{(4)}(\xi)$, donde $\xi \in (a,b)$.

1.4. Métodos de los Coeficientes Indeterminados

El método de los coeficientes indeterminados consiste en encontrar una cuadratura

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{n} \omega_i f(x_i)$$

tal que sea exacta para polinomios de grado menor o igual a m.

Consideremos dos casos:

(a) todos los nodos x_i son conocidos y todos los pesos ω_i se deben calcular;
(b) algunos nodos x_i y pesos ω_i son conocidos, y los restantes nodos y pesos se deben determinar.

En ambos casos tomamos a $\{1, x, x^2, \ldots, x^n\}$ como la base de Π_n. Luego, todo polinomio de grado menor o igual a n se puede escribir como una combinación lineal de los elementos de esta base.

Caso (a)

La idea es encontrar los valores de los pesos ω_i de tal forma que la cuadratura $Q(f)$ sea exacta para polinomios de grado menor o igual a $m = n$, es decir,

$$I(x^j) - Q(x^j) = 0, \quad \text{para } j = 0, 1, \ldots, n$$

o, equivalentemente,

$$\begin{cases} \omega_0 + \omega_1 + \cdots + \omega_n = \int_a^b dx \\ \omega_0 x_0 + \omega_1 x_1 + \cdots + \omega_n x_n = \int_a^b x\, dx \\ \omega_0 x_0^2 + \omega_1 x_1^2 + \cdots + \omega_n x_n^2 = \int_a^b x^2\, dx \\ \vdots \\ \omega_0 x_0^n + \omega_1 x_1^n + \cdots + \omega_n x_n^n = \int_a^b x^n\, dx \end{cases}$$

Este sistema tiene $(n+1)$ ecuaciones con $(n+1)$ incógnitas.

Ejemplo

Determinar la cuadratura

$$\int_0^1 f(x)\, dx \approx Q(f) = \omega_0 f(0) + \omega_1 f(1)$$

que es exacta para polinomios de grado menor o igual 1.

Solución.

Tenemos que la cuadratura dada debe satisfacer

$$\int_0^1 x^j\, dx - Q(x^j) = 0, \quad j = 0, 1.$$

Así,

$$\begin{cases} \omega_0 + \omega_1 = 1 \\ \omega_1 = \frac{1}{2} \end{cases}$$

de donde se deduce que

$$\omega_0 = \frac{1}{2}, \quad \omega_1 = \frac{1}{2}.$$

Caso (b)

La idea es encontrar algunos pesos ω_i y algunos nodos x_i de tal forma que la cuadratura $Q(f)$ sea exacta para polinomios de grado menor o igual a m.

Ejemplo Determinar el grado de exactitud de la cuadratura

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx Q(f) = \omega_0 f(0) + \omega_1 f(x_1),$$

donde $x_1 \in [0,1]$.

Solución.

Debemos determinar los pesos ω_0 y ω_1, además, también debemos determinar el nodo x_1.

De esta forma, la cuadratura $Q(f)$ puede, a lo sumo, ser exacta para polinomios de grado 2.

Luego, $I(x^j) - Q(x^j) = 0$, para $j = 0, 1, 2$, en otras palabras,

$$\begin{cases} \omega_0 + \omega_1 = 1 \\ \omega_1 x_1 = \frac{1}{2} \\ \omega_1 x_1^2 = \frac{1}{3} \end{cases}$$

de donde se deduce que $\omega_0 = \frac{1}{4}, \quad \omega_1 = \frac{3}{4}, \quad x_1 = \frac{2}{3}$.

Entonces, la cuadratura $Q(f) = \frac{1}{4}f(0) + \frac{3}{4}f(2/3)$ es exacta para polinomios de grado menor o igual a 2.