Tema 5. Integración Numérica.

Computación Numérica

Antonio Palacio

Departamento de Matemáticas
Universidad de Oviedo

palacioantonio@uniovi.es

Curso 2021-2022

Contenidos I

Contenidos

Introducción

Motivación

- Objetivo:

  Cálculo aproximado de $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$
- Razones:
  - Sólo se conoce el valor de f en algunos puntos.
  - No se conoce una primitiva para f.
  - El método para el cálculo de la primitiva resulta muy complicado.
- Procedimiento general:
  - $f \approx P \Longrightarrow \displaystyle\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P(x)dx$
- Cuando P sea una interpolación de f se denomina **aproximación interpolatoria**.
- En general, las técnicas de integración suelen recibir el nombre de **fórmulas de cuadratura o reglas de cuadratura**.

Contenidos

Fórmulas de cuadratura simples

Polinomio de interpolación de Lagrange

- Se considera una función $f(x), x \in [a,b]$ y sea $P_n(x)$ su polinomio de interpolación de Lagrange en los nodos x_i, para $i = 0, \ldots, n$. La forma de Lagrange de dicho polinomio es:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

- Integrando dicha expresión:

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

siendo $a_i = \displaystyle\int_a^b \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\, dx$.

Fórmulas de cuadratura simples

Error de truncamiento

- El procedimiento de aproximación puede resumirse como

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

donde $\mathscr{E}$ representa el error teórico cometido al realizar la aproximación

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

y se denomina **error de truncamiento**.

Fórmulas de cuadratura simples

Estimación del error de Truncamiento

Si $f \in \mathscr{C}^{(n+1)}([a,b])$, entonces

$$f(x) = P_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

Integrando esta relación se obtiene:

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

Fórmulas de cuadratura simples

Regla del punto medio

Polinomio de grado 0 que interpola el punto medio $x_0 = \dfrac{a+b}{2}$. Denotando $h = b - a$ se obtiene:

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx h\, f\left(\frac{a+b}{2}\right)}$$

donde $\mathscr{E} = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi)$ para algún $\xi \in (a,b)$. O escrito en forma de acotación

$$|\mathscr{E}| \le M \frac{(b-a)^3}{24} \qquad M = \max_{t\in[a,b]} \{|f''(t)|\}$$

Fórmulas de cuadratura simples

Regla del trapecio

Polinomio de grado 1 que interpola los extremos del intervalo, $x_0 = a$ y $x_1 = b$. Denotando $h = b - a$ se obtiene:

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\left(f(a) + f(b)\right)}$$

siendo $\mathscr{E} = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)$ para algún $\xi \in (a,b)$. En forma de acotación se tendría que:

$$|\mathscr{E}| \le M \frac{(b-a)^3}{12} \qquad M = \max_{t\in[a,b]} \{|f''(t)|\}$$

Fórmulas de cuadratura simples

Regla de Simpson

Polinomio de grado 2 que interpola los extremos del intervalo y el punto medio: $x_0 = a$, $x_1 = \dfrac{a+b}{2}$ y $x_2 = b$. Denotando $h = \dfrac{b-a}{2}$ se obtiene:

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)}$$

$$\mathscr{E} = -\frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(iv)}(\xi) \qquad \xi \in (a,b)$$

O también:

$$|\mathscr{E}| \le M \frac{(b-a)^5}{2880} \qquad \text{siendo} \qquad M = \max_{t\in[a,b]} \{|f^{(iv)}(t)|\}$$

Fórmulas de cuadratura simples

Regla de Simpson tres-octavos

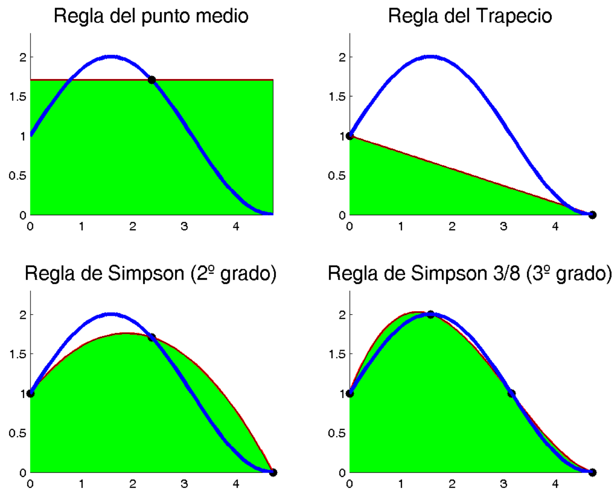
Polinomio de grado 3 que interpola los nodos $x_0 = a$, $x_1 = a + h$, $x_2 = a + 2h$ y $x_3 = b$, siendo $h = \dfrac{b-a}{3}$. Se obtiene:

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

siendo $\quad \mathscr{E} = -\dfrac{3}{80}\left(\dfrac{b-a}{3}\right)^5 f^{(iv)}(\xi) \quad$ para algún $\quad \xi \in (a,b)$.

Ejemplo 5.1

Calcula con la regla del trapecio y de Simpson la integral $\int_0^1 x^3\,dx$ *y halla una cota del error de truncamiento.*



Nota 5.1

¿Qué ocurre si aplicamos la fórmula de Simpson a un polinomio de grado menor o igual que 3?
La fórmula nos proporciona, teóricamente, la solución exacta de la integral ya que el error de truncamiento es nulo, pues la derivada cuarta de la función es nula.

Definición 5.1 (Grado de exactitud)

Se dice que una regla de cuadratura tiene ***grado de exactitud n*** *si calcula de forma exacta la integral de todo polinomio de grado menor o igual que n y no calcula de forma exacta la integral de algún polinomio de grado $n+1$.*

Nota 5.2

- *La fórmula del punto medio y del trapecio tienen* **grado de exactitud 1**.
- *La fórmula del Simpson y de Simpson tres-octavos tienen* **grado de exactitud 3**.

Nota 5.3

Las fórmulas que se han visto corresponden a casos particulares de una familia, llamadas **fórmulas de Newton-Cotes** *donde los nodos se cogen equiespaciados.*
Dentro de ellas hay dos subfamilias según utilicen los extremos del intervalo, fórmulas cerradas (Trapecio, Simpson) o no, fórmulas abiertas (Punto Medio).
Se puede comprobar que la precisión obtenida con una fórmula que utilice un número impar de nodos es la misma que con un nodo más.

Problema 5.1

Construye la fórmula de cuadratura interpolatoria basada en los valores de la función en los nodos $x_i = 0, 1, 3, 4$ en el intervalo $[0, 4]$.

Contenidos

Fórmulas de cuadratura compuestas

Motivación

Para reducir el error en el cálculo aproximado de una integral, en vez de aumentar el grado del polinomio de interpolación resulta generalmente más eficaz subdividir el intervalo de integración, aplicando en cada subintervalo reglas de cuadratura simples de bajo orden. Esta técnica da lugar a las llamadas *fórmulas de integración compuestas*.

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{a=x_0}^{x_1} f(x)\,dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n=b} f(x)\,dx$$

Sobre cada sumando se aplican fórmulas que utilicen pocos nodos (Trapecio, Simpson,...)

Fórmulas de cuadratura compuestas

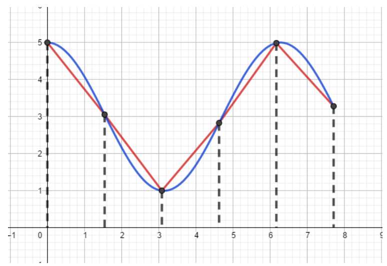


Figura: Trapecio Compuesta

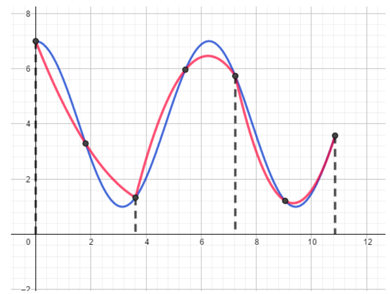


Figura: Simpson Compuesta

Fórmulas de cuadratura compuestas

Fórmula del trapecio compuesta

$$x_0 = a, \quad x_j = a + jh, \quad \text{para } j = 1, 2, \cdots, n, \quad h = \frac{b-a}{n}$$

Aplicando la fórmula del trapecio a cada intervalo $[x_j, x_{j+1}]$, se obtiene la fórmula:

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(b)\right]}$$

siendo $\mathscr{E} = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi)$ para algún $\xi \in (a,b)$.
El error de truncamiento de la fórmula puede acotarse del siguiente modo:

$$|\mathscr{E}| \leq (b-a)M\frac{h^2}{12} \qquad \text{siendo} \qquad M = \max_{t\in[a,b]} |f''(t)|$$

Fórmulas de cuadratura compuestas

Fórmula de Simpson compuesta

Notaciones:

$$x_0 = a, \quad x_j = x_0 + jh, \qquad \text{para} \qquad j = 0, 1, \cdots, n$$

$$n = 2m \qquad h = \frac{b-a}{2m}$$

Se considera la partición: $[x_0, x_2], [x_2, x_4], \ldots, [x_{2m-2}, x_{2m}]$ y los puntos medios de los mismos $x_1, x_3, \ldots, x_{2m-1}$.
La integral se descompone utilizando los puntos de subíndice par:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{a=x_0}^{x_2} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{2m-2}}^{x_{2m}=b} f(x)\,dx = \sum_{j=1}^{m} \int_{x_{2j-2}}^{x_{2j}} f(x)\,dx$$

Fórmula de Simpson compuesta

Aplicando sobre cada integral la fórmula de Simpson, se obtiene la fórmula de Simpson compuesta:

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

siendo $\mathscr{E} = -\frac{(b-a)h^4}{180}\, f^{(iv)}(\xi)$ para algún $\xi \in (a,b)$.
El error de truncamiento de la fórmula puede acotarse del siguiente modo:

$$|\mathscr{E}| \leq (b-a)M\frac{h^4}{180} \qquad \text{siendo} \qquad M = \max_{t\in[a,b]} |f^{(iv)}(t)|$$

Observación 5.3

Aumentando el número de puntos en la partición, se reduce el valor de h y por tanto la cota del error de truncamiento.

Problema 5.2

Determina los valores de n y h que aseguren una aproximación de $\int_0^2 \frac{1}{x+4}\,dx$ *con un error de truncamiento menor que* 10^{-5} *utilizando:*

1. *Regla del Trapecio Compuesta.*
2. *Regla de Simpson Compuesta. Calcula, en este caso, el valor aproximado de la integral.*

Problema 5.3

Calcula el error real cometido con las Reglas Compuestas del Trapecio y Simpson en el cálculo de la integral

$$\int_0^2 e^x - 3x^2\,dx = -1{,}6109439\ldots$$

utilizando el paso $h = 0{,}5$. *Halla una cota del error de truncamiento y compárala con el error real.*

Errores del ejercicio 5.3

En la siguiente tabla, se pueden ver los resultados de los errores del Ejercicio 5.3 para $h = 0{,}5, 0{,}25, 0{,}1, 0{,}05$ y $0{,}01$.

	Regla C. del Trapecio		**Regla C. de Simpson**	
h	**Error Real**	**Estim.**	**Error Real**	**Estim.**
0.5	1.1744599e-01	2.0833e-01	2.1540877e-03	5.131e-03
0.25	2.9258277e-02	5.2083e-02	1.3762649e-04	3.207e-04
0.1	4.6766737e-03	8.3333e-03	3.5452545e-06	8.21 e-06
0.05	1.1690021e-03	2.0833e-03	2.2177622e-07	5.131e-07
0.01	4.6757955e-05	8.3333e-05	3.5494319e-10	8.21 e-10