Integración numérica

Algunas reglas básicas

Berenice Becerra O.

01/12/2008

Trabajo para la materia de Análisis Numérico donde se describe brevemente algunas reglas básicas de la integración numérica y algunos casos particulares. Algunos de los cálculos se corroboran con Mathematica

CONTENIDO

INTEGRACIÓN NUMÉRICA: ALGUNAS REGLAS BÁSICAS

INTRODUCCIÓN

El problema de la integración numérica o cuadratura numérica es estimar el número

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx$$

Este problema surge cuando este número no se puede calcularse de manera exacta o cuando $f(x)$ es vista como un número finita de puntos

Ahora bien asumiendo que $f(x)$ es k veces diferenciable y suave en el intervalo algún $[c, d]$ que contiene al intervalo $[a, b]$ entonces $f(x)$ puede verse como

$$f(x) \stackrel{1}{=} p_k(x) + f[x_0, \dots, x_k, x]\psi_k(x)$$

(1) $\quad p_k(x) = \sum_{i=0}^{k} f[x_0, \dots, x_k] \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j)$; este es un polinomio que interpola a $f(x)$en $k + 1$ puntos

y de grado menor igual a k y $\psi_k(x) = \prod_{j=0}^{k}(x - x_j)$ con $x_0, \dots, x_k$ en el intervalo $[c, d]$ y $f[x_0, \dots, x_k, x]$ continua e integrable como función de x en (c, d)y en particular lo es en (a, b) .

Se estimara $I(f)$ por medio de $I(p_k)$. Entonces el error estimado esta dado por

$$E(f) = I(f) - I(p_k) = \int_a^b f[x_0, \dots, x_k, x\,]\psi_k(x)dx$$

Si $\psi_k(x)$ es no-negativa o no-positiva integrable en $[a, b]$ por el teorema del valor medio para integrales se tiene que

$$E(f) = \int_a^b f[x_0, \dots, x_k, x\,]\psi_k(x)dx = f[x_0, \dots, x_k, \xi] \int_a^b \psi_k(x)dx \text{ para algún } \xi \in (a, b)$$

Si además $f(x)$ es $k + 1$ diferenciable en (c, d) se tiene que

$$E(f) = \frac{1}{(k + 1)!} f^{(k+1)}(\eta) \int_a^b \psi_k(x)dx \quad \text{para algún } \eta \in (c, d) \qquad (ec. 1)$$

Si $\psi_k(x)$ no es necesariamente no-positiva o no-negativa y si además ocurre que $\int_a^b \psi_k(x)dx = 0$ y $f(x)$ es diferenciable $k + 2$ veces entonces

$$E(f) = \frac{1}{(k + 2)!} f^{(k+2)}(\eta) \int_a^b \psi_{k+1}(x)dx \quad \text{para algún } \eta \in (c, d) \qquad (ec. 2)$$

ALGUNOS CASOS PARTICULARES

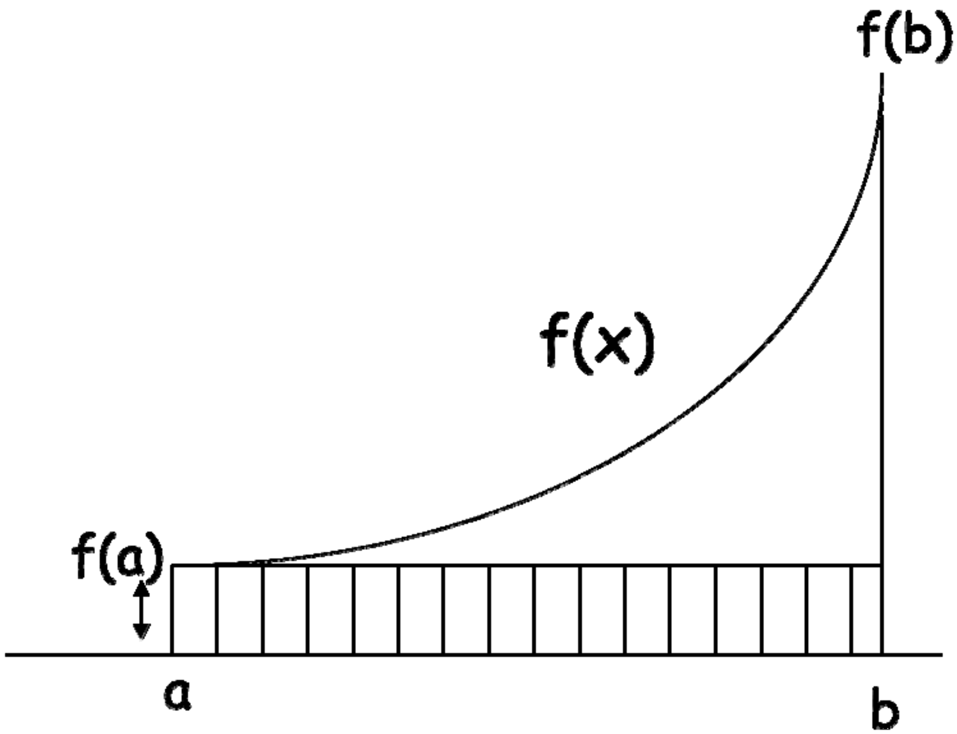
REGLA DEL RECTÁNGULO

Si se considera $k = 0$. Entonces $f(x) = f(x_0) + f[x_0, x](x - x_0)$

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_0(x)dx \quad \text{y} \quad p_0(x) = f[x_0] = f(x_0) \Rightarrow \int_a^b p_0(x)dx = \int_a^b f(x_0)\, dx = f(x_0)(b-a)$$

y si $x_0 = a$ entonces

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_0(x)dx = f(a)(b-a)$$



en este caso $\psi_0(x) = x - a$ y es no-positiva o no-negativa en (a, b) por lo que el error esta dado por

$$E(f) \overset{2}{=} f'(\eta) \int_a^b (x-a)dx \quad = \frac{f'(\eta)(b-a)^2}{2}$$

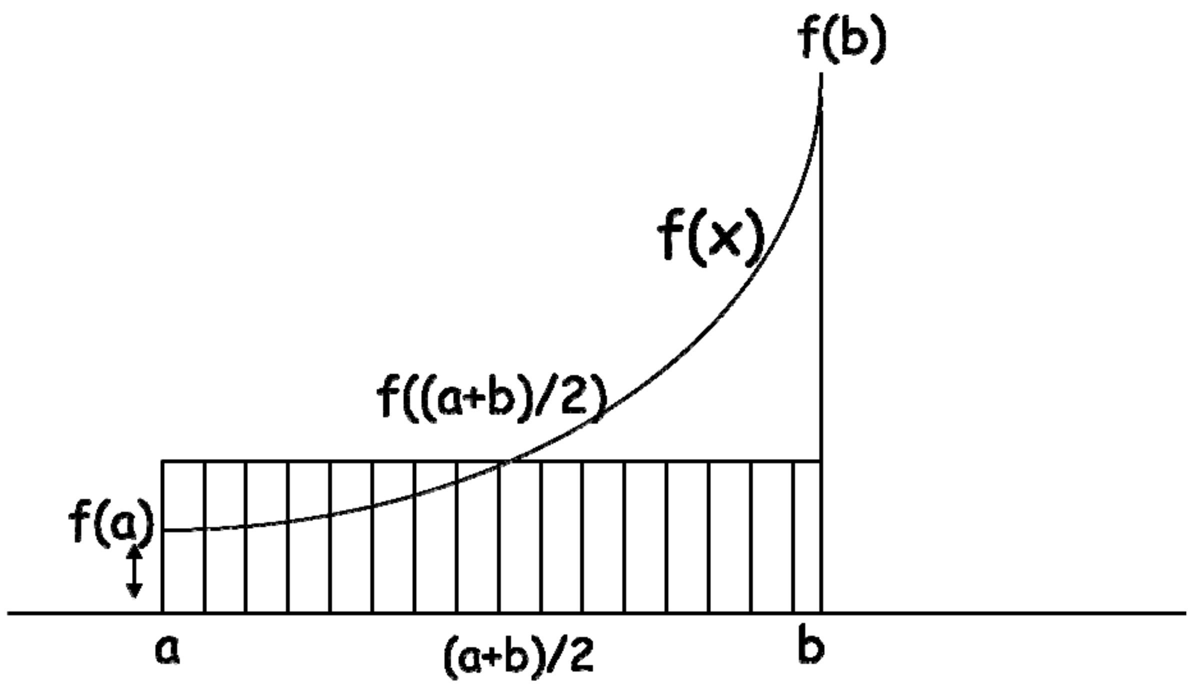
en (2) por ec. 1

Si se considera $k = 0$. Entonces $f(x) = f(x_0) + f[x_0, x](x - x_0)$

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_0(x)dx \quad \text{y} \quad p_0(x) = f[x_0] = f(x_0) \;\Rightarrow \int_a^b p_0(x)dx = \int_a^b f(x_0)\,dx = f(x_0)(b-a)$$

y si $x_0 = \frac{a+b}{2}$ entonces

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_0(x)dx = f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a)$$



en este caso $\psi_0(x) = x - \frac{a+b}{2}$ y además

$$\int_a^b \psi_k(x)dx = \int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)dx = 0$$

entonces haciendo $x_0 = x_1$ por ec. 2 se tiene que

$$E(f) = \frac{f''(\eta)}{2!}\int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 dx \quad = \frac{f''(\eta)(b-a)^3}{24}$$

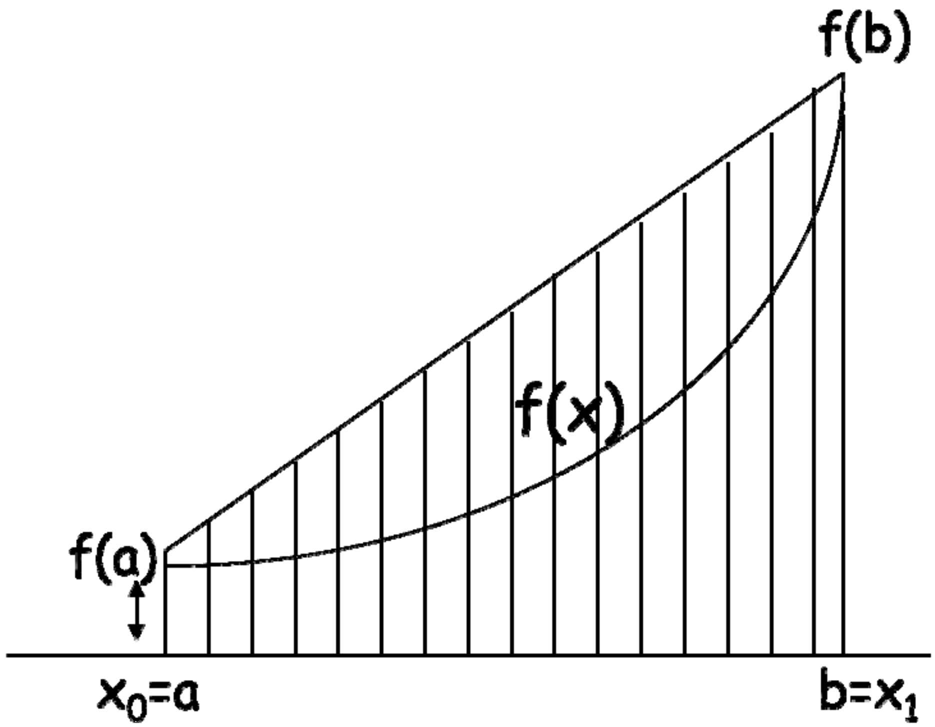
Nótese que $\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2$ es no-negativa en todo $\mathbb{R}$ y en particular en (a, b)

Si se considera $k = 1$. Entonces $f(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x](x - x_0)(x - x_1)$

Si $x_0 = a$ y $x_1 = b$

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_1(x)dx \quad \text{y} \quad p_1(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0)$$

entonces $\displaystyle\int_a^b p_1(x)dx = \int_a^b \left(f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a)\right) dx = \frac{b - a}{2}(f(a) + f(b))$



en este caso $\psi_1(x) = (x - a)(x - b)$ y además

$$\int_a^b \psi_1(x)dx = \int_a^b (x - a)(x - b)\, dx = \frac{1}{6}(a - b)^3$$

entonces por ec. 1 se tiene que

$$E(f) = \frac{f''(\eta)}{2!}\int_a^b \psi_1(x)dx = \left(\frac{f''(\eta)}{2}\right)\left(\frac{1}{6}(a - b)^3\right) = \frac{f''(\eta)}{12}(a - b)^3$$

Si se considera $k = 2$. Entonces

$$f(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + f[x_0, x_1, x_2, x](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$$

Para distintos valores de $x_0,\ x_1,\ x_2$ en (a, b) se tiene que $\psi_2(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$ no es necesariamente no-positiva o no-negativa pero si $x_0 = a \quad x_1 = \frac{a+b}{2} \quad x_2 = b$ entonces

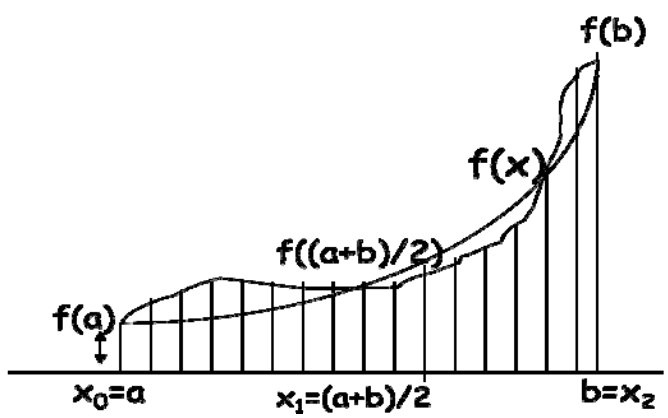
$$\int_a^b \psi_2(x)dx = \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)dx = 0$$

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_2(x)dx \quad \text{y} \quad p_2(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)$$

entonces $\displaystyle\int_a^b p_2(x)dx = \int_a^b \left(f(a) + f[x_0, x_1](x - a) + f[x_0, x_1, x_2](x - a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)\right) dx$

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

con $\displaystyle f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + \frac{f(x_1)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + \frac{f(x_2)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$



en este caso como ya se menciono $\int_a^b \psi_2(x)dx = \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)dx = 0$ por lo que si se escoge $x_3 = x_1$ entonces se tiene que $\psi_3(x) = (x - a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 (x - b)$ y esta es o no-positiva o no-negativa en (a, b) y por la ec. 2 se tiene que

$$E(f) = \frac{f''''(\eta)}{4!}\int_a^b \psi_3(x)dx = \left(\frac{f''''(\eta)}{24}\right)\left(\frac{1}{120}(a - b)^5\right) = \frac{f''''(\eta)}{90}\left(\frac{a-b}{2}\right)^5$$

Si se considera $k = 3$. Entonces

$$f(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + f[x_0, x_1, x_2, x_3](x - x_0)(x - x_1)(\mathrm{x} - \mathrm{x}_2)$$
$$+ f[x_0, x_1, x_2, x_3, x](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)$$

Para distintos valores de $x_0,\ x_1,\ x_2,\ x_3$ en (a, b) se tiene que $\psi_3(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)$ no es necesariamente no-positiva o no-negativa pero si $x_0 = x_1 = a$ y $x_2 = x_3 = b$ entonces $\psi_3(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) = (x - x_0)^2(x - x_2)^2$ y esta es no-negativa; ahora bien

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_3(x)dx \quad \text{y}$$

$$p_3(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + f[x_0, x_1, x_2, x_3](x - x_0)(x - x_1)(\mathrm{x} - \mathrm{x}_2)$$

entonces $\int_a^b p_3(x)dx = \int_a^b \left(f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_0, x_2](x - x_0)^2 + f[x_0, x_0, x_2, x_2](x - x_0)^2(x - x_2)\right) dx$

$$= \int_a^b f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{3f[a, b] - 2f'(a) - f'(b)}{b - a}(x - a)^2 + \frac{f'(b) + f'(a) - 2f[a, b]}{(b - a)^2}(x - a)^3$$
$$= \frac{b - a}{2}\left(f(a) - f(b)\right) + \frac{(b - a)^2}{12}\left(f'(a) - f'(b)\right)$$

en este caso como ya se menciono $\psi_3(x) = (x - x_0)^2(x - x_2)^2$, entonces se tiene que por la ec. 2

$$E(f) = \frac{f''''(\eta)}{4!}\int_a^b \psi_3(x)dx = \left(\frac{f''(\eta)}{4!}\right)\frac{(b - a)^5}{30} = -\frac{f''''(\eta)}{720}(a - b)^5$$

Regla del …	Valor aproximado de la integral	Error
Rectángulo	$(b-a)f(a)$	$\frac{f'(\eta)(b-a)^2}{2}$
Punto Medio	$(b-a)f(\frac{a+b}{2})$	$\frac{f''(\eta)(b-a)^3}{24}$
Trapecio	$\frac{1}{2}(b-a)(f(a)+f(b))$	$\frac{f''(\eta)}{12}(a-b)^3$
Simpson	$\frac{b-a}{6}\left(f(a)+4\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right)$	$\frac{f''''(\eta)}{90}\left(\frac{a-b}{2}\right)^5$
Trapecio corregido	$\frac{b-a}{2}\big(f(a)+f(b)\big)+\frac{(b-a)^2}{12}(f'(a)-f'(b))$	$-\frac{f''''(\eta)}{720}(a-b)^5$

EJEMPLO

Calcular el valor de las siguientes integrales por los casos vistos anteriormente y el valor del error

$$\int_0^1 e^{-x^2}$$

$f(0) = 1$ $\quad$ $f(1) = e^{-1} = 0.36788$ $\quad$ $f\left(\frac{1}{2}\right) = e^{-\frac{1}{4}} = 0.77880$

$f'(x) = -2x\, e^{-x^2}$ $\quad$ $f'(0) = 0$ $\quad$ $f'(1) = -2e^{-1} = -0.73576$

Regla del …	**Valor aproximado de la integral**	
Rectángulo	$(b-a)f(a)$	1
Punto Medio	$(b-a)f(\frac{a+b}{2})$	0.7788
Trapecio	$\frac{1}{2}(b-a)(f(a)+f(b))$	0.68394
Simpson	$\frac{b-a}{6}\left(f(a)+4\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right)$	0.74718
Trapecio corregido	$\frac{b-a}{2}\left(f(a)+f(b)\right)+\frac{(b-a)^2}{12}(f'(a)-f'(b))$	0.74525

In[1]:= $\int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right) dx$

Out[1]= 0

In[2]:= $\int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 dx$

Out[2]= $-\frac{1}{12}(a-b)^3$

In[3]:= $\int_a^b \left(fa + \frac{fb - fa}{b-a}(x-a)\right) dx$

Out[3]= $-\frac{1}{2}(a-b)(fa+fb)$

In[4]:= $\int_a^b ((x-a)(x-b)) dx$

Out[4]= $\frac{a^3}{6} - \frac{a^2 b}{2} + \frac{a b^2}{2} - \frac{b^3}{6}$

In[5]:= **Factor[%]**

Out[5]= $\frac{1}{6}(a-b)^3$

In[6]:= $\int_a^b \left(fa + \frac{fm - fa}{\frac{a+b}{2} - a}(x-a) + \left(\frac{fa}{\left(a - \frac{a+b}{2}\right)(a-b)} + \frac{fm}{\left(\frac{a+b}{2} - a\right)\left(\frac{a+b}{2} - b\right)} + \frac{fb}{(b-a)\left(b - \frac{a+b}{2}\right)}\right)(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)\right) dx$

Out[6]= $-\frac{1}{6}(a-b)(fa+fb+4\,fm)$

In[7]:= $\int_a^b \left((x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)(x-b)\right) dx$

Out[7]= 0

In[8]:= $\int_a^b \left((x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 (x-b)\right) dx$

Out[8]= $\frac{1}{120}(a-b)^5$

In[9]:= **120 × 4!**

Out[9]= 2880

In[10]:= **$90\,2^5$**

Out[10]= 2880

In[11]:= $fab = \frac{fb - fa}{b - a};$

In[12]:= $\int_a^b \left(fa + fpa\,(x - a) + \frac{3\,fab - 2\,fpa - fpb}{b - a}\,(x - a)^2 + \frac{fpb + fpa - 2\,fab}{(b - a)^2}\,(x - a)^2\,(x - a)\right) dx$

Out[12]= $\frac{1}{12}\,(a - b)\,(-6\,fa - 6\,fb + (a - b)\,(fpa - fpb))$

In[13]:= $\int_a^b \left((x - a)^2\,(x - b)^2\right) dx$

Out[13]= $-\frac{1}{30}\,(a - b)^5$

In[14]:= $30 \times 4!$

Out[14]= 720

In[15]:= $D\left[e^{-x^2}, x\right]$

Out[15]= $-2\,e^{-x^2}\,x$

In[16]:= $D\left[e^{-x^2}, \{x, 2\}\right]$

Out[16]= $-2\,e^{-x^2} + 4\,e^{-x^2}\,x^2$

In[17]:= $D\left[e^{-x^2}, \{x, 4\}\right]$

Out[17]= $12\,e^{-x^2} - 48\,e^{-x^2}\,x^2 + 16\,e^{-x^2}\,x^4$

$f[x_0, x_1] = f'(x_0)\quad \textit{Siempre y cuando } x_0 = x_1$

Si $x_0 \leq x_1 \leq \cdots \leq x_k$ entonces se define

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \begin{cases} \frac{f[x_1, \dots, x_k] - f[x_0, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_0}, & x_0 \neq x_k \\ \frac{f'(x_0)}{k!}, & x_0 = x_k \end{cases}$$

Ahora bien si $\Delta x_i = (x_{i+1} - x_i)$ y $x_i < x_{i+1}$ y usando el hecho anterior se tiene que para

$$p_i(x) = f(x_i) + f[x_i, x_i](x - x_i) + f[x_i, x_i, x_{i+1}](x - x_i)^2 + f[x_i, x_i, x_{i+1}, x_{i+1}](x - x_i)^2(x - x_{i+1})$$

$(x - x_{i+1}) = (x - x_i) + (x_i - x_{i+1})$ por lo que se tiene que

$$p_i(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + (f[x_i, x_i, x_{i+1}] - f[x_i, x_i, x_{i+1}, x_{i+1}]\Delta x_i)(x - x_i)^2 + f[x_i, x_i, x_{i+1}, x_{i+1}](x - x_i)^3$$

$$f[x_i, x_i, x_{i+1}] - f[x_i, x_i, x_{i+1}, x_{i+1}]\Delta x_i = \frac{3f[x_i, x_{i+1}] - 2f'(x_i) - f'(x_{i+1})}{\Delta x_i}$$

$$f[x_i, x_i, x_{i+1}, x_{i+1}] = \frac{f[x_i, x_{i+1}, x_{i+1}] - f[x_i, x_i, x_{i+1}]}{\Delta x_i} = \frac{f'(x_{i+1}) + f'(x_i) - 2f[x_i, x_{i+1}]}{(\Delta x_i)^2}$$

Para la ec. 2 se usa la siguiente identidad

$f[x_0, \dots, x_k, x] = f[x_0, \dots, x_k, x_{k+1}] + f[x_0, \dots, x_k, x_{k+1}, x](x - x_{k+1})$ entonces para un valor x_{k+1} valido se tiene que

$$\begin{aligned} E(f) &= \int_a^b f[x_0, \dots, x_k, x_{k+1}]\psi_k(x)dx + \int_a^b f[x_0, \dots, x_k, x_{k+1}, x](x - x_{k+1})\psi_k(x)dx \\ &= \int_a^b f[x_0, \dots, x_k, x_{k+1}, x]\psi_{k+1}(x)dx \quad \text{dado que se tiene que } \int_a^b \psi_k(x)dx = 0 \end{aligned}$$

Por lo que se puede elegir un x_{k+1} que haga que $\psi_{k+1}(x)$ sea solo o no-positiva o no-negativa en (a, b) y si $f(x)$ es $k + 2$ veces diferenciable se sigue que

$$E(f) = \frac{1}{(k+2)!} f^{(k+2)}(\eta) \int_a^b \psi_{k+1}(x)dx \quad \text{para algún } \eta \in (c, d)$$

que es la ec. 2 mencionada anteriormente

BIBLIOGRAFÍA

Conte S., Boor Carl. Elementary Numerical Analysis an algorithmic approach. ed. 2, Ed. Mc Graw-Hill