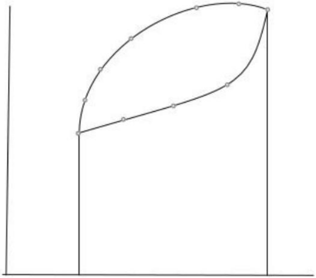
Diferenciación e integración numérica

Victorio E. Sonzogni

Motivación

- Se desea conocer la superficie cubierta por la Laguna Setubal en un momento determinado.
  Se puede obtener una tabla con las coordenadas de los puntos que definen su contorno.
  La integral definida de las curvas de su contorno nos permite conocer el área buscada.



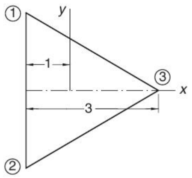
- Estudiando el problema de torsión de barras, para el cálculo de la rigidez torsional es preciso evaluar la integral

$$\mathrm{I} = \int \int_{Area} f(x, y)\ dx\ dy$$

donde

$$f(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) - \frac{1}{6}(x^3 - 3xy^2) - \frac{2}{3}$$

es la función de Prandtl. Para el caso de una sección -por ejemplo- triangular, la integral se extiende al área del triángulo.



Diferenciación e integración numérica

- Ya hemos visto interpolación: dado una curva definida por una serie de puntos, encontrar una función (un polinomio) que pase por esos puntos.
- Ahora veremos como evaluar la *derivada* de una función, si se conocen los valores en una serie de puntos.
- En forma similar, como evaluar la *integral* definida de una función, si se conocen los valores en una serie de puntos.

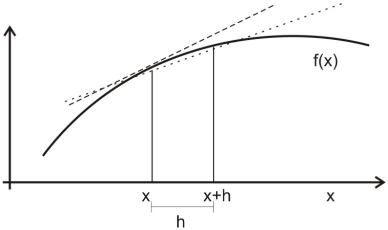
Diferenciación numérica

- Del concepto de derivada:

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

- Esto sugiere una aproximación a la derivada:

$$f'(x) \simeq \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$



Fórmula de 2 puntos

- Desarrollando en Series de Taylor:

$$f(x+h) = f(x) + h\ f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots$$

- Si se trunca la serie en el término lineal el error es $\frac{h^2}{2} f''(\xi)$ donde ξ es un punto interior al intervalo $(x, x+h)$
- De allí:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \ - \frac{h}{2} f''(\xi)$$

- Así la estimación a la derivada es:

$$\tilde{f}'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

y el error de truncamiento: $\frac{h}{2} f''(\xi)$

- Esta fórmula se conoce como *fórmula de 2 puntos*
- Se tomaron los puntos en x y $x + h$ por este motivo se denomina también *fórmula en diferencias finitas hacia adelante* o *fórmula en diferencias finitas progresivas*
- Se podría haber calculado también la derivada en x tomando los puntos $x - h$ y x. En este caso la fórmula se conoce como *fórmula en diferencias finitas hacia atrás* o *fórmula en diferencias finitas regresivas*
- En cualquiera de estos casos el error de de *primer* orden, ya que depende de h
- Una fórmula mejor puede obtenerse involucrando $x - h$ y $x + h$

Fórmula de 3 puntos

- Escribiendo el desarrollo en serie de Taylor:

$$f(x+h) = f(x) + h\ f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{3!} f'''(\xi)$$

$$f(x-h) = f(x) - h\ f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{3!} f'''(\xi)$$

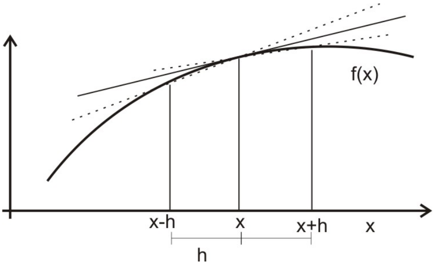
- Restando:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2))$$

- El estimador de la derivada:

$$\tilde{f}'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

  se conoce como *fórmula en diferencias centradas, de tres puntos*, y el error es $\frac{h^2}{6} f'''(\xi)$



- Gráficamente puede verse también que la formula en diferencias centradas da una mejor aproximación a la derivada.
- El error es de segundo orden (depende de h^2).

Otras fórmulas

- Análogamente puede escribirse una *fórmula de 5 puntos*:

$$\tilde{f}'(x) = \frac{1}{12h}[f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)]$$

  que tiene un error $\frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi)$
- Escribiendo el desarrollo en series de Taylor para $x-h$, $x+h$, $x-2h$, $x+2h$, $x-3h$, $x+3h$, etc., y buscando combinaciones lineales que vayan anulando las derivadas más bajas, pueden obtenerse fórmulas para distintos ordenes de derivación y con distintos errores.

Errores en diferenciación numérica

- Al evaluar numericamente la derivada se introducen 2 tipos de errores:
  - Error de truncamiento
    Es debido al método numérico. Por ejemplo el error introducido al retener algunos términos de la Serie de Taylor, y descartar el resto.

  - Error de redondeo
    Debido a la aritmética finita de la computadora (aquí entrar los errores por *poda* -hacia abajo- o por *redondeo* -hacia arriba-)

- Por ej. usando fórmula de 3 puntos, si se designa con $\tilde{f}(x)$ a la representación en punto flotante:

$$f(x+h) = \tilde{f}(x+h) + e_1$$

$$f(x-h) = \tilde{f}(x-h) + e_2$$

  donde e_1 y e_2 son errores de redondeo.

- El error en la aproximación de la derivada:

$$f'(x) - \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x-h)}{2h} = \frac{e_1 - e_2}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi)$$

  donde el primer término es el error de redondeo y el segundo el de truncamiento.

- Cuando $h \to 0$: el error de redondeo (1^{er} término) crece; y el error de truncamiento (2^{do} término), disminuye.

Extrapolación de Richardson

- Hay un procedimiento muy original que permite reducir el error de truncamiento: la Extrapolación de Richardson.
- Hemos visto:

$$f(x+h) = f(x) + h\ f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \frac{h^4}{4!} f^{(4)}(x) + \dots$$

$$f(x-h) = f(x) - h\ f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \frac{h^4}{4!} f^{(4)}(x) - \dots$$

- Restando

$$f(x+h) - f(x-h) = 2h\ f'(x) + 2\frac{h^3}{3!} f'''(x) + 2\frac{h^5}{5!} f^{(5)}(x) + \dots$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \left[\frac{h^2}{3!} f'''(x) + \frac{h^4}{5\ !} f^{(5)}(x) + \dots\right]$$

$$f'(x) = \phi(h) - \left[a_2 h^2 + a_4 h^4 + a_6 h^6 + \dots\right] \qquad (1)$$

donde $\phi(h)$ estamos llamando a la estimación de la derivada (como función de h). Y el corchete es el término de error de truncamiento.

- El error está gobernado por el término $a_2 h^2$. Trataremos de eliminar ese término.
- Si tomamos un paso $\frac{h}{2}$:

$$f'(x) = \frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})}{2\ \frac{h}{2}} - \left[a_2\frac{h^2}{4} + a_4\frac{h^4}{16} + a_6\frac{h^6}{64} + \dots\right]$$

$$f'(x) = \phi(\frac{h}{2}) - \left[a_2\frac{h^2}{4} + a_4\frac{h^4}{16} + a_6\frac{h^6}{64} + \dots\right] \qquad (2)$$

- Multiplicando (1) por -1 y (2) por 4 y sumando:

$$3f'(x) = 4\ \phi(\frac{h}{2}) - \phi(h) - \frac{3}{4}a_4 h^4 - \frac{15}{16}a_6 h^6 - \dots$$

$$f'(x) = \frac{4}{3}\ \phi(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3}\ \phi(h) - \left[\frac{1}{4}a_4 h^4 + \frac{5}{16}a_6 h^6 + \dots\right]$$

- Es decir que tomando como estimación de la derivada en x:

$$\frac{4}{3}\ \phi(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3}\ \phi(h)$$

donde $\phi(x)$ es la fórmula de 3 puntos, el error esta gobernado por el término $a_4 h^4$. Es mucho menor que antes.

- La extrapolación de Richardson permite, combinando la estimacion correspondiente a dos pasos h y $h/2$, reducir mucho el error de truncamiento.
- Este proceso podria repetirse: si llamamos $\psi(h) = \frac{4}{3}\phi(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3}\phi(h)$, podemos hacer una combinación lineal entre $\psi(h)$ y $\psi(\frac{h}{2})$ para eliminar el término en h^4, y así sucesivamente.

Derivadas de orden superior

- Si en vez de restar las expresiones para $f(x+h)$ y $f(x-h)$ se suman, se obtiene:

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2\ f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi)$$

  El primer término es una estimación de la derivada segunda, con un error de segundo orden.

- Análogamente, involucrando 5 puntos puede escribirse:

$$f'''(x) = \frac{f(x+2h) - 2\ f(x+h) + 2\ f(x-h) - f(x-2h)}{2\ h^3}$$

  como estimación de la derivada tercera, también con un error de orden h^2

Derivadas a partir de polinomios interpolantes

- La interpolación de $f(x)$ con polinomios de Lagrange:

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ L_{n,i}(x)\ +\ \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_x)\ \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)$$

  el primer término es $P_n(x)$ el polinomio interpolador; y el segundo el error de truncamiento.

- En esa expresión

$$L_{n,i}(x) = \prod_{\substack{j=0;\\ j\neq i}}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}$$

  son los polinomios de Lagrange.

- La derivada:

$$f'(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ L'_{n,i}(x)\ +\ \frac{1}{(n+1)!}\frac{d}{dx}\left(f^{(n+1)}(\xi_x)\right)\ \prod_{j=0}^{n}(x - x_j) +$$

$$\frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_x)\ \frac{d}{dx}\left(\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)\right)$$

- Si se desea evaluar la derivada en uno de los puntos $x_k, (k = 0, n)$, en que está definida la curva, la expresión $\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)$ se anula y con ella el segundo término, quedando:

$$f'(x_k) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ L'_{n,i}(x_k)\ +\ \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_{x_k})\ \prod_{\substack{j=0;\\ j\neq k}}^{n}(x_k - x_j)$$

A esa última fórmula se llega teniendo en cuenta:

$$\frac{d}{dx}\left[\prod (x - x_j)\right] = \sum_{i=0}^{n} \prod_{\substack{j=0;\\ j\neq i}}^{n} (x - x_j)$$

y

$$\frac{d}{dx}\left[\prod (x_k - x_j)\right] = \prod_{\substack{j=0;\\ j\neq k}}^{n} (x_k - x_j)$$

- Esta fórmula

$$\tilde{f}'(x_k) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\; L'_{n,i}(x_k)$$

para estimar la derivada se puede usar aún cuando los puntos no estén igualmente espaciados, cosa que se requería en las fórmulas en diferencias finitas.

Integración numérica

- El problema de hallar la integral definida de una función

$$\mathrm{I} \;=\; \int_a^b \; f(x)\; dx$$

  no siempre puede lograrse analíticamente.
- Puede ser que:
  - No se conozca la primitiva de la función $f(x)$
  - No se conozca la función $f(x)$, sino que la misma esté descripta como una tabla de valores $(x_i, y_i) \;\; i = 0, n$
- Una manera de abordar el problema es aproximar la función $f(x)$ con otra conocida (por ej. polinomio interpolador) y luego evaluar la integral de ese polinomio.

- Usando polinomios de Lagrange:

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

donde $f(x_i)$ es el valor de la función evaluada en los $(n+1)$ puntos x_i $(i = 0, n)$, y

$$L_{n,i}(x) = \prod_{\substack{j=0;\\ j\neq i}}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}$$

es el polinomio de Lagrange de orden n asociado al punto i.

- La integral

$$\mathrm{I} \;=\; \int_a^b \; f(x)\; dx \;\simeq\; \tilde{\mathrm{I}} \;=\; \int_a^b \; P_n(x)\; dx \;=\; \sum_{i=0}^{n} \; f(x_i) \int_a^b L_{n,i}(x)\; dx$$

- Llamando

$$a_i = \int_a^b L_{n,i}(x)\; dx$$

la integral puede escribirse:

$$\tilde{\mathrm{I}} \;=\; \sum_{i=0}^{n} a_i \; f(x_i)$$

- Esta fórmula evalúa la integral con un error de truncamiento:

$$e_T = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b \; f^{(n+1)}(\xi_x) \; \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)\; dx$$

- El error de truncamiento resulta de integrar $f(x) - P_n(x)$
- Si los puntos están igualmente espaciados

$$x_i = x_0 + i\,h$$

la fórmula

$$\tilde{\mathrm{I}} = \sum_{i=0}^{n} a_i\, f(x_i)$$

se conoce como *fórmula de Newton-Cotes*

- Si se usan $(n+1)$ puntos

$$a = x_0 \ , \quad b = x_n, \quad h = \frac{b-a}{n}$$

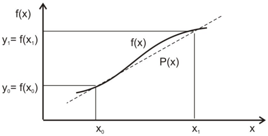
la fórmula se llama *fórmula cerrada de Newton-Cotes*

- Si se excluyen los puntos a y b:

$$a = x_0 - h \ , \quad b = x_n + h, \quad x_i = x_0 + i \ h, \quad h = \frac{b-a}{(n+2)}$$

la fórmula se llama *fórmula abierta de Newton-Cotes*

Regla del Trapecio



- El caso más simple de Fórmula de Newton-Cotes cerrada es con $n = 1$

$$P_1(x) = f(a)\ L_{1,0}(x)\ +\ f(b)\ L_{1,1}(x)$$

con

$$L_{1,0}(x) \ = \frac{(b-x)}{(b-a)} \quad L_{1,1}(x) \ = \frac{(x-a)}{(b-a)}$$

- Integrando:

$$a_0 = \frac{(b-a)}{2} = a_1$$

- La Fórmula de Newton-Cotes cerrada es con $n = 1$:

$$\tilde{\mathrm{I}} = \frac{(b-a)}{2}[f(a) + f(b)]$$

que representa el área del trapecio dibujado con $P_1(x)$, de allí el nombre de esta fórmula.

- El error de truncamiento:

$$e_T = \frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi_x)\ (x-a)(x-b)\ dx$$

- En virtud del Teorema del Valor Medio ponderado para integrales:

$$e_T = \frac{1}{2}\ f''(\xi)\int_a^b (x-a)(x-b)\ dx = -\frac{(b-a)^3}{12}\ f''(\xi)$$

con $\xi \in (a, b)$

Observación:

Por el *Teorema del Valor Medio ponderado para integrales*

Si $f(x) \in C[a,b]$ *,* $g(x)$ *es integrable en* $[a,b]$ *y* $g(x)$ *no cambia de signo en* $[a,b]$*, entonces:* $\exists c \in [a,b]$ *tal que*

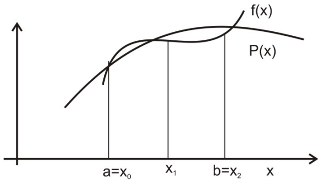
$$\int_a^b f(x)\, g(x)\, dx \;=\; f(c) \int_a^b g(x)\, dx$$

Como caso particular, si $g(x) = 1$*:*

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

es decir $f(c)$ *es un promedio de los valores de* $f(x)$ *en* $[a,b]$

Regla de Simpson



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

- La fórmula de Newton-Cotes con $n = 2$ da:

$$\tilde{I} = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4\ f\left(\frac{b+a}{2}\right) + f(b)\right]$$

- Evalúa el área bajo la parábola que pasa por los 3 puntos
- El error de truncamiento:

$$e_T = -\frac{1}{90}\ h^5\ f^{(4)}(\xi) \qquad \xi \in (a,b)$$

Fórmulas de Newton-Cotes cerradas

- $n = 1$ Regla del Trapecio

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

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

- $n = 2$ Regla de Simpson

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

$$e_T = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi) \qquad \xi \in (a, b)$$

- $n = 3$ Regla de Simpson $\frac{3}{8}$

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

$$e_T = -\frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi) \qquad \xi \in (a, b)$$

- $n = 4$

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

$$e_T = -\frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi) \qquad \xi \in (a, b)$$

Precisión de fórmulas cerradas de Newton-Cotes

- *Grado de precisión* de una fórmula de integración es el entero positivo n tal que $e_T = 0$ al integrar polinomios de grado $\leq n$.
- Las fórmulas cerradas de Newton-Cotes:
  - $n = 1$ (Trapecio): $e_T \propto f''$ $\quad\therefore$ integra exact. polin. de grado 1.
  - $n = 2$ (Simpson): $e_T \propto f^{(4)}$ $\quad\therefore$ integra exact. polin. de grado 3.
  - $n = 3$ ($\frac{3}{8}$): $e_T \propto f^{(4)}$ $\quad\therefore$ integra exact. polin. de grado 3.
  - $n = 4$: $e_T \propto f^{(6)}$ $\quad\therefore$ integra exact. polin. de grado 5.
- Las fórmulas cerradas de Newton-Cotes con n *par* tienen grado de precisión $n + 1$.
- Las fórmulas cerradas de Newton-Cotes con n *impar* tienen grado de precisión n.

Fórmulas de Newton-Cotes abiertas

- $n = 0$ Regla del Punto Medio

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

$$e_T = \frac{h^3}{3} f''(\xi) \qquad \xi \in (a, b)$$

- $n = 1$

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

$$e_T = \frac{3h^3}{4} f''(\xi) \qquad \xi \in (a, b)$$

- $n = 2$

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

$$e_T = \frac{14h^5}{45} f^{(4)}(\xi) \qquad \xi \in (a, b)$$

- $n = 3$

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

$$e_T = \frac{95h^5}{144} f^{(4)}(\xi) \qquad \xi \in (a, b)$$

Error de truncamiento de fórmulas de Newton-Cotes

- Las fórmulas cerradas de Newton-Cotes:
  - n par :

$$e_T = \frac{h^{n+3}}{(n+2)!} \; f^{(n+2)}(\xi) \; \int_0^n \; t^2(t-1)\dots(t-n)\; dt$$

  - n impar :

$$e_T = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} \; f^{(n+1)}(\xi) \; \int_0^n \; t(t-1)\dots(t-n)\; dt$$

- Las fórmulas abiertas de Newton-Cotes:
  - n par :

$$e_T = \frac{h^{n+3}}{(n+2)!} \; f^{(n+2)}(\xi) \; \int_{-1}^{n+1} \; t^2(t-1)\dots(t-n)\; dt$$

  - n impar :

$$e_T = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} \; f^{(n+1)}(\xi) \; \int_{-1}^{n+1} \; t(t-1)\dots(t-n)\; dt$$

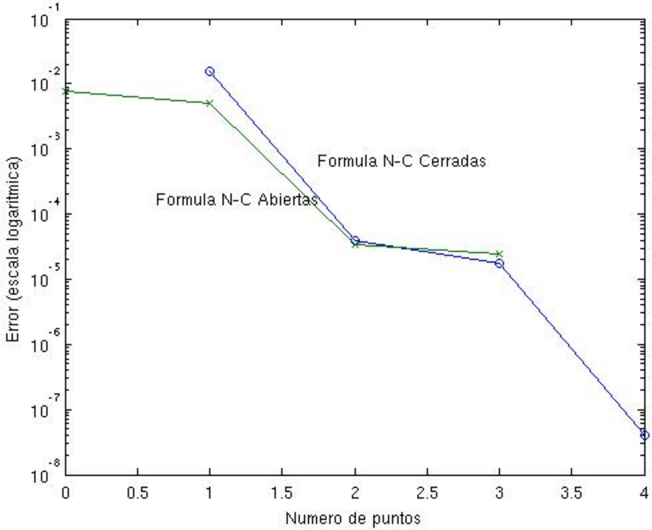
Ejemplo

- La integral de $f(x) = sin(x)$ en el intervalo $[0, pi/4]$ da

$$\mathrm{I} = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \simeq 0.29289322$$

- La integración con Fórmulas de Newton Cotes:

n	0	1	2	3	4
F. Cerradas		0.27768018	0.29293264	0.29291070	0.29289318
Error		0.01521303	0.00003942	0.00001748	0.00000004
F. Abiertas	0.30055887	0.29798754	0.29285866	0.29286923	
Error	0.00766565	0.00509432	0.00003456	0.00002399	


Formula N-C Cerradas
Formula N-C Abiertas
Error (escala logaritmica)
Numero de puntos
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
10^{-6}
10^{-7}
10^{-8}
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4

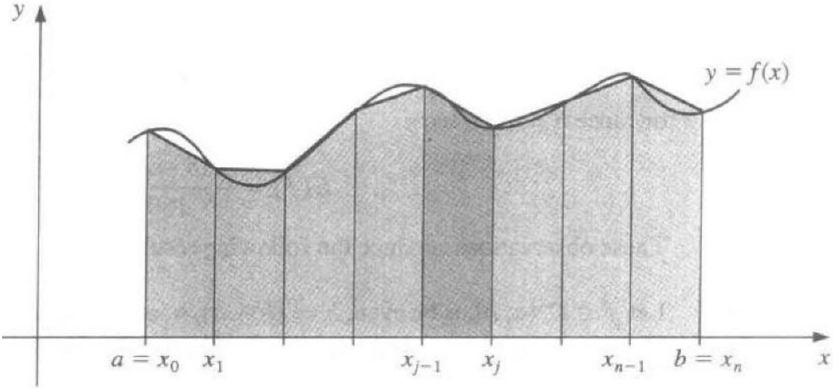
Reglas de integración Compuesta

- Las fórmulas de integración pueden usarse para integrar funciones definidas en una cantidad de puntos mayor. Estas formulas se llaman *compuestas*
- Por ejemplo, la *Regla del Trapecio Compuesta* integra con su fórmula cada intervalo de definición de la función.
- Sea una funcion definida en $x_i (i = 0, n)$ puntos

$$\int_a^b f(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\, dx \simeq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1})[f(x_i) + f(x_{i-1})]$$

- Esta fórmula puede usarse aún cuando los puntos no estén igualmente espaciados.

Regla del Trapecio Compuesta



- Si los puntos están igualmente espaciados

$$h = \frac{b-a}{n}, \qquad x_0 = a; \qquad x_i = a + i\ h$$

- La integral:

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

- Y el error de truncamiento:

$$e_T = -\frac{1}{12} n\ h^3\ f''(\xi), \qquad \xi \in (a,b)$$

Regla de Simpson Compuesta

- En este caso hay que usar un numéro *par* de intervalos

$$h = \frac{b-a}{n}, \qquad x_0 = a; \qquad x_i = a + i\ h$$

- La integral:

$$\int_a^b f(x)\ dx \ = \ \int_{x_0}^{x_2} f(x)\ dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)\ dx + + \ldots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)\ dx$$

$$\int_a^b f(x)\ dx \ = \sum_{i=1}^{n/2} \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)\ dx$$

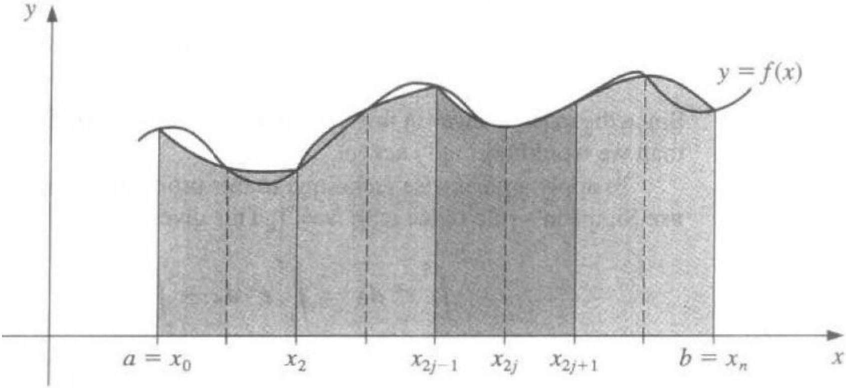
- Aplicando Simpson en cada subintervalo:

$$\int_a^b f(x)\ dx \ \simeq \frac{h}{3} \ \sum_{i=1}^{n/2} [f(x_{2i-2)}) + 4\ f(x_{21-1}) + f(x_{2i})]$$

$$\int_a^b f(x)\ dx \ \simeq \frac{h}{3}\ [f(x_0) + 2 \sum_{i=2}^{n/2} f(x_{2i-2)}) + 4 \sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + f(x_n)]$$

- Y el error de truncamiento:

$$e_T = -\frac{1}{90}\frac{n}{2}\ h^5\ f^{(4)}(\xi), \qquad \xi \in (a, b)$$


y
y = f(x)
a = x0
x2
x2j−1
x2j
x2j+1
b = xn
x

Errores de redondeo en fórmulas de integración compuesta

- Por ejemplo, tomando la regla de Simpson compuesta, al evaluar $f(x_i)$ se tiene un error de redondeo e_i:

$$f(x_i) = \tilde{f}(x_i) + e_i, \qquad i = 0, 1, 2 \ldots n$$

- La cota máxima del error en la fórmula de Simpson compuesta:

$$e = |\frac{h}{3}\ [e_0 + 2\ \sum_{i=1}^{n/2} e_{2i} + 4\ \sum_{i=1}^{n/2}\ e_{2i-1} + e_n]|$$

$$e \leq \frac{h}{3}\ [|e_0| + 2\ \sum_{i=1}^{n/2} |e_{2i}| + 4\ \sum_{i=1}^{n/2}\ |e_{2i-1}| + |e_n|]$$

- Sea ϵ tal que $e_i \leq \epsilon \ \forall i$, entonces:

$$e \leq \frac{h}{3} \left[\epsilon + 2 \left(\frac{n}{2} - 1\right) \epsilon + 4 \ \frac{n}{2} \ \epsilon + \epsilon\right] = n \ h \ \epsilon$$

- Pero $n \ h = b - a$ luego:

$$e \leq (b - a) \ \epsilon$$

- El error de redondeo en las fórmulas compuestas no depende de h.

Ejemplo

- La integral de $f(x) = \sin(x)$ en el intervalo $[0, \pi/4]$ es $\mathrm{I} \simeq 0.29289322$
- La Regla del Trapecio Compuesta, dividiendo el intervalo en 8 subintervalos ($x_0 = 0,\ x_8 = \pi/4,\ h = \frac{\pi}{32}$) da:

$$\tilde{\mathrm{I}} = \frac{\pi}{64}\ [\sin(0) + 2\ \sum_{i=1}^{7} \sin(\frac{i\ \pi}{32}) + \sin(\frac{\pi}{4})] = 0.29265793$$

- El error:

$$e_T = -\frac{1}{2} n\ h^3\ f''(\xi) = \frac{\pi^3}{8192} \sin\xi$$

- No conocemos ξ pero el menor valor será para $\xi = 0$ y el mayor para $\xi = \frac{\pi}{4}$, de donde $e_{T\,min} = 0;\ \ e_{T\,max} = 0.00378494$ y podemos acotar:

$$\tilde{\mathrm{I}} + e_{T\,min}\ \leq\ I\ \leq\ \tilde{\mathrm{I}} + e_{T\,max}$$

$$0.29265793\ \leq\ I\ \leq\ 0.29667816$$

Cuadratura

- *Cuadratura* es un sinónimo de *integración definida*.
- Hemos visto fórmulas de integración del tipo:

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

- Esa integral numérica es exacta para funciones que sean polinomios de grado $\leq n$.
- Los nodos x_i son fijados de antemano (por ej. igualmente espaciados en (a, b)).
- Si la función es descripta como una tabla de valores (x_i, y_i), hay que usar fórmulas como esa indicada.
- Pero si se puede evaluar $f(x)$ en cualquier punto, podemos preguntarnos si existe una elección de nodos x_i mejor que aquella.

Por ejemplo:

- Las Fórmulas de Cuadratura de Chebyshev

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq c\,\sum_{i=1}^{n} f(x_i)$$

- Los coeficientes (a_i) son todos iguales.
- Pero los nodos x_i no son arbitrarios, sino que deben tomar determinados valores.
- Por ejemplo, para $n = 4$:

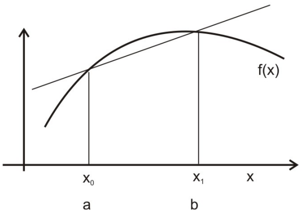
$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \simeq \frac{2}{5}[f(-\alpha) + f(-\beta) + f(0) + f(\beta) + f(\alpha)]$$

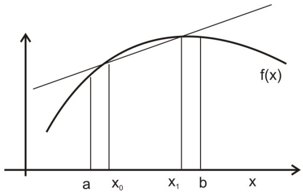
donde $\alpha = \sqrt{\frac{5+\sqrt{11}}{12}}$ y $\beta = \sqrt{\frac{5-\sqrt{11}}{12}}$

- Entre las ventajas de estas fórmulas: reducir el número de multiplicaciones de n a 1.

Cuadratura de Gauss

- La integral de Newton-Cotes con $(n+1)$ puntos es exacta para funciones que sean polinomios de grado $\leq n$.
- Se puede plantear si es posible obtener un grado de precisión mayor eligiendo convenientemente los puntos.
- Ello es asi. Por ej., gráficamente puede verse como la Regla del Trapecio, que es exacta para integrar polinomios de orden 1, tambien puede dar el valor exacto para polinomios de orden 2, siempre que se elijan adecuadamente los puntos x_0 y x_1.





- En la fórmula

$$\tilde{\mathrm{I}} = \sum_{i=0}^{n} a_i \, f(x_i)$$

  podemos determinar los $(n+1)$ coeficientes a_i y los $(n+1)$ x_i

- Estos son $2(n+1)$ parámetros a determinar. Esperamos tener una evaluación exacta de la integral para polinomios de grado $\leq 2n+1$.

Funciones ortogonales

<u>Definición:</u>

Un conjunto de funciones $\phi_j(x)$ $\;(0 < j < n)$ *se dice* ortogonal *con respecto a una función* $w(x) > 0$, *en* $[a, b]$, *si*

$$\int_a^b \phi_j(x)\, \phi_k(x)\, w(x)\, dx \;=\; \begin{cases} 0 & \text{para } j \neq k \\ > 0 & \text{para } j = k \end{cases}$$

La función $w(x)$ *se denomina* función de ponderación *o* función de peso

Cuadratura de Gauss

Teorema:

Sea una función de peso $w(x) > 0$ y un polinomio $q(x) \neq 0$ de grado $n+1$, que es ortogonal a cualquier polinomio $p(x)$ de grado $\leq n$, es decir:

$$\int_a^b q(x)\ p(x)\ w(x)\ dx\ = 0$$

entonces, si x_i $(i = 0, 1, 2 \ldots n)$ son los *ceros* de $q(x)$, la fórmula

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

es exacta para toda f(x) que sea un polinomio de grado $\leq 2n+1$.

Demostración:

- *Sea $f(x)$ un polinomio de grado $\leq 2n+1$.*
- *Dividimos f por q*

$$f = p\, q \ + \ r$$

- *El cociente p y el residuo r son polinomios de grado $\leq n$.*
- *La integral*

$$\int_a^b f\ w\ dx \ = \int_a^b (p\, q\, w + r\ w)\ dx \ = \int_a^b r\ w\ dx \ = \sum_{i=0}^{n} a_i\ r(x_i)$$

La segunda igualdad es por hipótesis y la tercera por ser r de grado $\leq n$

- *Como x_i son ceros de q: $f(x_i) = r(x_i)$*

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

Observación:

- *En la demostración anterior, al demostrar la igualdad* $\int_a^b r\ w\ dx\ = \sum_{i=0}^n a_i\ r(x_i)$, *se usó el hecho de que la integral a través de una funcion de peso* $w(x)$ *positiva es:*

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

  donde $a_i = \int_a^b w(x) L_{n,i}(x)\ dx$ *y* $L_{n,i}(x)$ *son los polinomios de Lagrange.*
- *Un caso particular se da cuando* $w(x) = 1$. *Los polinomios ortogonales de Legendre están construidos con* $w(x) = 1$ *y permiten ser usados para evaluar* $\int_a^b f(x)\ dx$
- *Otras familias de polinomios ortogonales sirven para evaluar integrales ponderadas con distintos* $w(x)$.

- La fórmula de integración Gauss-Legendre con n puntos es:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} a_i\, f(x_i)$$

- ¿Cómo se calculan los x_i?
  Son los ceros del polinomio de Legendre $P_n(x)$ de grado (n), ortogonal a todos los polinomios de grado $\leq n-1$
- Los ceros de los polinomios ortogonales son simples y reales en $[a, b]$.
- ¿Cómo se calculan los a_i?
  De igual manera que para las fórmulas de Newton-Cotes. Si $f(x)$ se representa con polinomios de Lagrange:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} L_{n-1,i}(x)\, f(x_i)$$

con $L_{n-1,1}(x) = \prod_{\substack{j=1;\\ j\neq i}}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}$ polinomios de Lagrange.

- A los efectos de poder obtener de antemano los parámetros de las fórmulas de Gauss se suele *normalizar* el intervalo: $[-1, 1]$
- Así

$$\int_{-1}^{1} f(x)\ dx = \int_{-1}^{1} \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\ L_{n-1,i}(x)\ dx = \sum_{i=0}^{n} a_i\ f(x_i)$$

donde

$$a_i = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=1;\\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\ dx$$

- Hay tablas que dan los x_i (ceros de polinomios ortogonales, en $[-1, 1]$) y los a_i (calculados con la fórmula anterior), para distinta cantidad de puntos.

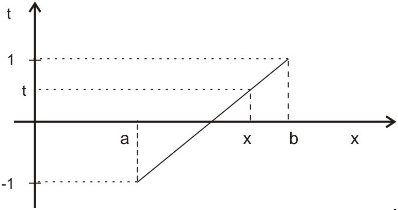
- Según la familia de polinomios ortogonales que se use para determinar los x_i, se tienen diferentes juegos de parámetros (Gauss-Legendre, Gauss-Chebyshev, Gauss-Laguerre, Gauss-Hermite, etc.)
- Por ej. en los textos puede aparecer:

Gauss–Legendre quadrature

$$\int_{-1}^{1} f(\xi)d\xi \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(\xi_i)$$

$\pm\xi_i$	A_i	$\pm\xi_i$	A_i
$n=2$		$n=5$	
0.577 350	1.000 000	0.000 000	0.568 889
$n=3$		0.538 469	0.478 629
0.000 000	0.888 889	0.906 180	0.236 927
0.774 597	0.555 556	$n=6$	
$n=4$		0.238 619	0.467 914
0.339 981	0.652 145	0.661 209	0.360 762
0.861 136	0.347 855	0.932 470	0.171 324

- Si hay que integrar en un intervalo $[a, b]$, se hace un cambio de variables:



$$t = -1 + 2\left(\frac{x-a}{b-a}\right)$$

$$t = \frac{2x-a-b}{b-a}$$

$$x = a + \frac{t+1}{2}(b-a) = \frac{1}{2}[t(b-a)+a+b]$$

- Asi

$$\int_a^b f(x)\ dx = \int_{-1}^{1} f(\frac{1}{2}[t(b-a)+a+b])\ \frac{1}{2}(b-a)\ dt$$

Convergencia de la Cuadratura de Gauss

Se puede mostrar que:

1. Los coeficientes de la Cuadratura Gaussiana son $a_i > 0$ y que

$$\sum_{i=1}^{n} a_i = \int_a^b w(x)\ dx$$

2. El error $e_T \to 0$ cuando $n \to \infty$
3. El error de truncamiento:

$$e_T = \frac{1}{(2n)!}\ f^{(2n)}(\xi) \int_a^b w(x) \prod_{i=1}^{n-1} (x - x_i)\ dx$$

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

Ejemplo

- Calcular la integral $\int_1^{1.5} \; e^{-x^2} \; dx$, cuyo valor exacto es $\mathrm{I} = 0.1093643$.
- Debe transformarse para tener un intervalo normalizado $[-1, 1]$

$$x = a + \frac{t+1}{2}(b-a) = \frac{1}{4}(t+5)$$

$$dx = \frac{1}{4} \; dt$$

$$\int_1^{1.5} \; e^{-x^2} \; dx \;\; = \;\; \frac{1}{4} \int_{-1}^{1} \; e^{-\frac{(t+5)^2}{16}} \; dt \;\; = \;\; \sum_{i=1}^{n} a_i \; f(t_i)$$

- De la tabla de coeficiente para la Cuadratura de Gauss Legendre se obtiene:
  - Con 2 puntos: $t_1 = -0.577350$, $a_1 = 1$, $t_2 = 0.577350$, $a_2 = 1$ y sustituyendo: $\mathrm{I} = 0.1094003$
  - Con 3 puntos: $t_1 = -0.774597$, $a_1 = 0.555556$, $t_2 = 0$, $a_2 = 0.888889$, $t_3 = 0.774597$, $a_3 = 0.555556$, y sustituyendo: $\mathrm{I} = 0.1093642$