Diferenciación e integración numérica

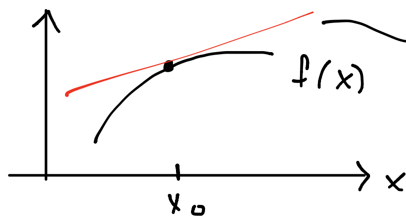
f es diferenciable en $x_0 \in (a,b)$ si $\lim_{x \to x_0} \frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}$ existe y escribimos

$$f'(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}$$

f es diferenciable en $[a,b]$ si es diferenciable en cada punto de $[a,b]$.

Comentarios

Si f es diferenciable en x_0 entonces $f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0)$.



$\underbrace{f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0)}_{\text{recta}}$

Problema: ¿Cómo aproximar f en un punto x_1?

Si f es diferenciable en x_0 y $f''(x_0)$ está acotada entonces

$$f(x_1) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0)$$

Lo anterior requiere de los valores: $x_0, x_1, f(x_0), f'(x_0)$ y esta aproximación tiene un error de orden 2.

pues su error es proporcional al cuadrado del ancho del intervalo:

$$h = x_1 - x_0$$

esto es, si reducimos a la mitad h entonces el error se reduce en una cuarta parte.

Otra aproximación a $f(x_1)$ sería $f(x_1) \approx f(x_0)$ lo cual sólo requiere del conocimiento de $f(x_0)$. Esta aproximación tiene un error de orden 1 pues éste es proporcional a h, esto es, al reducir a la mitad h se reduce a la mitad el error.

Estos errores los llamamos errores por truncamiento.

Utilizamos la notación "O grande" para escribir lo anterior:

$$f(x)-f(x_0)=\mathcal{O}(h) \quad \text{con la variable } h=x-x_0$$

$$f(x)-(f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0))=\mathcal{O}(h^2).$$

Notación: $\mathcal{C}([a,b])=\{$funciones continuas en el intervalo $[a,b]\}$

$\mathcal{C}^n([a,b])=\{$funciones con n derivadas contínuas en el intervalo $[a,b]\}$.

Teorema de Taylor

Sea $f\in\mathcal{C}^n([a,b])$, $f^{(n+1)}$ existe en $[a,b]$. Si $x_0\in[a,b]$ entonces $\forall x\in[a,b]$ se tiene: $f(x)=P_n(x)+R_n(x)$

donde: $$P_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{f^{(k)}(x_0)(x-x_0)^k}{k!} \quad (f^{(0)}=f)$$

$$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)(x-x_0)^{n+1}}{(n+1)!} \quad \text{con } \xi_x \text{ entre } x_0, x$$

Comentarios

*) El teorema de Taylor nos dice que cualquier función suave (función en $\mathcal{C}^n$) se le puede aproximar por un polinomio en el intervalo $[a,b]$, de hecho: $f(x)\approx P_n(x)$.

*) Es una generalización del teorema del valor medio de derivadas.

*) $P_n(x)$ se le llama polinomio de Taylor alrededor de x_0 de orden n y $R_n(x)$ es llamado residuo de Taylor " " " " " ".

b) ξ_x es un punto entre x_0, x desconocido y está en función de x

c) Una versión del teorema es considerar a la variable $h = x - x_0$ y entonces:

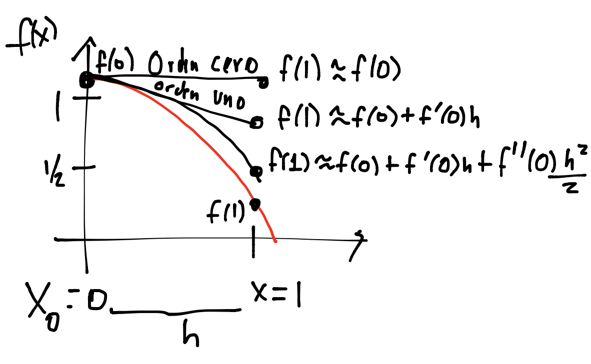
$$f(x) = f(x_0+h) = P_n(h) + R_n(h) = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_0)\, h^k}{k!} + \frac{f^{(n+1)}(\xi_h)\, h^{n+1}}{(n+1)!}$$

y escribimos: $R_n(h) = O(h^{n+1})$ .... ⊛

Ej. Aproximar $f(1)$ con polinomios de Taylor de orden 0, 1, 2, 3, 4 si
$f(x) = -0.1x^4 - 0.15x^3 - 0.5x^2 - 0.25x + 1.2$ centrando en 0
y calcular error absoluto de aproximación.

Sol $x_0 = 0$, $h = 1 - 0 = 1$, Valor a aproximar: $f(1) = 0.2$

Orden	Polinomio	Error absoluto
0	$P_0(h) = f(x_0) = f(0) = 1.2$	1
1	$P_1(h) = f(0) + f'(0)h =$	
2		
3		
4		



⊛ OJO: No confundir órdenes del polinomio con órdenes del error

Obs •) Si $f(x)$ es un polinomio de grado n entonces $R_n(x)$ es cero.

Ej. Sea $f(x) = \cos(x)$. Encuentra $P_n(h), R_n(h)$ con $n=2$, $x_0=0$
Aproxima $f(0.01)$ con $P_n(0.01)$ y acota el residuo usando doble precisión

Sol $h = x - x_0 = x - 0 = x$

$$P_2(h) = f(x_0) + f'(x_0)h + f''(x_0)\frac{h^2}{2}, \quad R_2(h) = f^{(3)}(\xi_x)\frac{h^3}{6}$$

con $\xi_x \in [x_0, x] = [0, x]$ ...

En nuestro problema del inicio: Aproximar f en x_1 con una recta requerimos de $x_0, x_1, f(x_0), f'(x_0)$.

Si desconocemos $f'(x_0)$ y suponemos que conocemos el valor de f en un punto $x+h$ ¿cómo aproximamos $f'(x_0)$?

Aproximación por diferencias finitas

•) Diferencias hacia delante

Sea $f \in C^1([a,b])$ y $f^{(2)}$ existe y está acotada $\forall x \in [a,b]$ entonces si $x+h \in [a,b]$ con $h > 0$:

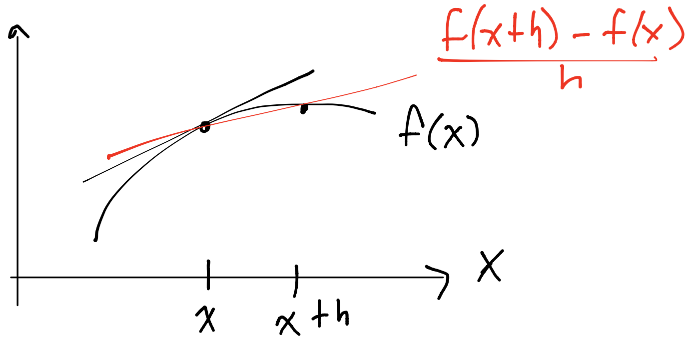
$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + f''(\xi_{x+h})\frac{h^2}{2} \quad \text{con } \xi_{x+h} \in [x, x+h]$$

$$= f(x) + f'(x)h + O(h^2)$$

$$\therefore \quad f'(x)h = f(x+h) - f(x) + O(h^2)$$

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

El cociente $\dfrac{f(x+h)-f(x)}{h}$ se llama aproximación por diferencias hacia delante con error de orden 1.



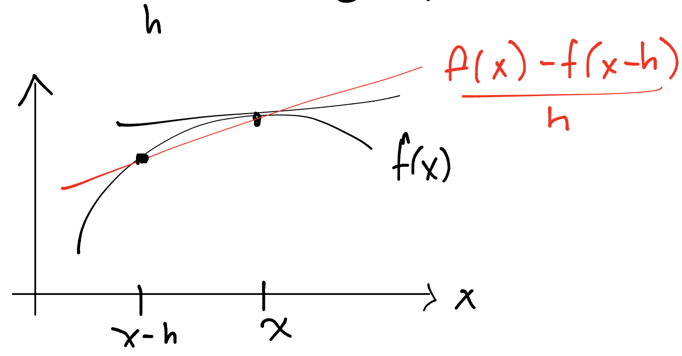
•) Diferencias hacia atrás

Sea $f \in C^1([a,b])$ y $f^{(2)}$ existe y está acotada $\forall x \in [a,b]$ entonces si $x-h \in [a,b]$ con $h>0$:

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + f''(\xi_{x-h})\frac{h^2}{2} \quad \text{con } \xi_{x-h} \in [x-h, x]$$

$$= f(x) - f'(x)h + O(h^2)$$

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



•) Diferencias centradas

Sea $f \in C^2([a,b])$, $f^{(3)}$ existe y está acotada $\forall x \in [a,b]$ entonces, si $x-h, x+h \in [a,b]$ con $h>0$:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + f^{(2)}(x)\frac{h^2}{2} + f^{(3)}(\xi_{x+h})\frac{h^3}{6} \quad \dots (1)$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + f^{(2)}(x)\frac{h^2}{2} - f^{(3)}(\xi_{x-h})\frac{h^3}{6} \quad \dots (2)$$

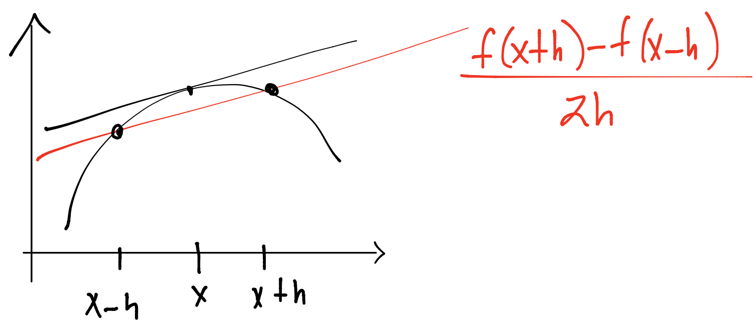
con $\xi_{x+h} \in [x, x+h]$, $\xi_{x-h} \in [x-h, x]$

(1) - (2): $$f(x+h) - f(x-h) = 2f'(x)h + \left(f^{(3)}(\xi_{x+h}) + f^{(3)}(\xi_{x-h})\right)\frac{h^3}{6}$$

$$= 2f'(x)h + \mathcal{O}(h^3)$$

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

El cociente $\dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$ se llama aproximación por diferencias centradas con error de orden 2.



Ej. Considera $f(x) = \ln(x)$, aproxima $f'(x)$ en $x = 1.8$ utilizando diferencias hacia delante, centradas para valores de $h = 0.1$, $h = 0.01$. Acota errores de aproximación y calcula errores relativos.

h	Aproximación	Cota para error	Error relativo

Análisis de error

Supongamos que $\tilde{f}(x)$ aproxima a $f(x)$ y $f(x) = \tilde{f}(x) + e_x$ con e_x error de redondeo al evaluar f en x. $\tilde{f}(x)$ es la aproximación en un SPFN.

Entonces en la aproximación por diferencias hacia delante:

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

Como $f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h)$ tenemos:

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

$$\therefore \left| f'(x) - \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h} \right| = \left| \frac{e_{x+h} - e_x}{h} + O(h) \right|$$

Observa que $\frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h}$ es la aproximación por diferencias hacia delante que se obtiene en la computadora, por lo que la cantidad $\left| f'(x) - \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h} \right|$ es el error absoluto de la aproximación por diferencias hacia delante. Si se cumple: $|e_{x+h} - e_x| < \varepsilon$ para algún $\varepsilon > 0$ entonces:

$$Err_A = \left| f'(x) - \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h} \right| = \left| \frac{e_{x+h} - e_x}{h} + O(h) \right| < \frac{\varepsilon}{h} + O(h)$$

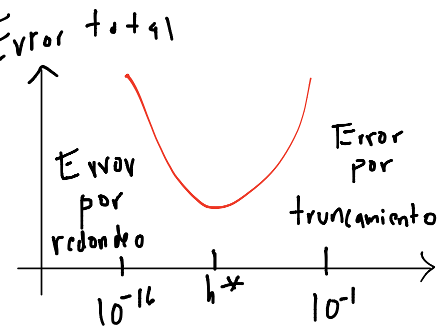
y de hecho $Err_A < \frac{\varepsilon}{h} + Ch$ con C constante

La componente $\frac{\varepsilon}{h}$ es el error por redondeo y Ch es la componente del error por truncamiento.

Si h tiende a cero $\frac{\varepsilon}{h}$ domina y Ch es cercano a cero.

Si $h \to \infty$ Ch domina y $\frac{\varepsilon}{h}$ " " " ".

Gráficamente:



h^* en diferencias hacia delante es del orden de 10^{-8}

Un análisis del error similar se aplica para diferencias hacia atrás y diferencias centradas, de hecho para diferencias centradas h^* es del orden de 10^{-6}.

Comentarios

*) Si el objetivo es disminuir el error de truncamiento para aproximar $f(x_1)$ (problema inicial) o $f'(x_0)$ (diferenciación numérica) añadir términos del teorema de Taylor y disminuir el ancho del intervalo, h, es la solución siempre que f cumpla con las hipótesis necesarias y el residuo sea posible de acotar.

Sin embargo como se observó en el análisis del error anterior, disminuir h genera errores por redondeo cada vez mayores, por lo que a un número fijo de términos del polinomio $P_n(x)$, se tendrá un valor de h, h^*, que realice un compromiso entre el error por redondeo y el de truncamiento.

Por otro lado, añadir términos a $P_n(x)$ implica mayor conocimiento y finalmente evaluaciones de la función f y de sus derivadas.

*) Con el teorema de Taylor es posible obtener aproximaciones a las derivadas de orden mayor, p. ej. para la segunda derivada:

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

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

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

En sus versiones hacia delante, hacia atrás y centradas respectivamente.

Para la versión centrada se tiene:

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

*) Observamos que el error por redondeo en los métodos por diferencias finitas es un <u>componente</u> del <u>error total</u> que se incrementa al disminuir el valor de h, por ejemplo, en diferencias hacia delante para aproximar $f'(x)$ si usamos una $h \approx 10^{-16}$ entonces la aproximación $\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$ tiene un error relativo <u>igual a 1</u> por la aritmética en un SPFN por ello, decimos que los métodos por diferencias finitas son <u>inestables numéricamente</u> respecto al redondeo.

Estabilidad de un método numérico y condición de un problema

¿A qué se debe la falta de precisión al resolver un problema?

- Errores en instrumentos de medición.
- Errores en datos.
- Métodos inestables.
- Problemas mal condicionados.

La estabilidad de un método se define respecto al problema en el que se utiliza.

Algunas características de un método estable:

- Variaciones "pequeñas" en los datos de entrada del método generan " " " la solución del problema.
- No amplifican errores de redondeo/truncamiento en los cálculos involucrados.
- Resuelven problemas "cercanos" para datos ligeramente modificados.

La condición de un problema tiene que ver con su comportamiento ante perturbaciones.

Para determinar si un problema es bien/mal condicionado se define su número de condición.

Un problema se llama bien condicionado si cambios en los datos de entrada producen cambios razonables en los datos de salida o bien llamamos problemas bien condicionados a los que su número de condición es cercano a 1.

Para definir el número de condición del problema:

Evaluar la función real f en $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$

Consideremos una perturbación $\hat{x} = x + h$ entonces:

$$\text{Cond}_f = \frac{\text{ErrR}(f(\hat{x}))}{\text{ErrR}(\hat{x})} = \frac{\left| \frac{f(\hat{x}) - f(x)}{f(x)} \right|}{\left| \frac{\hat{x} - x}{x} \right|}$$

como $f(\hat{x}) - f(x) = f(x+h) - f(x) \simeq f'(x)h$ (si $f'(x)$ existe)

$$\therefore \text{Cond}_f \approx \left| \frac{f'(x)x}{f(x)} \right|$$

Comentario:

*) El cociente de errores relativos nos da una proporción entre los cambios del problema f ante cambios en los datos de entrada x por lo que si h es cercana a cero, el cociente será cercano a uno sólo si el problema f es bien condicionado.

Ej. Calcular el número de condición de los siguientes problemas:

1) Sea $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ realizar la operación $\left(\frac{1}{2}\right) x$.

$$\text{Cond}_f \approx \left| x \frac{f'(x)}{f(x)} \right| = \left| x \frac{1/2}{1/2\, x} \right| = 1 \quad \therefore \text{Bien condicionado}$$

2) Sea $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ calcular $\sqrt{x}$.

3) Calcular $\cos(x)$ si $x \approx \frac{\pi}{2}$. 4) Calcular e^x si $x \in \mathbb{R}$.

Aún realizando operaciones con aritmética exacta o utilizando métodos estables podemos tener una alta sensibilidad en la solución de un problema ante perturbaciones en los datos de entrada pues la buena o mala condición es inherente al problema en cuestión.

La exactitud de una aproximación obtenida por un método depende de la estabilidad del método y la condición del problema en el que se aplica el método:

Exactitud = Estabilidad + Problema bien condicionado.

Integración numérica

En lo siguiente consideramos f función contínua y suave en el intervalo $[a,b]$ tal que $\int_a^b f(x)\,dx$ esté bien definida.

Problema:

Si sólo conocemos el valor de f en un conjunto finito de puntos, o bien, se conoce explícitamente $f(x)$ pero tiene una forma complicada o f no tiene una primitiva ¿Cómo calcular $\int_a^b f(x)\,dx$?

Métodos por cuadratura

Se les llama métodos por cuadratura a los métodos que nos ayudan a aproximar integrales numéricamente. Veremos métodos que realizan una aproximación de la forma:

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

donde: $\{w_0, w_1, \ldots, w_n\}$ es un conjunto de ponderaciones o pesos con $w_i \in \mathbb{R}$ $\forall i=0,\ldots,n$ y $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ se le llama conjunto de nodos con $x_i \in [a,b]$ $\forall i=0,1,\ldots,n$ y $f(x_i)$

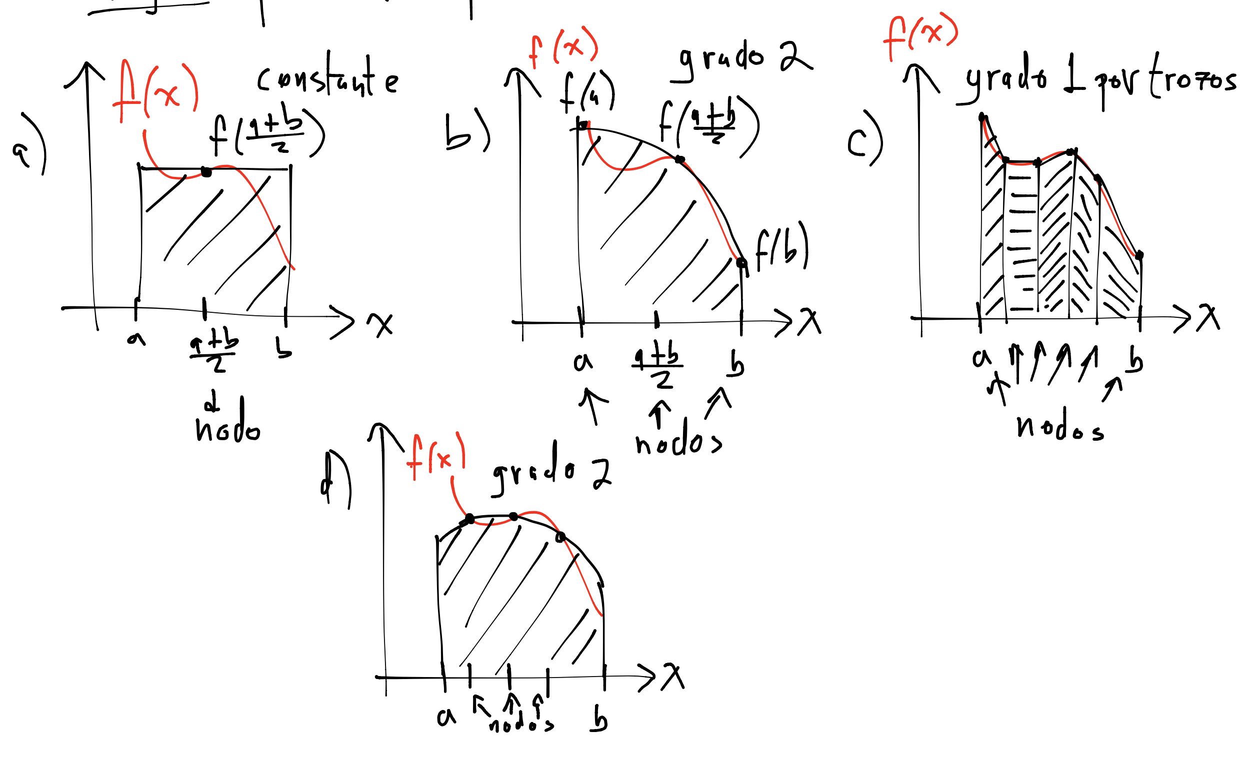
$\forall i=0,1,\ldots,n$ es conocido.

El método por cuadratura adquiere su nombre de acuerdo a la situación espacial de los nodos.

Comentarios

*) Si el conjunto de nodos cumple $x_{i+1}-x_i = c$ $\forall i=0,1,\ldots,n-1$ con $c \in \mathbb{R}$ constante y aproximamos f con un polinomio en $(x_i, f(x_i))$ $\forall i=0,1,\ldots,n$ entonces a los métodos por cuadratura <u>se les llama</u> métodos por Newton-Cotes (o reglas o fórmulas por Newton-Cotes).

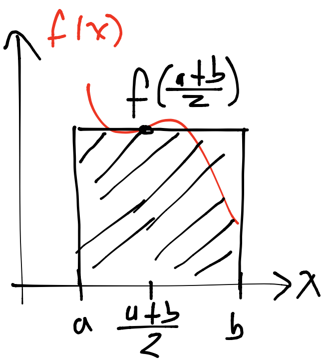
Ej. Aproximación por:



*) Si la fórmula por Newton Cotes involucra el valor de la función en los extremos se le llama forma cerrada si no los involucra se les llama abierta. En el ejemplo anterior, el inciso d) es una forma abierta.

Reglas de Newton - Cotes

Regla del rectángulo "$R(f)$". Aproximamos $f(x)$ por un polinomio de grado cero con nodo en $x_1 = \frac{a+b}{2}$. Entonces:



$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b f(x_1)\,dx = (b-a)\, f\left(\frac{a+b}{2}\right) = h f(x_1)$$

con $h = b-a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$

Para el error de $R(f) = h f(x_1)$ usamos el teorema de Taylor centrando en x_1

Suponemos $f \in C^1([a,b])$, $f^{(2)}$ existe y es acotada $\forall x \in [a,b]$ entonces

$$f(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x-x_1) + f^{(2)}(\xi_x)\frac{(x-x_1)^2}{2} \quad \text{con } \xi_x \in [a,b]$$

$$\therefore \int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b f(x_1) + f'(x_1)(x-x_1) + f^{(2)}(\xi_x)\frac{(x-x_1)^2}{2}\,dx$$

$$= f(x_1)x + f'(x_1)\frac{(x-x_1)^2}{2} + f^{(2)}(\xi_x)\frac{(x-x_1)^3}{6}\Big|_a^b$$

$$= f(x_1)h + \frac{f'(x_1)}{2}\left[\left(\frac{h}{2}\right)^2 - \left(\frac{-h}{2}\right)^2\right] + \frac{f^{(2)}(\xi_x)}{6}\left[\left(\frac{h}{2}\right)^3 - \left(-\frac{h}{2}\right)^3\right]$$

$$= f(x_1)h + \frac{f^{(2)}(\xi_x)h^3}{24} = R(f) + \mathrm{Err}\,R(f) = R(f) + O(h^3)$$

Comentario 4) La regla del rectángulo es exacta para polinomios de grado 1 pues $Err\,R(f)$ involucra una segunda derivada.

Regla del Trapecio "$T(f)$". Aproximamos $f(x)$ por un polinomio de grado 1 con nodos en $x_0=a$, $x_2=b$:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b \frac{f(x_2)-f(x_0)}{x_2-x_0}(x-x_0)+f(x_0)\,dx$$

$$= \frac{f(x_2)-f(x_0)}{h}\frac{(x-x_0)^2}{2}+f(x_0)x\Big|_a^b$$

donde: $h=b-a$

$x_0=a$

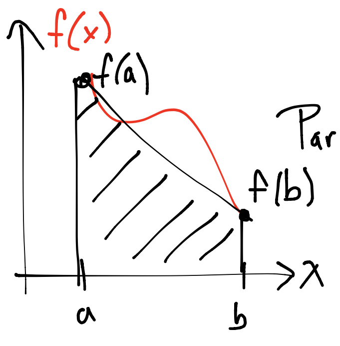
$x_1=\frac{a+b}{2}$

$x_2=b$

$$=\frac{1}{2}\left[\frac{f(x_2)-f(x_0)}{h}\right]h^2+f(x_0)h$$

$$=h\left[\frac{1}{2}\left(f(x_2)-f(x_0)\right)+f(x_0)\right]$$

$$=\frac{h}{2}\left[f(x_2)-f(x_0)+2f(x_0)\right]=\frac{h}{2}\left[f(x_2)+f(x_0)\right]$$



Para el error de $T(f)=\frac{h}{2}\left[f(x_2)+f(x_0)\right]$ usamos el teorema de Taylor centrando en x_1

Suponemos $f\in C^1([a,b])$, $f^{(2)}$ existe y es acotada $\forall x\in[a,b]$ entonces

$$f(x_0) = f(x_1) + f'(x_1)(x_0 - x_1) + f''(\xi_{x_0})\frac{(x_0-x_1)^2}{2} \text{ con } \xi_{x_0} \in [x_0, x_1]$$

$$= f(x_1) - f'(x_1)\frac{h}{2} + f''(\xi_{x_0})\frac{h^2}{8} \quad \ldots\ldots \text{ (1)}$$

usando el hecho: $x_1 - x_0 = \frac{h}{2}$

$$f(x_2) = f(x_1) + f'(x_1)\frac{h}{2} + f''(\xi_{x_1})\frac{h^2}{8} \quad \ldots\ldots \text{ (2)}$$

con $\xi_{x_1} \in [x_1, x_2]$ y usando: $x_2 - x_1 = \frac{h}{2}$

Sumando (1), (2) y dividiendo por 2 la suma:

$$\frac{f(x_0)+f(x_2)}{2} = f(x_1) + \frac{1}{2}\left[f^{(2)}(\xi_{x_0}) + f^{(2)}(\xi_{x_1})\right]\frac{h^2}{8}$$

Multiplicando por h:

$$T(f) = h f(x_1) + \frac{1}{2}\left[f^{(2)}(\xi_{x_0}) + f^{(2)}(\xi_{x_1})\right]\frac{h^3}{8}$$

$$\therefore\ h f(x_1) = T(f) - \frac{1}{2}\left[f^{(2)}(\xi_{x_0}) + f^{(2)}(\xi_{x_1})\right]\frac{h^3}{8}$$

Como $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx = R(f) + O(h^3) = h f(x_1) + \frac{f^{(2)}(\xi_x) h^3}{24}$

con $\xi_x \in [x_0, x_2]$

se tiene:

$$\int_a^b f(x)\,dx = T(f) - \frac{1}{2}\left[f^{(2)}(\xi_{x_0}) + f^{(2)}(\xi_{x_1})\right]\frac{h^3}{8} + f^{(2)}(\xi_x)\frac{h^3}{24}$$

Se prueba (Tarea) que:

$$\int_a^b f(x)dx = T(f) - f^{(2)}(\xi)\frac{h^3}{12} \quad \text{con } \xi \in [a,b]$$

Comentarios

*) La regla del Trapecio es exacta para polinomios de grado 1 pues $Err\,T(f)$ involucra una segunda derivada.

*) Como $\int_a^b f(x)dx = R(f) + Err\,R(f) = T(f) + Err\,T(f)$

y $Err\,T(f) \approx -2Err\,R(f)$ entonces

$$\int_a^b f(x)dx = R(f) + Err\,R(f) \approx T(f) - 2Err\,R(f)$$

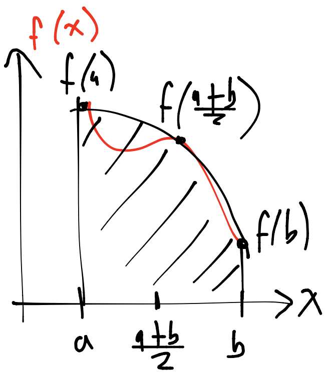
$$\therefore \; Err\,R(f) \approx \frac{T(f) - R(f)}{3}.$$

Ej Aproximar las siguientes integrales por $R(f)$, $T(f)$ y calcular errores relativos

a) $\int_0^{0.8} 0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5 \, dx \approx 1.640533$

b) $\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx 0.746824$

Regla de Simpson Aproximamos $f(x)$ por un polinomio de grado 2 considerando $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $x_2 = b$ como nodos



En la tarea se determinará $S(f)$ y $Err\, S(f)$:

$$S(f) = \frac{h}{6}\left[f(x_2) + f(x_0) + 4f(x_1)\right]$$

$$Err\, S(f) = -\frac{1}{2880} f^{(4)}(\xi)\, h^5 \quad , \xi \in [a,b]$$

En lo anterior $f \in C^3([a,b])$, $f^{(4)}$ existe y es acotada en $[a,b]$ y $h = b-a$

Comentarios

*) La regla de Simpson es exacta para polinomios de grado 3 pues $Err\, S(f)$ involucra una cuarta derivada

*) Definimos la precisión de las reglas por Newton-Cotes como sigue:

La regla por cuadratura tiene precisión $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ si es exacta para polinomios de grado n y no para polinomios de grado $n+1$

Ej: $R(f)$ tiene precisión 1
$T(f)$ " " 1
$S(f)$ " " 3

Reglas compuestas

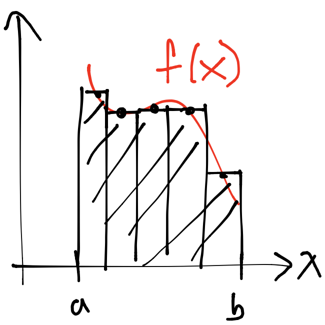
Dividimos el intervalo $[a,b]$ en n subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$ $i = 1, \ldots, n$ con $x_0 = a < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$ y una partición regular, es decir:

$$x_i - x_{i-1} = \tilde{h} \quad \text{con} \quad \tilde{h} = \frac{h}{n} \quad y \quad h = b-a.$$

Utilizamos: $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx$.

Regla compuesta del Rectángulo "$R_c(f)$"

En cada subintervalo aplicamos $R(f)$, es decir:



$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx \approx R_i(f) \quad \forall i=1,\dots,n$$

con $\displaystyle Err\, R_i(f) = \frac{f^{(2)}(\xi_i)}{24}\tilde{h}^3$, $\xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$

Entonces la regla compuesta del rectángulo es:

$$R_c(f) = \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1}) f\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right) = \frac{h}{n} \sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right) = \frac{h}{n} \sum_{i=1}^{n} f\left(x_{i-1} + \frac{x_i - x_{i-1}}{2}\right)$$

Para el error de $R_c(f)$:

$$Err\, R_c(f) = \sum_{i=1}^{n} Err\, R_i(f) = \sum_{i=1}^{n} \mathcal{O}(\tilde{h}^3) = \sum_{i=1}^{n} \mathcal{O}\left(\left(\frac{h}{n}\right)^3\right)$$

La suma de los errores de los intervalos puede escribirse como $C_1 f''(\xi_r)$ con C_1 constante, $\xi_r \in [a,b]$ suponiendo $f \in C^2([a,b])$ y usando el teorema del valor intermedio.

$$= n\,\mathcal{O}\left(\left(\frac{h}{n}\right)^3\right) = \mathcal{O}\left(n\frac{h^3}{n^3}\right)$$

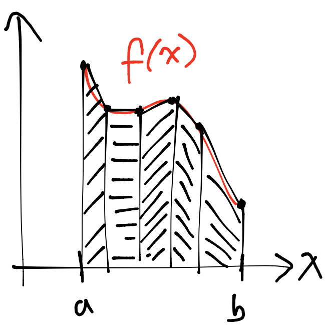
$$= \mathcal{O}\left(h \cdot \frac{h^2}{n^2}\right) = \mathcal{O}\left(\left(\frac{h}{n}\right)^2\right) = \mathcal{O}(\tilde{h}^2)$$

$$\therefore\ Err\, R_c(f) = \mathcal{O}(\tilde{h}^2)$$

De hecho: $\displaystyle Err\, R_c(f) = \frac{(b-a)}{6} f''(\xi_r)\tilde{h}^2$, $\xi_r \in [a,b]$.

Regla compuesta del Trapecio "$T_c(f)$"

En cada subintervalo aplicamos $T(f)$, es decir:



$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx \approx T_i(f) \quad \forall i=1,\dots,n$$

con $\operatorname{Err} T_i(f) = -f^{(2)}(\xi_i)\dfrac{\tilde{h}^3}{12}$, $\xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$

Entonces la regla compuesta del trapecio es:

$$T_c(f) = \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i - x_{i-1})}{2}\left[f(x_i) + f(x_{i-1})\right]$$

$$= \frac{h}{2n}\left[f(x_0) + f(x_n) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right]$$

Para el error de $T_c(f)$:

$$\operatorname{Err} T_c(f) = \sum_{i=1}^{n} \operatorname{Err} T_i(f) = \sum_{i=1}^{n} \mathcal{O}(\tilde{h}^3) = \sum_{i=1}^{n} \mathcal{O}\left(\left(\frac{h}{n}\right)^3\right)$$

$$= n\,\mathcal{O}\left(\left(\frac{h}{n}\right)^3\right) = \mathcal{O}\left(n\frac{h^3}{n^3}\right) = \mathcal{O}\left(h \cdot \frac{h^2}{n^2}\right) = \mathcal{O}\left(\left(\frac{h}{n}\right)^2\right)$$

Misma observación que en $R_c(f)$

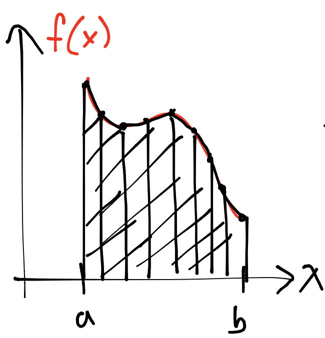
$$= \mathcal{O}(\tilde{h}^2)$$

$$\therefore \operatorname{Err} T_c(f) = \mathcal{O}(\tilde{h}^2)$$

De hecho: $\text{Err}\, T_c(f) = -\dfrac{(b-a)}{12} f''(\xi_T)\tilde{h}^2$, $\xi_T \in [a,b]$.

Regla compuesta de Simpson "$S_c(f)$"

En cada subintervalo aplicamos $S(f)$, es decir:



$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx \simeq S_i(f) \quad \forall i = 1, \dots, n \text{ con } n \text{ par}$$

con $\text{Err}\, S_i(f) = -\dfrac{1}{2880} f^{(4)}(\xi_i)\tilde{h}^5$

$\xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$

Entonces la regla compuesta de Simpson es:

$$S_c(f) = \sum_{i=1}^{n/2} \frac{(x_{2i}-x_{2i-2})}{6}\left[f(x_{2i}) + f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1})\right]$$

$$= \frac{h}{3n}\left[f(x_0) + f(x_n) + 2\sum_{i=1}^{\frac{n}{2}-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} f(x_{2i-1})\right]$$

Para el error de $S_c(f)$:

$$\text{Err}\, S_c(f) = \sum_{i=1}^{n/2} \text{Err}\, S_i(f) = \sum_{i=1}^{n/2} \mathcal{O}(\tilde{h}^5) = \sum_{i=1}^{n/2} \mathcal{O}\left(\left(\frac{h}{n}\right)^5\right)$$

$$= \frac{n}{2}\mathcal{O}\left(\left(\frac{h}{n}\right)^5\right)$$

suponiendo $f \in C^4([a,b])$ $\exists\, \xi_s \in [a,b]$ que ayuda a escribir la suma de errores como $C f^{(4)}(\xi_s)$ con C constante.

$$= \mathcal{O}\left(\frac{n}{2}\frac{h^5}{n^5}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{h}{2}\cdot\frac{h^4}{n^4}\right) = \mathcal{O}\left(\left(\frac{h}{n}\right)^4\right) = \mathcal{O}(\tilde{h}^4)$$

$$\therefore \operatorname{Err} S_c(f) = \mathcal{O}(\tilde{h}^4).$$

De hecho, $\operatorname{Err} S_c(f) = \frac{-(b-a)}{180} f^{(4)}(\xi_s)\tilde{h}^4, \ \xi_s \in [a,b].$

Ej. 1) Encuentra valores de n que aseguran un error de aproximación menor que 2×10^{-5} al usar: a) $T_c(F)$ b) $S_c(f)$ para aproximar

$$\int_0^{\pi} \operatorname{sen}(x)\,dx.$$

2) ¿La regla $R_c(f)$ es estable respecto al error por redondeo?

Supongamos que $\tilde{f}(x)$ aproxima a $f(x)$ y $f(x) = \tilde{f}(x) + e_x$ con e_x error de redondeo al evaluar f en x. $\tilde{f}(x)$ es la aproximación en un SPFN

Entonces:

$$\operatorname{Err} A = \left|\int_a^b f(x)\,dx - R_c(\tilde{f})\right| = \left|R_c(f) + \operatorname{Err} R_c(f) - R_c(\tilde{f})\right|$$

$$\leq \left|\operatorname{Err} R_c(f)\right| + \left|R_c(f) - R_c(\tilde{f})\right|$$

$$= \mathcal{O}(\tilde{h}^2) + \left|\sum_{i=1}^{n}\frac{h}{n} f\left(\frac{x_i+x_{i-1}}{2}\right) - \sum_{i=1}^{n}\frac{h}{n}\tilde{f}\left(\frac{x_i+x_{i-1}}{2}\right)\right|$$

$$= G\tilde{h}^2 + \left|\sum_{i=1}^{n}\frac{h}{n}\left[f\left(\frac{x_i+x_{i-1}}{2}\right) - \tilde{f}\left(\frac{x_i+x_{i-1}}{2}\right)\right]\right|$$

G constante

$$= C\left(\frac{h}{n}\right)^2 + \left|\frac{h}{n}\sum_{i=1}^{n} e_{x_i}\right| \leq C\left(\frac{h}{n}\right)^2 + \frac{h}{n}\sum_{i=1}^{n} |e_{x_i}|$$

Si se cumple $\forall i=1,\dots,n$ $|e_{x_i}| < \varepsilon$ para alguna $\varepsilon > 0$, entonces:

$$\text{Error} \leq C\left(\frac{h}{n}\right)^2 + \frac{h}{n} n \varepsilon = C\left(\frac{h}{n}\right)^2 + h\varepsilon$$

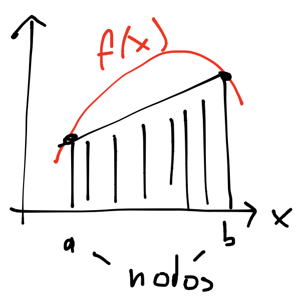
$\therefore$ Al incrementar n (aumentar el número de subintervalos):

La componente $C\left(\frac{h}{n}\right)^2$ (error por truncamiento) tiende a cero

y la " $h\varepsilon$ (" " redondeo) es fija.

Cuadratura Gaussiana

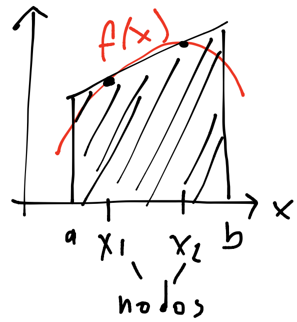
En las reglas por Newton-Cotes los nodos son fijos o predeterminados pues deben ser equidistantes, situación que en casos como:



$$T(f) = \frac{(b-a)}{2}(f(a)+f(b))$$

con una aplicación de $T(f)$ se tiene un error grande.

Si eliminamos la restricción de puntos fijos y queremos aproximar el área de $f(x)$ con una recta de modo que disminuya el error, una elección de los nodos sería:



Observa que esta elección de nodos implica un conocimiento de f en x_1, x_2 es decir, de $f(x_1), f(x_2)$.

En los casos en los que se conozca explícitamente $f(x)$ una regla por cuadratura que tiene mayor precisión con menor número de evaluaciones de la función que las reglas por Newton-Cotes es la cuadratura Gaussiana.

Utilizamos el <u>método de coeficientes indeterminados</u> para las reglas por cuadratura Gaussiana.

<u>Ej.</u> Encontrar $T(f)$ por el método de coeficientes indeterminados.

<u>Sol</u> Sean w_0, w_1 constantes a determinar tales que:

$$w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) = \int_a^b f(x)dx \quad \text{con } x_0 = a, x_1 = b$$

Err $T(f)$ involucra una 2ª derivada, de modo que $T(f)$ da resultados exactos para funciones constantes y lineales.

$$\therefore \quad w_0 + w_1 = \int_a^b 1\,dx = b - a \quad \dots \text{①}$$

$$w_0 x_0 + w_1 x_1 = \int_a^b x\,dx = \frac{b^2 - a^2}{2} \longrightarrow w_0 a + w_1 b = \frac{b^2 - a^2}{2} \dots \text{②}$$

Entonces: $w_0 =$

$w_1 =$

La regla por cuadratura gaussiana para 2 nodos "$CG_2(f)$" involucra plantear una ecuación de la forma:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1)$$

con w_0, w_1 los coeficientes a determinar y x_0, x_1 nodos.

Buscamos que la regla tenga precisión 3, es decir, integre de manera exacta polinomios de grado 3

$\therefore$ Se debe cumplir:

$$w_0 + w_1 = \int_{-1}^{1} 1\,dx = 2 \quad \ldots (1)$$

$$w_0 x_0 + w_1 x_1 = \int_{-1}^{1} x\,dx = 0 \quad \ldots (2)$$

$$w_0 x_0^2 + w_1 x_1^2 = \int_{-1}^{1} x^2\,dx = \frac{2}{3} \quad \ldots (3)$$

$$w_0 x_0^3 + w_1 x_1^3 = \int_{-1}^{1} x^3\,dx = 0 \quad \ldots (4)$$

4 incógnitas con 4 ecuaciones, solución: $w_0 = w_1 = 1$, $x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$, $x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

$$\therefore CG_2(f) = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

Comentario

*) Se eligo el intervalo $[-1,1]$ por simplicidad. Si se tiene una integral en el intervalo $[a,b]$ se utiliza un cambio de variable para llevarlo al intervalo $[-1,1]$:

Sea $t \in [a,b]$ entonces $0 \leq t-a \leq b-a$

$$0 \leq \frac{t-a}{b-a} \leq 1$$

$$0 \leq \frac{2(t-a)}{b-a} \leq 2$$

$$-1 \leq \frac{2(t-a)}{b-a} - 1 \leq 1$$

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

entonces: $t = g^{-1}(x) = \frac{1}{2}\left[(b-a)x+a+b\right]$, $\left|\frac{dg^{-1}(x)}{dx}\right| = \frac{b-a}{2}$

$$\therefore \int_a^b f(t)\,dt = \int_{g(a)}^{g(b)} (f\circ g^{-1})(x) \left|\frac{dg^{-1}(x)}{dx}\right| dx$$

$$= \int_{-1}^{1} f\left(\frac{1}{2}\left[(b-a)x+a+b\right]\right)\frac{(b-a)}{2}\,dx$$

Ej. Aproximar $\int_0^1 e^{-t^2}dt$ con $CG_2(f)$.

Comentario

*) Con n nodos y n constantes $CG_n(f)$ tiene precisión $2n-1$.