

# Integración numérica

Javier Segura

Cálculo Numérico I. Tema 4.

# Estructura de la presentación:

## 1 Introducción y definiciones

## 2 Fórmulas de Newton-Cotes

- Fórmulas simples
- Fórmulas compuestas
- Regla trapezoidal recurrente

## 3 Integración Gaussiana

## Definición

Dada una función  $f(x)$  integrable en  $[a, b]$  y una aproximación a la integral dada por

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

donde  $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ , diremos que

$$Q(f) = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$$

es una regla de cuadratura de  $n + 1$  puntos que aproxima la integral definida. A los números  $w_i$  se les llama pesos de la regla de cuadratura.

## Definición

Se define el error de truncamiento para la regla de cuadratura como

$$E(f) = I(f) - Q(f)$$

y se dice que el grado de exactitud de una regla de cuadratura es  $K$  cuando la regla da el resultado exacto de la integral para todos los polinomios de grado menor o igual que  $K$ , pero no así para mayores grados.

# Estructura de la presentación:

1 Introducción y definiciones

2 **Fórmulas de Newton-Cotes**

- Fórmulas simples
- Fórmulas compuestas
- Regla trapezoidal recurrente

3 Integración Gaussiana

**Fundamento de las fórmulas de Newton-Cotes:** utilización del polinomio interpolador que pasa por un determinado número de puntos como aproximante del integrando  $f(x)$ .

Fórmula de Lagrange del polinomio interpolador para  $n + 1$  puntos de interpolación:

$$f(x) \approx \sum_{i=0}^n f(x_i)L_i(x)$$

Entonces, la fórmula de Newton-Cotes de  $n + 1$  puntos sería:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$$

siendo

$$w_i = \int_{x_0}^{x_n} L_i(x)dx$$

**Regla trapezoidal:**

Tomamos sólo dos puntos de interpolación ( $n = 1$ ).

$f(x) \approx P_1(x) = f(x_0) \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f(x_1) \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$  de modo que la aproximación es:

$$I(f) = \int_{x_0}^{x_1} f(x) \approx \int_{x_0}^{x_1} P_1(x) dx = \int_0^1 \frac{1}{h} (f_0 h(1-s) + f_1 sh) h ds$$

donde se ha considerado el cambio  $x = x_0 + sh$ ,  $0 \leq s \leq 1$  y denotamos  $f_i = f(x_i)$ .

Entonces:

$$I(f) = \frac{h}{2} (f_0 + f_1)$$

**Regla de Simpson:** La regla de Simpson es la que se obtiene al interpolar en tres puntos:  $x_0 = a$ ,  $x_1 = (a + b)/2$  y  $x_2 = b$  mediante el polinomio de grado 2.

$$I(f) = \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \approx \int_{x_0}^{x_2} P_2(x) dx = \int_0^2 \sum_{i=0}^2 \binom{s}{i} \Delta^i f_0 h ds$$

Tenemos pues que

$$I(f) \approx h \int_0^2 \left( f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2} \Delta^2 f_0 \right) ds = h \left( 2f_0 + 2\Delta f_0 + \frac{1}{3} \Delta^2 f_0 \right)$$

Es decir,

$$I(f) = \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \approx \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + f_2)$$



## Error de las reglas simples

Sea  $f(x)$  suficientemente diferenciable (con continuidad) en  $[x_0, x_n]$ ,  $x_k = x_0 + kh$ ,  $k = 0, \dots, n$ , entonces  $\exists c_n \in (x_0, x_n)$  tal que:

①  $n = 1$  (trapezoidal):  $\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) - \frac{h^3}{12}f^{(2)}(c_1)$  si  $f^{(2)}$  es continua; el grado del método es 1

②  $n = 2$  (Simpson):  $\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(c_2)$ , si  $f^{(4)}$  es continua; el grado del método es 3

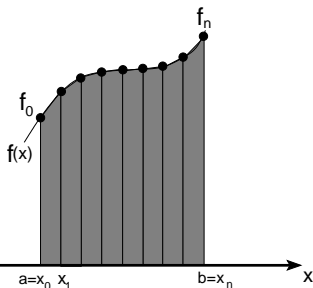
③  $n = 3$  (Simpson 3/8):  $\int_{x_0}^{x_3} f(x) dx = \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) - \frac{3h^5}{80}f^{(4)}(c_3)$  si  $f^{(4)}$  es continua; el grado es 3.

**Derivación de las reglas compuestas:** subdividir el intervalo  $[a, b]$  en intervalos más pequeños y aplicar reglas de Newton-Cotes de orden bajo. Dado un intervalo  $[a, b]$  podríamos considerar una partición equiespaciada de este intervalo

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b, \quad x_k = x_0 + ih, \quad i = 0 \dots n, \quad h = (b - a)/n$$

y aplicar la regla trapezoidal en cada uno de estos subintervalos:

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x) dx \approx \frac{h}{2} (f(x_{k-1}) + f(x_k))$$



## Teorema (Regla trapezoidal compuesta)

Sea  $f(x)$  con derivada segunda continua en  $[a, b]$ , y sea la partición del intervalo  $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ ,  $x_i = x_0 + ih$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$ , entonces

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + h \sum_{i=1}^{n-1} f_i + E_n^T(f)$$

donde  $f_i \equiv f(x_i)$  y

$$\exists \tau \in [a, b] : E_n^T(f) = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\tau) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\tau)$$

## Teorema (Regla de Simpson compuesta)

Sea  $f(x)$  con derivada cuarta continua en  $[a, b]$ , y sea la partición del intervalo  $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ ,  $x_i = x_0 + ih$ ,  $i = 0, 1, \dots, n = 2m$ , entonces

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \frac{h}{3}(f_0 + f_n) + \frac{2h}{3} \sum_{i=1}^{m-1} f_{2i} + \frac{4h}{3} \sum_{i=1}^m f_{2i-1} + E_n^S(f) \\ &= \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 2f_{n-1} + 4f_{n-1} + f_n) + E_n^S(f) \end{aligned}$$

donde  $f_i \equiv f(x_i)$  y

$$\exists \tau \in [a, b] : E_n^S(f) = -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\tau) = -\frac{(b-a)^5}{180n^4} f^{(4)}(\tau)$$

Consideramos los nodos:

$$a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n, \quad n = 2m, \quad m \in \mathbb{N}$$

la cuadratura trapezoidal con espaciado  $h$  ( $h = x_{i+1} - x_i$ ),  $T(f, h)$ , se puede entonces escribir

$$\int_a^b f(x) dx \approx T(f, h) = \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{n-1} (f_i + f_{i+1})$$

Por otra parte

$$T(f, 2h) = h \sum_{i=0}^{m-1} (f_{2i} + f_{2i+2})$$

de modo que

$$T(f, h) = \frac{T(f, 2h)}{2} + h \sum_{i=1}^m f_{2i-1}$$

## Algoritmo para la regla trapezoidal recurrente

Input:  $\epsilon > 0$ ,  $f(x)$ ,  $b$ ,  $a$ .

Output:  $\int_a^b f(x)dx$

(1)  $h = b - a$ ,  $I = \frac{h}{2}(f(a) + f(b))$

(2)  $\Delta = 1 + \epsilon$ ;  $n = 1$

(3) Repetir mientras  $\Delta > \epsilon$

(4)  $h = h/2$ ;  $I_0 = I$

(5)  $I = I_0/2 + h \sum_{i=1}^n f(a + (2i - 1)h)$

(6)  $n = 2n$

(7)  $\Delta = |I - I_0|$

(6) Ir a (3)

La regla de Simpson también se puede calcular recurrentemente utilizando su relación con la regla trapezoidal.

Si denotamos por  $S(f, h)$  la regla de Simpson con espaciado  $h$  se cumple que

$$S(f, h) = \frac{4T(f, h) - T(f, 2h)}{3} = T(f, h) + \frac{T(f, h) - T(f, 2h)}{3}$$

donde

$$T(f, h) = \frac{h}{2}(f_0 + f_{2m}) + h \sum_{i=0}^{2m} f_i$$

$$T(f, 2h) = h(f_0 + f_{2m}) + 2h \sum_{j=1}^m f_{2j}$$

$$S(f, h) = \frac{h}{3}(f_0 + f_{2m}) + \frac{2h}{3} \sum_{j=1}^{m-1} f_{2j} + \frac{4h}{3} \sum_{j=1}^m f_{2j-1}$$

# Estructura de la presentación:

## 1 Introducción y definiciones

## 2 Fórmulas de Newton-Cotes

- Fórmulas simples
- Fórmulas compuestas
- Regla trapezoidal recurrente

## 3 Integración Gaussiana



**Idea fundamental:** elección “adecuada” de los nodos y de los pesos.

$$\int_a^b f(x)dx \approx Q(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

Tenemos  $2n$  ( $w_i, x_i$ ) parámetros que se pueden intentar fijar de manera que **la regla de cuadratura  $Q(f)$  sea exacta para polinomios de grado lo mayor posible.**

¿Cuál es el mayor grado de exactitud posible?

Parece lógico pensar que será  $2n - 1$ , pues los polinomios de grado  $2n - 1$  tienen en general  $2n$  coeficientes, que es el número de parámetros libres.

Veamos un ejemplo

## Ejercicio

Obtener la regla de cuadratura con dos nodos  $Q(f)$  con mayor grado de exactitud posible para aproximar

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx.$$

Tenemos

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx \approx Q(f) = w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2)$$

El mayor grado de exactitud posible será 3. Determinamos los parámetros exigiendo que  $I(f) = Q(f)$  para cualquier polinomio de grado 3, o, equivalentemente:

$$I(x^k) = Q(x^k), \quad k = 0, 1, 2, 3$$

$$\begin{aligned} k = 0 &\rightarrow 2 = w_1 + w_2 \\ k = 1 &\rightarrow 0 = w_1 x_1 + w_2 x_2 \\ k = 2 &\rightarrow \frac{2}{3} = w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2 \\ k = 3 &\rightarrow 0 = w_1 x_1^3 + w_2 x_2^3 \end{aligned}$$

Resolviendo el sistema, obtenemos  $w_1 = w_2 = 1$ ,  $x_1 = -x_2$ ,  $|x_1| = 1/\sqrt{3}$  y la cuadratura buscada es

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx \approx Q(f) = f(-1/\sqrt{3}) + f(1/\sqrt{3})$$

Es inmediato comprobar que la regla no es exacta para polinomios de grado 4, luego el grado de exactitud es 3.

No demostraremos la existencia en general de las fórmulas Gaussianas, pero vamos a enunciar un resultado que prueba su existencia.

Consideraremos un caso algo más general de integrales:

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

donde  $w(x)$  es una función peso en  $[a, b]$  (función no negativa y tal que  $\int_a^b x^k f(x)dx$  está definida para cualquier  $k$  natural).

Diremos que  $Q(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$  tiene grado de exactitud  $K$  si  $I(f) = Q(f)$  para  $f$  cualquier polinomio de grado a lo sumo  $K$  pero no así para grado mayor que  $K$ .

Según sea la función peso y el intervalo, la cuadratura Gaussiana recibe distintos nombres. Algunas cuadraturas clásicas son la de Legendre ( $w(x) = 1$  en  $[-1, 1]$ ), Hermite ( $w(x) = e^{-x^2}$  en  $(-\infty, \infty)$ ) y Laguerre ( $w(x) = e^{-x}$  en  $[0, +\infty)$ ),

El siguiente resultado prueba la existencia de la cuadratura Gaussiana (la de mayor grado de exactitud posible) y da una alternativa de cálculo a la anteriormente vista, además de un término de error.

# Integración Gaussiana

## Teorema

Sea  $P_n(x)$  un polinomio de grado  $n$  (por ejemplo mónico) tal que

$$\int_a^b x^k P_n(x) w(x) dx = 0, \quad k = 0, \dots, n-1$$

donde  $w(x)$  es una función peso en  $[a, b]$ . Sean  $x_0, \dots, x_n$  los ceros de  $P_n(x)$  (necesariamente todos en  $[a, b]$ ). Entonces

$$\int_a^b f(x) w(x) dx \approx Q_n^G(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

donde  $w_i = \int_a^b L_i(x) w(x) dx$ , siendo  $L_i(x)$  de la base de los polinomios interpoladores de Lagrange ( $L_i(x_j) = \delta_{ij}$ ). La regla de cuadratura  $Q_{n+1}^G(f)$  es exacta para los polinomios de grado menor o igual que  $2n-1$  y se verifica que

$$\exists \eta \in (a, b) : \int_a^b f(x) dx = Q_n^G(f) + \gamma \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!}$$

siendo  $\gamma$  una constante que se puede obtener aplicando la regla de cuadratura a un polinomio de grado  $2n$ .

## Ejercicio

Obtener la regla de cuadratura con tres nodos  $Q(f)$  con mayor grado de exactitud posible para aproximar

$$I(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-x^2} dx.$$

El intervalo de integración es todo  $\mathbb{R}$  y el peso  $w(x) = e^{-x^2}$ .

Consideramos el polinomio de grado 3 mónico (coeficiente del término de máximo grado igual a 1):

$$P_3(x) = x^3 + Bx^2 + Cx + D$$

y exigimos que  $I(xP_3(x)) = 0$ ,  $k = 0, 1, 2$ . Con esto obtenemos un sistema lineal para  $B, C, D$  que se resuelve sencillamente (utilizamos que  $I(x^m) = (1 + (-1)^m)\sqrt{\pi}2^{-m/2}(m-1)!!$ ), llegando a:

$$P_3(x) = x^3 - \frac{3}{2}x$$

Los nodos son entonces las soluciones de  $P_3(x) = 0 \rightarrow x_1 = -\sqrt{3/2}$ ,  $x_2 = 0$ ,  $x_3 = \sqrt{3/2}$

Los pesos los podemos obtener de  $w_i = \int_{-\infty}^{+\infty} L_i(x)w(x)dx$  o también de  $I(x^k) = Q(x^k)$ ,  $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ . De hecho, es suficiente con considerar  $k = 0, 1, 2$ , de donde:

$$\begin{aligned} I(1) &= \sqrt{\pi} = Q(1) = w_1 + w_2 + w_3 \\ I(x) &= 0 = Q(x) = \sqrt{3/2}(-w_1 + w_3) \\ I(x^2) &= \sqrt{\pi/2} = Q(x^2) = \frac{3}{2}(w_1 + w_2) \end{aligned}$$

Y de aquí  $w_1 = w_3 = \sqrt{\pi}/6$ ,  $w_2 = 2\sqrt{\pi}/3$ .

Si quisiéramos estimar el error, sabemos que  $I(f) - Q(f) = \gamma f^{(6)}(c)/6!$  y necesitaríamos obtener  $\gamma$ . Una forma de hacerlo es tomar  $f(x) = x^6$ ; tenemos  $\gamma = I(x^6) - Q(x^6) = 15\sqrt{\pi}/8 - 9\sqrt{\pi}/8 = 3\sqrt{\pi}/4$ .