Clase 14 - Integración numérica (2)

Las fórmulas de Newton-Cotes y las reglas simples de integración numérica en general no son eficientes cuando se desea calcular una integral definida en un intervalo grande. Por un lado, se requerirían más puntos de interpolación y los valores de los coeficientes son más difíciles de calcular. Por otro lado, se sabe que los polinomios interpolantes suelen tener un comportamiento oscilatorio cuando se utilizan muchos puntos de interpolación. Las reglas compuestas que veremos a continuación se basan en particionar el intervalo de integración y usar las reglas simples que ya vimos.

Reglas compuestas

Para entender mejor en que consisten las reglas compuestas se analizará un ejemplo aplicando la Regla de Simpson.

Sea desea estimar el valor de $\int_0^4 e^x dx$. Esta integral es fácil de calcular con métodos analíticos:

$$\int_0^4 e^x dx = [e^x]_0^4 = e^4 - e^0 = e^4 - 1 = 53.59815...$$

Si aplicamos la Regla de Simpson

$$\int_0^4 e^x dx \approx \frac{2}{3} (e^0 + 4e^2 + e^4) = 56.76958...$$

esta estimación tendría un error aproximado de -3.17143...

Ahora, si dividimos el intervalo en dos: $[0,4] = [0,2] \cup [2,4]$, y aplicamos la Regla de Simpson en cada subintervalo se tiene

$$\int_0^4 e^x dx = \int_0^2 e^x dx + \int_2^4 e^x dx$$

$$\approx \frac{1}{3} (e^0 + 4e^1 + e^2) + \frac{1}{3} (e^2 + 4e^3 + e^4)$$

$$\approx \frac{1}{3} (e^0 + 4e^1 + 2e^2 + 4e^3 + e^4) = 53.8635...,$$

con una estimación del error de -0.26570...

Si dividimos otra vez el intervalo $[0,4] = [0,1] \cup [1,2] \cup [2,3] \cup [3,4]$, y aplicamos la Regla de Simpson en cada subintervalo se tiene

$$\int_{0}^{4} e^{x} dx = \int_{0}^{1} e^{x} dx + \int_{1}^{2} e^{x} dx + \int_{2}^{3} e^{x} dx + \int_{3}^{4} e^{x} dx$$

$$\approx \frac{1}{6} (e^{0} + 4e^{1/2} + e) + \frac{1}{6} (e + 4e^{3/2} + e^{2})$$

$$+ \frac{1}{6} (e^{2} + 4e^{5/2} + e^{3}) + \frac{1}{6} (e^{3} + 4e^{7/2} + e^{4})$$

$$= \frac{1}{6} (e^{0} + 4e^{1/2} + 2e + 4e^{3/2} + 2e^{2} + 4e^{5/2} + 2e^{3} + 4e^{7/2} + e^{4})$$

$$= 53.61622...,$$

con una estimación del error de -0.01807...

A continuación se generalizará esta idea para la Regla de Simpson.

Regla compuesta de Simpson

Consideremos n un entero positivo y subdividimos el intervalo [a,b] en n subintervalos iguales y apliquemos la regla de Simpson en cada de subintervalo. Por lo tanto en cada subintervalo consideramos los extremos y el punto medio. En consecuencia se tienen (2n+1) puntos igualmente espaciados $x_j = a + jh$, para $j = 0, \dots, 2n$, con h = (b-a)/2n.

Luego,

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \sum_{j=1}^{n} \int_{x_{2j-2}}^{x_{2j}} f(x) dx$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \left\{ \frac{h}{3} \left[f(x_{2j-2}) + 4f(x_{2j-1}) + f(x_{2j}) \right] - \frac{h^{5}}{90} f^{(4)}(\xi_{j}) \right\},$$

para algún $\xi_j \in (x_{2j-2}, x_{2j})$, con j = 1, ..., n, y $f \in C^4[a, b]$.

Notar que para j = 1,...,n, el término $f(x_{2j})$ aparece en los subintervalos $[x_{2j-2},x_{2j}]$ y $[x_{2j},x_{2j+2}]$, entonces:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{h}{3} \left\{ f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{n} f(x_{2j}) + 4 \sum_{j=1}^{n} f(x_{2j-1}) + f(x_{2n}) \right\} - \frac{h^5}{90} \sum_{j=1}^{n} f^{(4)}(\xi_j),$$

para algún $\xi_j \in (x_{2j-2}, x_{2j})$, con j = 1, ..., n, y $f \in C^4[a, b]$.

Consideremos el último término, correspondiente al error.

Como $f^{(4)}$ es continua en [a,b], entonces por el Teorema de valores extremos para funciones continuas, se tiene que

$$\min_{x \in [a,b]} f^{(4)}(x) \leq f^{(4)}(\xi_j) \leq \max_{x \in [a,b]} f^{(4)}(x), \quad \text{para } j = 1, \dots, n$$

$$n \min_{x \in [a,b]} f^{(4)}(x) \leq \sum_{j=1}^n f^{(4)}(\xi_j) \leq n \max_{x \in [a,b]} f^{(4)}(x)$$

$$\min_{x \in [a,b]} f^{(4)}(x) \leq \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n f^{(4)}(\xi_j) \leq \max_{x \in [a,b]} f^{(4)}(x).$$

Por el teorema del Valor Intermedio para funciones continuas, existe $\mu \in (a,b)$ tal que

$$f^{(4)}(\mu) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f^{(4)}(\xi_i),$$

y por lo tanto,

$$\sum_{j=1}^{n} f^{(4)}(\xi_j) = n f^{(4)}(\mu). \tag{1}$$

Usando (1) y que h = (b-a)/(2n), el término del error en la regla compuesta de Simpson puede ser reformulado independientemente de ξ_i :

$$E(f) = -\frac{h^5}{90} \sum_{j=1}^{n} f^{(4)}(\xi_j) = -\frac{h^5}{90} n f^{(4)}(\mu) = -\frac{(b-a)}{180} h^4 f^{(4)}(\mu).$$

Los resultados desarrollados hasta aquí se resumen en el siguiente teorema:

Teorema 1. Sean $f \in C^4[a,b]$, n entero positivo, h = (b-a)/(2n) y $x_j = a+jh$, para $j = 0, \ldots, 2n$. Entonces existe $\mu \in (a,b)$ tal que la **regla compuesta de Simpson** para n subintervalos está dada por:

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

A continuación se presenta el pseudocódigo de la regla compuesta de Simpson.

Algoritmo de la regla compuesta de Simspon

Dados los siguientes datos de entrada: a: extremo inferior de integración, b: extremo superior de integración y n un entero positivo par correspondiente al número de subintervalos en que se particiona el [a,b].

```
input a,b,n

h \leftarrow (b-a)/(2n)

sx0 \leftarrow f(a) + f(b)

sx1 \leftarrow 0 (suma de f(x_{2j-1}))

sx2 \leftarrow 0 (suma de f(x_{2j}))

x \leftarrow a

for j = 1,2,...,2n-1 do

x \leftarrow x+h

if j es par then

sx2 \leftarrow sx2 + f(x)

else

sx1 \leftarrow sx1 + f(x)

endif

endfor

sx \leftarrow (sx0 + 2sx2 + 4sx1) * h/3

output sx
```

Regla compuesta del Trapecio

end

La deducción de esta regla se hace manera análoga a lo que se hizo con la regla compuesta de Simpson. En este caso comenzaremos enunciando el siguiente teorema.

Teorema 2. Sean $f \in C^2[a,b]$, n un número entero positivo, h = (b-a)/n y $x_j = a+jh$, para j = 0, ..., n. Entonces existe $\mu \in (a,b)$ tal que la **regla compuesta del Trapecio** para n subintervalos está dada por:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{h}{2} \left\{ f(a) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(b) \right\} - \frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\mu).$$

Demostración. Se comienza particionando el intervalo [a,b] en n subintervalos y luego se aplica la regla simple del Trapecio en cada subintervalo (Figura (1)):

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \sum_{j=1}^{n} \int_{x_{j-1}}^{x_{j}} f(x) dx$$
$$= \sum_{j=1}^{n} \left\{ \frac{h}{2} \left[f(x_{j-1}) + f(x_{j}) \right] - \frac{h^{3}}{12} f''(\xi_{j}) \right\}$$

para algún $\xi_j \in (x_{j-1}, x_j)$, con j = 1, ..., n, y $f \in C^2[a, b]$.

Notar que los valores $f(x_j)$ para $j=1,\ldots,n-1$, aparecen dos veces en la última expresión, entonces se puede escribir

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{h}{2} \left\{ f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(x_n) \right\} - \frac{h^3}{12} \sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j),$$

para algún $\xi_i \in (x_{i-1}, x_i)$, con $j = 1, \dots, n$.

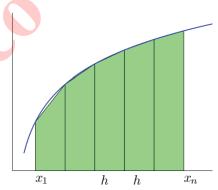


Figura 1: Regla compuesta del Trapecio

Ahora, consideramos el término del error

$$E(f) = -\frac{h^3}{12} \sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j),$$

para algún $\xi_j \in (x_{j-1}, x_j)$), con j = 1, ..., n. Como f'' es continua en [a, b], entonces por el Teorema de valores extremos para funciones continuas, se tiene que

$$\min_{x \in [a,b]} f''(x) \leq f''(\xi_j) \leq \max_{x \in [a,b]} f''(x), \quad \text{para } j = 1, \dots, n$$

$$n \min_{x \in [a,b]} f''(x) \leq \sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j) \leq n \max_{x \in [a,b]} f''(x)$$

$$\min_{x \in [a,b]} f''(x) \leq \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j) \leq \max_{x \in [a,b]} f''(x).$$

Por el teorema del Valor Intermedio para funciones continuas, existe $\mu \in (a,b)$ tal que

$$f''(\mu) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j),$$

y por lo tanto,

$$\sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j) = nf''(\mu). \tag{2}$$

Luego Usando (2) y que h = (b-a)/n, el término del error en la regla compuesta del Trapecio puede ser reformulado independientemente de ξ_i :

$$E(f) = -\frac{h^3}{12} \sum_{j=1}^n f''(\xi_j) = -\frac{h^3}{12} n f''(\mu) = -\frac{(b-a)}{12} h^2 f'''(\mu).$$

El pseudocódigo es muy fácil de deducir a partir la fórmula de la regla compuesta del Trapecio.

Reglas compuestas del Punto Medio y del Rectángulo

Las deducciones de las reglas compuestas del Punto Medio y del Rectángulo son análogas a las dos anteriores por lo que sólo enunciamos los teoremas siguientes. Los respectivos pseudocódigos se deducen fácilmente a partir de estos teoremas.

Teorema 3. Sean $f \in C^2[a,b]$, n un número par, h = (b-a)/(n+2) y $x_j = a + (j+1)h$, para $j = -1,0,\ldots,n+1$. Entonces existe $\mu \in (a,b)$ tal que la **regla compuesta del Punto Medio** para n+2 subintervalos está dada por:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = 2h \sum_{j=0}^{n/2} f(x_{2j}) + \frac{(b-a)}{6} h^{2} f''(\mu).$$

Ver Figura (2).

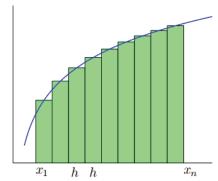


Figura 2: Regla compuesta del Punto Medio

Teorema 4. Sean $f \in C^1[a,b]$, n un número entero positivo, h = (b-a)/n y $x_j = a+jh$, para $j = 0, \ldots, n$. Entonces existe $\mu \in (a,b)$ tal que la **regla compuesta del Rectángulo** para n subintervalos está dada por:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = h \sum_{j=0}^{n-1} f(x_j) + \frac{(b-a)}{2} h f'(\mu).$$

Ejemplo: si bien es posible calcular exactamente la integral

$$\int_0^{\pi} \operatorname{sen} x \, dx = [-\cos x]_0^{\pi} = [\cos x]_{\pi}^0 = 2,$$

se desea determinar cuál es el entero *n* para estimar esta integral numéricamente con un error menor que 0.00002, utilizando las diferentes reglas compuestas de integración.

- Regla compuesta del Rectángulo.

Usamos la expresión del error para despejar n y el hecho que h = (b-a)/n:

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

luego,

$$|E_R(f)| = \left| \frac{(\pi - 0)}{2} \frac{\pi - 0}{n} \cos(\mu) \right| = \frac{\pi^2}{2n} < 0.00002,$$

de aquí resulta que n > 246741.

- Regla compuesta del Punto Medio.

Usamos la expresión del error para despejar n y el hecho que h = (b-a)/(n+2):

$$E_{PM}(f) = \frac{(b-a)}{6}h^2f''(\mu),$$

luego,

$$|E_{PM}(f)| = \left| \frac{(\pi - 0)}{6} \left(\frac{\pi - 0}{n+2} \right)^2 (-\sin(\mu)) \right| = \frac{\pi^3}{6(n+2)^2} < 0.00002,$$

de aquí resulta que n > 507.

- Regla compuesta del Trapecio.

Usamos la expresión del error para despejar n y el hecho que h = (b-a)/n:

$$E_T(f) = -\frac{(b-a)}{12}h^2f''(\mu),$$

luego,

$$|E_T(f)| = \left| -\frac{(\pi - 0)}{12} \left(\frac{\pi - 0}{n} \right)^2 (-\operatorname{sen}(\mu)) \right| = \frac{\pi^3}{12n^3} < 0.00002,$$

de aquí resulta que n > 360.

- Regla compuesta de Simpson. Usamos la expresión del error para despejar n y el hecho que h = (b-a)/n:

$$E_S(f) = -\frac{(b-a)}{180}h^4f^{(4)}(\mu),$$

luego,

$$|E_T(f)| = \left| -\frac{(\pi - 0)}{180} \left(\frac{\pi - 0}{n} \right)^4 \operatorname{sen}(\mu) \right| = \frac{\pi^5}{180n^4} < 0.00002,$$

de aquí resulta que n > 18.

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

Regla	Fórmula	Error
Rectángulo	$h\sum_{j=0}^{n-1} f(x_j)$	$\frac{(b-a)}{2}hf'(\mu)$
Punto medio	$2h\sum_{j=0}^{n/2}f(x_{2j})$	$\frac{(b-a)}{6}h^2f''(\mu)$
Trapecio	$\frac{h}{2} \left\{ f(a) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(b) \right\}$	$-\frac{(b-a)}{12}h^2f''(\mu)$
Simpson	$\frac{h}{3} \left\{ f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{(n/2)-1} f(x_{2j}) + 4 \sum_{j=1}^{n/2} f(x_{2j-1}) + f(x_n) \right\}$	$-\frac{(b-a)}{180}h^4f^{(4)}(\mu)$