
Interpolación, derivación e integración numérica

PID_00266171

Luis Ortiz Gracia

Tiempo mínimo de dedicación recomendado: 2 horas



Índice

Introducción	5
1. Interpolación de funciones	7
1.1. Interpolación polinómica	9
1.2. Métodos de cálculo del polinomio interpolador	10
1.2.1. Método de Lagrange	10
1.2.2. Método de las diferencias divididas de Newton	11
1.3. Interpolación por tramos	13
1.3.1. <i>Splines</i> cúbicos	14
2. Derivación e integración numérica	16
2.1. Derivación numérica	16
2.2. Integración numérica	18
2.2.1. Fórmulas de integración interpolatoria	19
2.2.2. Método de extrapolación de Romberg	23
2.2.3. Métodos de Monte Carlo	25
Bibliografía	27

Introducción

Esta guía de estudio trata los temas de interpolación, derivación e integración numérica y se divide en dos apartados. El primero de ellos versa sobre interpolación de funciones. En él se abordan los temas de existencia y unicidad del polinomio interpolador, así como dos métodos diferentes para calcularlo, como son el método de Lagrange y el método de las diferencias divididas de Newton. A continuación se expone la desventaja que supone trabajar con polinomios interpoladores de grado alto, hecho que se manifiesta en el llamado fenómeno de Runge, y se propone como alternativa la interpolación por tramos, poniendo especial énfasis en los *splines* cúbicos. El apartado segundo está dedicado a la derivación e integración numérica. En relación con el primer tema, se explica cómo aproximar la primera y la segunda derivada de una función como un proceso que consta de dos etapas: cálculo del polinomio interpolador y aproximación de la derivada de la función mediante la derivada del polinomio interpolador. Finalmente se aborda la integración numérica mediante tres enfoques distintos: integración basada en el cálculo del polinomio interpolador (regla de los trapecios y regla de Simpson), integración por extrapolación (método de Romberg) e integración basada en simulación (métodos de Monte Carlo).

La mayoría de los métodos van acompañados de ejemplos sencillos para facilitar su comprensión. En el desarrollo de esta guía se ha puesto el foco de atención en la aplicación práctica de los métodos expuestos y en la observación de los resultados más que en el análisis riguroso del error numérico, tema este último que puede hallarse en los manuales de referencia.

1. Interpolación de funciones

Dado un conjunto de parejas de puntos del plano, podríamos preguntarnos si existe una función p , de un tipo determinado, de manera que el gráfico de esta función pasase por todos estos puntos dados. Esta cuestión se llama **problema de interpolación** y al proceso de búsqueda de la función p se le llama **interpolación**.

Supongamos por ejemplo que tenemos la función $f(x) = x^2$ y dos puntos de paso de esta función $(x_0, y_0) = (1, 1), (x_1, y_1) = (2, 4)$. ¿Cuál es la función $p(x)$ que pasa por estos dos puntos? La respuesta en este caso es la recta única $y = mx + b$ que une ambos puntos, cuya pendiente es

$$m = \frac{4 - 1}{2 - 1} = 3$$

y

$$b = 4 - 3 \cdot 2 = -2,$$

es decir, $y = 3x - 2$.

En general, estas parejas de puntos las expresaremos matemáticamente como (x_k, y_k) , donde k es el índice que usaremos para recorrer todos los puntos dados. Concretamente, supondremos que tenemos $m + 1$ puntos y por tanto $k = 0, \dots, m$. De esta forma, si $m = 1$, entonces tenemos los puntos $\{(x_0, y_0), (x_1, y_1)\}$, si $m = 2$, entonces tendríamos el conjunto de puntos $\{(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)\}$ y así sucesivamente. Además, supondremos que estos puntos son diferentes dos a dos, es decir $x_k \neq x_i$ si $k \neq i$. Queremos ver si existe alguna función p tal que $p(x_k) = y_k$, para $k = 0, \dots, m$.

Ejemplo 1

El valor de la aceleración de la gravedad en un punto de la superficie terrestre a nivel del mar depende de la latitud. Experimentalmente, se ha comprobado la correspondencia dada en la siguiente tabla:

Tabla 1

Latitud (en grados)	Aceleración gravedad (en m/s^2)
0	9,780350
30	9,793238
45	9,806154
60	9,819099
90	9,832072

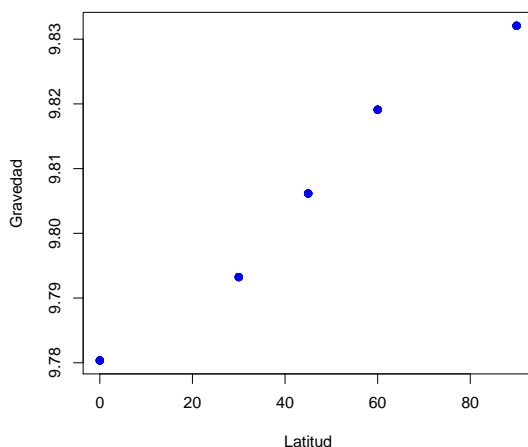
Medidas de la gravedad en diversas latitudes

El problema de interpolación consiste en encontrar el valor de la gravedad en Barcelona, que está situada en una latitud de 41 grados y 25 minutos.

La resolución de un problema de interpolación es de utilidad en muchas situaciones, en particular cuando la procedencia de los puntos (x_k, y_k) es experimental. En el ejemplo 1 hemos considerado un proceso en el cual, para determinados valores de una variable x (latitud), se obtiene un resultado expresado para la variable y (aceleración de la gravedad). Supongamos que conocemos experimentalmente la respuesta y_k obtenida bajo condiciones x_k y que nos interesa hallar el resultado y que obtendríamos al tomar condiciones x no experimentadas, como por ejemplo saber el valor de la gravedad correspondiente a la latitud de 41 grados y 25 minutos.

Podemos pensar que los puntos dados forman parte de la gráfica de una función f que querríamos conocer al menos aproximadamente y de la cual únicamente sabemos que $f(x_k) = y_k$, para $k = 0, \dots, m$. Esta situación es frecuente en la ciencia y la técnica, y nos conduce al problema típico de interpolación en el cual no aproximamos números, sino funciones. En la figura 1 hemos representado en color azul los cinco puntos de la tabla 1.

Figura 1



Aceleración de la gravedad

Cuando se plantea un problema de interpolación como el que acabamos de ver, podemos formularnos las siguientes preguntas:

- ¿De qué tipo tiene que ser la función p que buscamos (polinómica, trigonométrica, racional, etc.)?
- ¿Existe la función que estamos buscando? Y, en caso de que exista, ¿es única?
- ¿Es la función p una buena aproximación de la función f en los puntos en los que no coinciden?

1.1. Interpolación polinómica

Dados $m + 1$ puntos de interpolación $(x_k, f_k), k = 0, \dots, m$ con $x_k \neq x_i$ si $k \neq i$, llamaremos **interpolación polinómica** a la determinación de un polinomio $p(x)$ de grado menor o igual que N tal que

$$p(x_k) = f_k, \quad k = 0, \dots, m.$$

Cuando f_k represente el valor de una cierta función f en x_k , hablaremos de **interpolación polinómica de la función f** en las **abscisas de interpolación x_k** .

Para dar respuesta a las tres preguntas anteriores, empezaremos diciendo que la función p que buscamos formará parte del conjunto de polinomios de grado menor o igual que N , para un cierto valor de N , es decir, $p(x)$ será de la forma

$$p(x) = a_N x^N + a_{N-1} x^{N-1} + \dots + a_1 x + a_0.$$

Para poder determinar este polinomio, tendremos que conocer el valor de los $N + 1$ coeficientes a_0, a_1, \dots, a_N . Si a_N es no nulo, diremos que $p(x)$ tiene exactamente grado N .

En relación con la segunda pregunta formulada, podemos afirmar que existe un único polinomio $p_m(x)$ de grado menor o igual que $N = m$, tal que $p_m(x_k) = f_k$ para $k = 0, \dots, m$. El polinomio $p_m(x)$ se llama **polinomio interpolador** de f en las abscisas $x_k, k = 0, \dots, m$. Veamos que esta afirmación es cierta. Para ello, consideramos un polinomio $p_m(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_m x^m$. Tras imponer las condiciones de interpolación, obtenemos un sistema lineal de $m+1$ ecuaciones en las $m + 1$ incógnitas a_0, a_1, \dots, a_m

$$\left. \begin{aligned} a_0 + a_1 x_0 + \dots + a_m x_0^m &= f_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + \dots + a_m x_1^m &= f_1 \\ \dots &= \dots \\ a_0 + a_1 x_m + \dots + a_m x_m^m &= f_m \end{aligned} \right\}.$$

El determinante de la matriz del sistema se llama **determinante de Vandermonde** y tiene la forma siguiente:

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & \dots & x_0^m \\ 1 & x_1 & \dots & x_1^m \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_m & \dots & x_m^m \end{vmatrix} = \prod_{k>i} (x_k - x_i).$$

Productorio

La letra Π mayúscula denota el productorio o productoria, también conocido como multiplicatorio, multiplicatoria o simplemente producto. Es una notación matemática que representa una multiplicación cuyos factores son los que hay entre paréntesis, variando los subíndices de acuerdo con la condición que hay debajo del símbolo.

Observemos que este determinante es diferente de cero, ya que $x_i \neq x_k$ si $i \neq k$. Por lo tanto, el sistema planteado es compatible determinado con una única solución a_0, a_1, \dots, a_m , coeficientes del único polinomio interpolador.

El método que acabamos de describir para hallar $p_m(x)$ resulta especialmente laborioso cuando m es grande. En el subapartado 1.2 estudiaremos el método de Lagrange y el de las diferencias divididas de Newton, respectivamente, con el propósito de facilitar esta tarea.

Finalmente, en relación con la tercera pregunta que hemos formulado, nos interesa tener un criterio para “medir la proximidad” del polinomio $p_m(x)$ a la función f .

Decimos que una función es derivable con continuidad en el intervalo (a,b) si existe la derivada de la función en todo punto del intervalo y además la función derivada es continua en cada punto del intervalo. A este tipo de funciones se les llama de **clase C^1 en el intervalo (a,b)** y se simbolizan por $f \in C^1(a,b)$. De la misma manera, diremos que f es $n + 1$ veces derivable con continuidad en (a,b) y lo escribiremos como $f \in C^{n+1}(a,b)$, si f puede derivarse $n + 1$ veces en (a,b) y la derivada $n + 1$ de f es continua en (a,b) .

Supongamos, por tanto, que f es de clase C^{n+1} en (a,b) y que $x_k \in (a,b), k = 0, \dots, m$; entonces, para cualquier punto x del intervalo (a,b) tenemos la siguiente expresión para el **error de interpolación**:

$$f(x) - p_m(x) = \frac{f^{(m+1)}(\xi(x))}{(m+1)!} (x-x_0)(x-x_1) \cdots (x-x_m),$$

donde $\xi(x)$ depende de x y pertenece al mínimo intervalo que contiene las abscisas x_0, x_1, \dots, x_m y x , que indicaremos por $\langle x_0, \dots, x_m, x \rangle$.

1.2. Métodos de cálculo del polinomio interpolador

En este subapartado destacaremos los métodos de cálculo del polinomio interpolador conocidos como el **método de Lagrange** y el **método de las diferencias divididas de Newton**.

1.2.1. Método de Lagrange

Se toma como expresión del polinomio interpolador la siguiente **fórmula de interpolación de Lagrange**:

$$p_m(x) = \sum_{k=0}^m f_k l_k(x), \quad l_k(x) = \frac{\prod_{i \neq k} (x - x_i)}{\prod_{i \neq k} (x_k - x_i)}, k = 0, \dots, m.$$

Lecturas complementarias

Para un estudio en profundidad sobre funciones derivables, se recomienda leer la guía de *Continuidad y derivabilidad* (PID_00224048).

Los polinomios $l_k(x)$ reciben el nombre de **polinomios de Lagrange**. Se puede observar que el grado de $l_k(x)$ es igual a m y que $l_k(x_i) = \delta_{ik}, i, k = 0, \dots, m$. Por tanto, $p_m(x_i) = f_i, i = 0, \dots, m$, como se deseaba.

Ejemplo 2

Calculad $f(3)$ por interpolación cúbica a partir de los datos de la tabla:

x_k	1	2	4	5
f_k	0	2	12	21

Observemos que en este caso $m = 3$. Los polinomios de Lagrange asociados a los puntos de la tabla son

$$l_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} = \frac{1}{-12}(-40 + 38x - 11x^2 + x^3),$$

$$l_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} = \frac{1}{6}(-20 + 29x - 10x^2 + x^3),$$

$$l_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)} = \frac{1}{-6}(-10 + 17x - 8x^2 + x^3)$$

y

$$l_3(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)} = \frac{1}{12}(-8 + 14x - 7x^2 + x^3).$$

Y el polinomio interpolador es

$$p_3(x) = f_0 l_0(x) + f_1 l_1(x) + f_2 l_2(x) + f_3 l_3(x) = \frac{1}{12}(-8 + 2x + 5x^2 + x^3).$$

Finalmente, el polinomio interpolador en $x = 3$ vale $\frac{35}{6} \approx 5,83$.

1.2.2. Método de las diferencias divididas de Newton

Expresamos ahora el polinomio interpolador de la forma siguiente:

$$p_m(x) = c_0 + c_1(x-x_0) + c_2(x-x_0)(x-x_1) + \dots + c_m(x-x_0)(x-x_1) \dots (x-x_{m-1}).$$

El método de las diferencias divididas nos permite calcular los coeficientes $c_j, j = 0, \dots, m$, mediante la construcción de las llamadas **diferencias divididas**, definidas por:

$$f[x_i] = f_i, i = 0, \dots, m,$$

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+j}, x_{i+j+1}] = \frac{f[x_{i+1}, \dots, x_{i+j+1}] - f[x_i, \dots, x_{i+j}]}{x_{i+j+1} - x_i}$$

$$i = 0, \dots, m-j, j = 0, \dots, m-1.$$

El esquema de construcción de las diferencias divididas de Newton es el siguiente:

x_0	$f[x_0]$			
		$f[x_0, x_1]$		
x_1	$f[x_1]$	$f[x_0, x_1, x_2]$		
		$f[x_1, x_2]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$	
x_2	$f[x_2]$	$f[x_1, x_2, x_3]$		
		$f[x_2, x_3]$		
x_3	$f[x_3]$			

Se puede probar (por inducción sobre m) que el polinomio $p_m(x)$ de grado menor o igual que m viene también dado por la **fórmula de interpolación de Newton** siguiente:

$$p_m(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_m](x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{m-1}),$$

donde $c_j = f[x_0, x_1, \dots, x_j]$.

El método de las diferencias divididas de Newton, además de ser un procedimiento interesante para el cálculo explícito del polinomio interpolador, tiene la ventaja de que si se añaden más puntos de interpolación, se puede aprovechar todo el trabajo hecho. Para construir el nuevo polinomio interpolador solo hay que continuar el esquema de construcción de diferencias divididas y calcular los nuevos coeficientes c_{m+1}, c_{m+2}, \dots , aprovechando de esta forma todos los cálculos previos.

Ejemplo 3

Dada la tabla siguiente de la función $f(x) = e^x$, calculad el valor aproximado de $\sqrt[3]{e}$ por

x	0,0	0,2	0,4	0,6
$f(x)$	1,0000	1,2214	1,4918	1,8221

interpolación cúbica empleando el método de Newton.

La tabla de diferencias divididas de Newton es

0	1,0000		
		1,107	
0,2	1,2214	0,6125	
		1,352	$\frac{0,68125}{3}$
0,4	1,4918	0,74875	
		1,6515	
0,6	1,8221		

El polinomio interpolador es

$$p_3(x) = 1 + 1,107x + 0,6125x(x - 0,2) + \frac{0,68125}{3}x(x - 0,2)(x - 0,4),$$

que en $x = \frac{1}{3}$ vale $x = \frac{113,0395}{81}$.

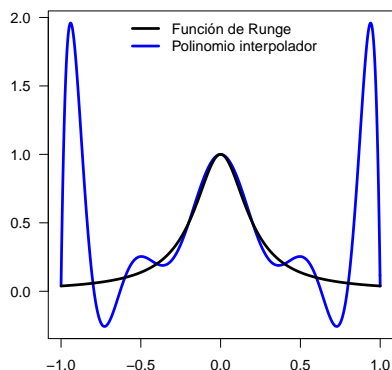
1.3. Interpolación por tramos

A medida que el número de puntos de interpolación se incrementa, el grado del polinomio interpolador también crece. Este hecho dificulta el cálculo del polinomio interpolador por cualquiera de los dos métodos que hemos visto en el subapartado 1.2. Es más, aunque un polinomio interpolador de grado alto pase a través de los puntos dados, es posible que fluctúe ampliamente entre dos puntos dados. Este fenómeno se conoce como **fenómeno de Runge** y está ilustrado en la figura 2, donde hemos considerado la función de Runge

$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}$$

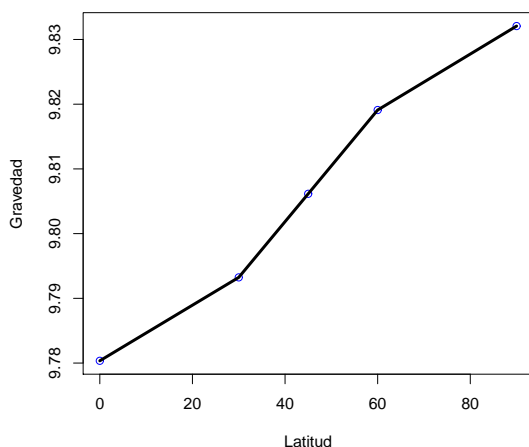
(línea de color negro) y hemos calculado el polinomio interpolador de grado 10 utilizando puntos equidistantes entre -1 y 1 (línea de color azul). Como puede observarse, el polinomio interpolador oscila ampliamente cuando nos aproximamos a los extremos del intervalo de interpolación.

Figura 2



La **interpolación por tramos** ofrece una alternativa al cálculo del polinomio interpolador tal y como lo conocemos hasta ahora. Un enfoque inicial a la interpolación por tramos podría ser la llamada **interpolación por tramos lineal**, que consiste en hacer una interpolación lineal (polinomio interpolador de grado uno) entre cada par de puntos consecutivos a lo largo del eje de abscisas. Como resultado de la interpolación lineal a trozos, obtenemos una función continua pero no derivable, pues presenta un pico en cada uno de los puntos donde se unen dos polinomios interpoladores de grado uno y por tanto las derivadas laterales no coinciden. Podemos observar estos picos en la figura 3, donde ilustramos la interpolación por tramos lineal utilizando el conjunto de puntos de la tabla 1. La derivabilidad es una propiedad deseable que satisface la interpolación por tramos cuando usamos **splines cúbicos**.

Figura 3



Interpolación por tramos lineal

1.3.1. Splines cúbicos

Los **splines cúbicos** proporcionan una curva suave y derivable a pesar de ser una interpolación por tramos.

Supongamos que tenemos un conjunto de n puntos para interpolar $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$. Definimos S_i como la función cúbica polinomial que representa la curva sobre el dominio $[x_i, x_{i+1}]$. Para estos n puntos tendremos por tanto $n - 1$ polinomios cúbicos interpoladores S_1, S_2, \dots, S_{n-1} , sobre los dominios $[x_1, x_2], [x_2, x_3], \dots, [x_{n-1}, x_n]$ respectivamente. Inicialmente consideraremos que cada uno de estos polinomios tiene la siguiente forma:

$$S_i(x) = d_i(x - x_i)^3 + c_i(x - x_i)^2 + b_i(x - x_i) + a_i, \quad i = 1, \dots, n - 1.$$

Si usamos un polinomio de este tipo para cada uno de los intervalos, tenemos en total $4(n - 1) = 4n - 4$ incógnitas que corresponden a a_i, b_i, c_i, d_i para las

$n - 1$ ecuaciones. Dado que queremos que el *spline* sea continuo y derivable, tendremos finalmente el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\left. \begin{aligned} S_i(x_i) &= y_i, & i = 1, \dots, n-1, \\ S_i(x_{i+1}) &= y_{i+1}, & i = 1, \dots, n-1, \\ S'_i(x_{i+1}) &= S'_{i+1}(x_{i+1}), & i = 1, \dots, n-2, \\ S''_i(x_{i+1}) &= S''_{i+1}(x_{i+1}), & i = 1, \dots, n-2, \end{aligned} \right\}.$$

Las dos primeras ecuaciones nos aseguran que si evaluamos nuestro *spline* en uno de los nodos (o puntos x_i) internos, el resultado es el esperado, y_i . La tercera ecuación nos asegura que tenemos una derivada continua en cada nodo interno, mientras que la cuarta ecuación asegura una segunda derivada continua, lo que significa que la primera derivada es diferenciable.

Estas condiciones nos llevan a tener un total de $4n - 6$ ecuaciones con $4n - 4$ incógnitas, lo que hace que el sistema sea compatible indeterminado. Podemos solventar esta indeterminación incluyendo las dos condiciones adicionales $S''_1(x_1) = 0$ y $S''_{n-1}(x_n) = 0$. Estas dos condiciones aseguran que, en los dos puntos extremos x_1 y x_n , la primera derivada es lineal y, por tanto, la función *spline* continúa en la dirección en la que estaba yendo. Esta construcción nos conduce al llamado ***spline natural***.

2. Derivación e integración numérica

2.1. Derivación numérica

La **derivación** nos proporciona una medida del ritmo o velocidad de cambio de una determinada cantidad. Los ritmos de cambio de cantidades aparecen en muchas disciplinas, especialmente en la ciencia y la ingeniería. Algunos de los ejemplos fundamentales se hallan en la relación entre la posición de un objeto, su velocidad y la aceleración. Si la posición x de un objeto que se mueve a lo largo de una línea recta es conocida como una función del tiempo,

$$x = f(t),$$

entonces la velocidad del objeto $v(t)$ es la derivada de la posición con respecto al tiempo,

$$v = f'(t).$$

De manera similar, la aceleración del objeto $a(t)$ es la derivada de la velocidad con respecto al tiempo,

$$a = v'(t).$$

Es importante señalar que las derivadas también desempeñan un papel fundamental en el cálculo de los valores máximos y mínimos de una función.

Aunque hay reglas conocidas para derivar las funciones más usuales, no siempre se pueden usar, como por ejemplo cuando las funciones vienen dadas por tablas de valores. En estos casos, hemos de recurrir a técnicas numéricas que, partiendo de los valores de la función en ciertas abscisas, nos permitan calcular una aproximación al valor de alguna de sus derivadas en una abscisa cercana. Estas técnicas numéricas también son utilizadas para resolver ecuaciones diferenciales en los casos en los que no pueden ser resueltas analíticamente (una ecuación diferencial es una ecuación que relaciona cierta función con sus derivadas y resolver una ecuación diferencial consiste en hallar esa función).

La **derivación numérica** de una función f derivable en $a \in \mathbb{R}$ consta de dos etapas:

- Construcción del polinomio interpolador $p_m(x)$ a la función f en una familia de abscisas x_0, x_1, \dots, x_m (que convendrá tomar cercanas a a).

- Derivación del polinomio $p_m(x)$ y evaluación en a , dando la fórmula de derivación numérica: $f'(a) \approx p'_m(a)$.

Las fórmulas obtenidas reciben el nombre de **fórmulas de derivación interpolatorias**.

Supongamos que queremos aproximar la derivada de cierta función f en $x = a$, usando las abscisas $x_0 = a$ y $x_1 = a + h$. En este caso el polinomio interpolador $p_1(x)$ es de primer grado. Tal y como hemos visto en el subapartado 1.2.2, el polinomio interpolador es

$$p_1(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0)$$

y, por tanto, $p'_1(a) = f[x_0, x_1] = \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$. De este modo, hemos obtenido una aproximación a la primera derivada de la función f en un punto $x = a$,

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h}.$$

El procedimiento anterior se puede repetir para aproximar la segunda derivada de f en $x = a$, que denotaremos como $f''(a)$. Consideramos las abscisas $x_0 = a - h, x_1 = a, x_2 = a + h$ y el polinomio interpolador

$$p_2(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1).$$

Si derivamos dos veces el polinomio interpolador $p_2(x)$ y evaluamos en $x = a$, obtenemos

$$f''(a) \approx 2f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{h^2}.$$

Ejemplo 4

Vamos a aprender a usar las fórmulas que hemos visto para aproximar la primera y la segunda derivada de la función $f(x) = \ln(x)$ en $x = a = 1$. En este caso, sabemos que $f'(x) = \frac{1}{x}$ y $f''(x) = -\frac{1}{x^2}$ y por tanto $f'(1) = 1, f''(1) = -1$. Si consideramos $h = 0,1$ y las fórmulas de derivación interpolatorias para la primera y segunda derivada, obtenemos

$$f'(1) \approx \frac{f(1+0,1) - f(1)}{0,1} = \frac{\ln(1+0,1) - \ln(1)}{0,1} \approx \frac{0,0953}{0,1} = 0,9531$$

y

$$f''(1) \approx \frac{f(1+0,1) - 2f(1) + f(1-0,1)}{0,1^2} \approx \frac{0,0953 - 0,1054}{0,01} = -1,0050.$$

2.2. Integración numérica

La **integración** aparece de manera frecuente cuando resolvemos problemas en ingeniería y ciencias. Uno de los ejemplos más simples en la aplicación de la integración aparece en el cálculo de la longitud de una curva. Cuando tenemos dibujada una curva en el plano que viene dada por la ecuación $y = f(x)$, la longitud L de la curva entre los puntos $x = a$ y $x = b$ viene dada por lo que denominamos **integral definida**,

$$L = \int_a^b \sqrt{1 + (f'(x))^2} dx,$$

donde $\sqrt{1 + (f'(x))^2}$ se llama **integrando** y es una función de la variable independiente x . Los valores a y b se denominan **límites de integración**.

El valor de la integral definida es un número. Para calcularlo, es necesario encontrar una primitiva del integrando, es decir, una función cuya derivada sea el integrando, y finalmente se evalúa esta primitiva en los límites de integración a y b . Veamos un ejemplo para ilustrar estos conceptos.

Ejemplo 5

Estamos interesados en calcular la longitud de la recta $f(x) = x$ entre los puntos $x = 0$ y $x = 5$. Con este fin, calcularemos el valor de L siguiendo la fórmula anterior:

$$L = \int_0^5 \sqrt{1 + 1^2} dx = \sqrt{2} \int_0^5 1 dx = \sqrt{2} \cdot [x]_0^5 = 5\sqrt{2},$$

donde hemos utilizado el hecho de que x es una primitiva de 1 y la regla de Barrow

$$\int_0^5 1 dx = [x]_0^5 = 5 - 0 = 5.$$

En general, dada una función f definida sobre un intervalo acotado $[a, b]$, la forma general de la integral definida vendrá dada por

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

y representa el área delimitada por la función, las rectas verticales $x = a, x = b$ y el eje de abscisas.

La **cuadratura** o **integración numérica** consiste en dar fórmulas aproximadas para el cálculo de la integral $J(f)$ de f . Estas fórmulas pueden ser de gran utilidad cuando la integral no se puede calcular por métodos analíticos (por ejemplo, la función $f(x) = e^{-x^2}$ no tiene primitiva y es de suma importancia en probabilidad, ya que aparece en la distribución normal estándar), o bien

Lecturas complementarias

Para un estudio en profundidad de las integrales definidas, se recomienda leer la guía de *Integración: Integral de Riemann* (PID_00224050).

cuando no conviene usarlos porque resultan complejos de utilizar y nos conformamos con conocer $J(f)$ con una precisión dada.

2.2.1. Fórmulas de integración interpolatoria

Con el fin de calcular $J(f)$ de manera aproximada, en este subapartado estudiaremos dos métodos de integración numérica basados en el polinomio interpolador, como son la regla de Simpson y la regla de los trapecios. Más concretamente, aproximaremos f por un polinomio interpolador $p_m(x)$ en $m + 1$ abscisas del intervalo $[a, b]$ ($a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_m \leq b$) y calcularemos de manera exacta $J(p_m)$, obteniendo de este modo una aproximación a $J(f)$,

$$J(f) = \int_a^b f(x)dx \approx J(p_m) = \int_a^b p_m(x)dx. \quad (1)$$

Dado que las fórmulas que veremos se hallan mediante la integración de un polinomio interpolador de grado m , reciben el nombre de **fórmulas de integración interpolatoria de $m + 1$ abscisas**.

Tal y como vimos en el subapartado 1.2.1, el polinomio interpolador de Lagrange viene dado por

$$p_m(x) = \sum_{k=0}^m f_k l_k(x), \quad l_k(x) = \frac{\prod_{i \neq k} (x - x_i)}{\prod_{i \neq k} (x_k - x_i)}, k = 0, \dots, m.$$

Si integramos la fórmula de interpolación de Lagrange, obtenemos a partir de (1) la siguiente fórmula de integración numérica:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^m W_k f_k, \quad W_k = \int_a^b l_k(x)dx, k = 0, \dots, m. \quad (2)$$

Los coeficientes W_k , llamados **pesos** de la fórmula de integración, dependen del intervalo $[a, b]$ y de las abscisas x_0, \dots, x_m , pero no dependen de la función f . Vimos en el subapartado 1.1 que el polinomio interpolador $p_m(x)$ es único y por lo tanto la fórmula (2) es exacta para polinomios de grado más pequeño o igual que m . Este hecho nos proporciona una manera de calcular los pesos W_k sin necesidad de calcular las integrales de $l_k(x)$. Imponemos que la fórmula (2) sea exacta para los polinomios $1, x, x^2, \dots, x^m$ y se resuelve el sistema lineal resultante. Esta metodología de cálculo de los pesos se llama **método de los coeficientes indeterminados**.

Veamos un ejemplo de fórmula de integración numérica basada en el polinomio interpolador de segundo grado de una función $g(t)$ en las abscisas $-1, 0$ y 1 . En concreto, queremos hallar los pesos de integración w_{-1}, w_0 y w_1 de forma que la fórmula de integración numérica,

$$\int_{-1}^1 g(t)dt \approx w_{-1}g_{-1} + w_0g_0 + w_1g_1,$$

sea exacta para todos los polinomios de grado más pequeño o igual que 2, donde $g_{-1} = g(-1)$, $g_0 = g(0)$ y $g_1 = g(1)$.

Si imponemos la exactitud de la fórmula para $g(t) = 1, t, t^2$, se obtiene el sistema lineal

$$\left. \begin{array}{r} w_{-1} + w_0 + w_1 = 2 \\ -w_{-1} + w_1 = 0 \\ w_{-1} + w_1 = \frac{2}{3} \end{array} \right\},$$

cuya solución es $w_{-1} = w_1 = \frac{1}{3}$, $w_0 = \frac{4}{3}$, lo que da lugar a la fórmula de integración numérica

$$\int_{-1}^1 g(t)dt \approx \frac{1}{3}(g_{-1} + 4g_0 + g_1). \quad (3)$$

Esta fórmula se puede trasladar a cualquier intervalo $[a, b]$ mediante el cambio de variables $t = 2\frac{x-a}{b-a} - 1$ o, equivalentemente, $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}$, lo que da lugar a la llamada **fórmula de Simpson**,

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right], \quad (4)$$

que también se escribe como

$$\int_{c-h}^{c+h} f(x)dx \approx \frac{h}{3} [f(c-h) + 4f(c) + f(c+h)], \quad (5)$$

donde $c = \frac{a+b}{2}$ y $h = \frac{b-a}{2}$.

Es interesante señalar que sobre los polinomios de grado 3, las fórmulas (4) y (5) son también exactas, ya que si $g(t) = t^3$, entonces los dos miembros de (3) son nulos.

Ejemplo 6

Consideremos la integral

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x)dx = 1.$$

Si aproximamos el valor de la integral usando la fórmula de Simpson en el intervalo $[a, b] = [0, \frac{\pi}{2}]$, se obtiene

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x)dx \approx \frac{\frac{\pi}{2} - 0}{6} \left[\sin(0) + 4 \sin\left(\frac{0 + \frac{\pi}{2}}{2}\right) + \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \right] = \frac{\pi}{12} \left[4 \frac{\sqrt{2}}{2} + 1 \right] \approx 1,0023.$$

Si ahora consideramos el polinomio interpolador de primer grado en las abscisas $x = a$ y $x = b$, obtenemos la llamada **fórmula del trapecio**,

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)],$$

que también se escribe como

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2} [f(a) + f(b)],$$

donde $h = b - a$.

Observemos que, en este caso, el área delimitada por la función f , las rectas $x = a, x = b$ y el eje de abscisas, se aproxima por el área del trapecio de bases $f(a), f(b)$ y altura $b - a$.

Ejemplo 7

Consideremos de nuevo la integral del ejemplo 6,

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x)dx = 1.$$

Si aproximamos el valor de la integral usando la fórmula del trapecio en el intervalo $[a, b] = [0, \frac{\pi}{2}]$, se obtiene

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x)dx \approx \frac{\frac{\pi}{2} - 0}{2} [\sin(0) + \sin(\frac{\pi}{2})] = \frac{\pi}{4} \approx 0,7854.$$

Las fórmulas del trapecio y de Simpson son un caso particular de las llamadas **fórmulas cerradas de Newton-Cotes**, que se obtienen considerando $m + 1$ abscisas equidistantes en el intervalo $[a, b]$. Estas fórmulas son exactas incluso para todos los polinomios de grado $m + 1$ cuando m es par (o, de modo equivalente, cuando el número de abscisas es impar) tal y como sucedía con la fórmula de Simpson ($m = 2$).

Las fórmulas de integración numérica no se aplican normalmente sobre todo el intervalo $[a, b]$, sino sobre subintervalos de $[a, b]$, con lo que dan lugar a las **reglas compuestas de integración numérica**. Estas reglas de integración nos proporcionan mejores resultados en la aproximación.

Si dividimos el intervalo $[a, b]$ en M partes iguales y en cada una de ellas aplicamos la fórmula del trapecio, obtenemos la llamada **regla de los trapecios**,

$$\int_a^b f(x)dx \approx T(h) = \frac{h}{2} [f(a) + 2f(a+h) + 2f(a+2h) + \dots + 2f(b-h) + f(b)],$$

obtenida al descomponer la integral inicial como la suma de las integrales en las M partes de longitud $h = \frac{b-a}{M}$ en que se ha dividido el intervalo $[a, b]$,

$$J(f) = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{M-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx = \sum_{k=0}^{M-1} J_k(f),$$

donde $x_k = a + kh, k = 0, \dots, M$ y $J_k(f) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})]$.

Ejemplo 8

En el ejemplo 7 vimos que la integral del seno entre 0 y $\frac{\pi}{2}$, cuyo valor exacto es 1, podía calcularse de forma aproximada mediante la fórmula del trapecio, obteniendo

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x)dx \approx 0,7854.$$

Vamos a aplicar ahora la regla de los trapecios compuesta al cálculo de la misma integral dividiendo el intervalo de integración $[0, \frac{\pi}{2}]$ en cuatro partes iguales, es decir, consideraremos $M = 4$. De esta forma, $h = \frac{\pi}{8}$ y, por tanto,

$$T\left(\frac{\pi}{8}\right) = \frac{\pi}{16} \left[\sin(0) + 2 \sin\left(\frac{\pi}{8}\right) + 2 \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) + 2 \sin\left(\frac{3\pi}{8}\right) + \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \right] \approx 0,9871.$$

Podemos observar que si usamos la regla de los trapecios el resultado aproximado se acerca más al valor exacto que si utilizamos la fórmula del trapecio y, por lo tanto, el error que cometemos en el cálculo es menor.

Si dividimos ahora $[a, b]$ en $2M$ partes iguales y aplicamos en cada intervalo de longitud $h = \frac{b-a}{2M}$ la fórmula de Simpson, obtenemos la **regla de Simpson**,

$$\int_a^b f(x)dx \approx S(h),$$

donde

$$S(h) = \frac{h}{3} [f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) \cdots + 2f(b-2h) + 4f(b-h) + f(b)].$$

Ejemplo 9

En el ejemplo 6 vimos que la integral del seno entre 0 y $\frac{\pi}{2}$, cuyo valor exacto es 1, podía calcularse de forma aproximada mediante la fórmula de Simpson, obteniendo

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x)dx \approx 1,0023.$$

Vamos a aplicar ahora la regla de Simpson compuesta al cálculo de la misma integral dividiendo el intervalo de integración $[0, \frac{\pi}{2}]$ en cuatro partes iguales, es decir, consideraremos $M = 2$. De esta forma, $h = \frac{\pi}{8}$ y, por tanto,

$$S\left(\frac{\pi}{8}\right) = \frac{\pi}{24} \left[\sin(0) + 4 \sin\left(\frac{\pi}{8}\right) + 2 \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) + 4 \sin\left(\frac{3\pi}{8}\right) + \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \right] \approx 1,0001.$$

Podemos observar que si empleamos la regla de Simpson, el resultado aproximado se acerca más al valor exacto que si usamos la fórmula de Simpson y, por lo tanto, el error que cometemos en el cálculo es menor.

En este subapartado hemos estudiado fórmulas de integración interpolatoria para dos abscisas (fórmula del trapecio) y para tres abscisas (fórmula de Simpson). En general, las fórmulas de integración interpolatoria de $m + 1$ abscisas x_0, x_1, \dots, x_m , obtenidas integrando el polinomio interpolador en estas abscisas, son exactas para los polinomios de grado más pequeño o igual que m . Esto sucede para cualquier elección que hagamos de las abscisas dentro del intervalo de integración. Una elección adecuada de estas $m + 1$ abscisas podría proporcionar fórmulas de integración numérica de $m + 1$ abscisas, exactas para polinomios de grado más pequeño o igual que $2m + 1$. Estas fórmulas reciben el nombre de **fórmulas gaussianas**.

2.2.2. Método de extrapolación de Romberg

La **integración de Romberg** es una extensión relativamente directa de la regla de los trapecios, que consiste en usar iteraciones refinadas de este método para explotar su comportamiento en el límite y producir una estimación de la integral.

Sea $T(h)$ el valor de la integral que aproxima a

$$J(f) = \int_a^b f(x) dx,$$

mediante subintervalos de longitud $h = \frac{b-a}{M}$ usando la regla de los trapecios, tal y como hemos visto en el subapartado anterior. El método de **extrapolación de Romberg** combina dos aproximaciones de integración numérica para obtener un tercer valor más exacto,

$$J(f) \approx \frac{4T(h/2) - T(h)}{3}. \quad (6)$$

Para entender el método, podemos pensar que se trabaja en distintos niveles de aproximación. En un primer nivel, llamado **nivel 0**, aplicamos la regla de los trapecios duplicando cada vez el número de subintervalos. De esta forma, empezaremos con un subintervalo, a continuación con dos, luego con cuatro y así sucesivamente. Posteriormente, pasaremos al **nivel 1** de aproximación y es en este instante cuando usaremos la fórmula (6), tomando las parejas contiguas del nivel anterior. Dado que la relación (6) es recursiva, podemos refinar la aproximación incluyendo más niveles de aproximación. En general,

$$J(f) \approx I_{j,k} = \frac{4^k I_{j,k-1} - I_{j-1,k-1}}{4^k - 1},$$

Lecturas complementarias

Podéis ampliar las fórmulas gaussianas en el capítulo 4 de A. Delshams; A. Benseny; A. Aubanell (1998). *Útiles básicos de cálculo numérico*. Barcelona: Servei de Publicacions de la Universitat Autònoma de Barcelona.

donde $I_{0,0} = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$ es la fórmula del trapecio, $I_{j,0}$ es la regla de los trapecios con $h = \frac{b-a}{2^j}$ y k representa el nivel de aproximación. Usando estas funciones de referencia, $I_{j,k}$ puede hallarse iterativamente como una matriz triangular inferior donde cada elemento se calcula con el valor de su izquierda y el de encima de su izquierda. Para entender mejor el algoritmo, podemos seguir el siguiente esquema.

El número de niveles de aproximación que se alcanzan depende de las aproximaciones que se hicieron en el nivel 0, es decir, si empezamos con n aproximaciones en el nivel 0, entonces podremos llegar hasta el nivel $n-1$, completando de esta forma n niveles de aproximación.

Nivel 0 (regla de los trapecios: $I_{j,0}$) **Nivel 1** ($I_{j,1}$) **Nivel 2** ($I_{j,2}$) ...

$$I_{0,0} = T(h), h = b - a$$

$$I_{1,0} = T(h), h = \frac{b-a}{2} \qquad I_{1,1} = \frac{4I_{1,0} - I_{0,0}}{3}$$

$$I_{2,0} = T(h), h = \frac{b-a}{4} \qquad I_{2,1} = \frac{4I_{2,0} - I_{1,0}}{3} \qquad I_{2,2} = \frac{16I_{2,1} - I_{1,1}}{15}$$

$$I_{3,0} = T(h), h = \frac{b-a}{8} \qquad I_{3,1} = \frac{4I_{3,0} - I_{2,0}}{3} \qquad I_{3,2} = \frac{16I_{3,1} - I_{2,1}}{15}$$

$$\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots$$

Ejemplo 10

Usaremos el método de Romberg para aproximar la integral

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

considerando tres niveles de aproximación en total. Para ello, empezaremos calculando tres integrales de nivel 0, es decir, aplicaremos la regla de los trapecios para $h = 1, h = \frac{1}{2}$ y $h = \frac{1}{4}$. Si hacemos un esquema como el anterior, nos queda

Nivel 0	Nivel 1	Nivel 2
$I_{0,0} = 1,859140914$		
$I_{1,0} = 1,571583165$	$I_{1,1} = 1,475730582$	
$I_{2,0} = 1,490678862$	$I_{2,1} = 1,463710761$	$I_{2,2} = 1,46290944$

De este modo, concluiremos que el valor de la aproximación mediante el método de Romberg a la integral dada es

$$\int_0^1 e^{x^2} \approx 1,46290944.$$

2.2.3. Métodos de Monte Carlo

Los métodos de Monte Carlo han sido utilizados desde hace muchos años en diversas áreas de la matemática aplicada. Los economistas usan este tipo de métodos para modelizar resultados potenciales de la economía, mientras que los físicos los usan para determinar las posibles trayectorias de ciertos procesos estocásticos. Las finanzas, la ingeniería y muchas otras disciplinas han adoptado métodos de Monte Carlo para comprender mejor ciertos procesos aleatorios. El nombre **Monte Carlo** proviene de Mónaco, famoso por sus casinos y apuestas. El nombre ilustra la importancia de la aleatoriedad, puesto que los algoritmos de Monte Carlo usan generadores de números aleatorios.

Los métodos de Monte Carlo pueden utilizarse también en integración numérica para cualquier número arbitrario de dimensiones. La integración de Monte Carlo usa muestreo aleatorio de una función para calcular numéricamente una estimación de su integral sobre un dominio dado. Supongamos que queremos calcular la integral de dimensión uno siguiente:

$$J(f) = \int_a^b f(x)dx.$$

Podemos interpretar esta integral en términos de la esperanza matemática de la variable aleatoria $f(U)$, que escribiremos $E(f(U))$, donde U es una variable aleatoria que sigue una distribución uniforme en $[a,b]$, puesto que se cumple

$$E(f(U)) = \int_a^b f(x) \cdot \frac{1}{b-a} dx = \frac{1}{b-a} \int_a^b f(x)dx,$$

dado que la densidad de probabilidad de una distribución uniforme en $[a,b]$ toma el valor $\frac{1}{b-a}$ para todo punto de $[a,b]$ y vale cero fuera de ese intervalo. Por lo tanto, hemos establecido la relación

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)E(f(U))$$

entre el valor esperado y la integral. Sabemos que, por la llamada **ley fuerte de los grandes números**, el valor esperado de una variable aleatoria puede estimarse promediando muestras de esa variable aleatoria.

Por lo tanto, esta integral puede aproximarse promediando muestras de la función f evaluada en puntos aleatorios uniformemente distribuidos dentro del dominio de integración. Dado un conjunto de N variables aleatorias uniformes U_i en $[a,b]$, el estimador de Monte Carlo para aproximar $J(f)$ es

$$J(f) = \int_a^b f(x)dx \approx J_N(f) = (b-a) \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N f(U_i),$$

Lecturas complementarias

Se recomienda leer el apartado 4 de la guía de *Variables aleatorias* (P08/75057/02305) para entender el concepto de esperanza matemática de una variable aleatoria continua.

donde la variable aleatoria U_i puede ser construida a partir de una variable aleatoria \tilde{U}_i uniforme en $[0,1]$ haciendo $U_i = a + \tilde{U}_i(b-a)$.

La forma práctica de proceder para calcular la integral será la siguiente:

- 1) Generamos N números aleatorios \tilde{U}_i que sigan una distribución uniforme en $[0,1]$ (en lenguaje R el comando adecuado es `runif(N)`). Cuanto mayor sea N , mejor será el valor aproximado de la integral.
- 2) Calculamos $U_i = a + \tilde{U}_i(b-a)$ usando los \tilde{U}_i que acabamos de generar.
- 3) Calculamos $f(U_1), \dots, f(U_N)$ con los U_i del paso anterior y con la función $f(x)$.
- 4) Finalmente, aplicamos la fórmula $J_N(f) = (b-a) \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N f(U_i)$.

Ejemplo 11

Supongamos que queremos calcular una aproximación a la integral

$$\int_0^1 5x^4 dx = 1.$$

Usaremos un método de integración de Monte Carlo con N puntos y haremos variar la N para observar cómo el error se va reduciendo a medida que aumenta N . Los resultados obtenidos son los siguientes:

Tabla 2

N	$J_N(f)$
10^2	0,80098
10^4	1,00247
10^6	1,00031

Aproximación de la integral para varios valores de N

Observemos que en el ejemplo anterior, a pesar de usar un número elevado de puntos, la estimación es buena solo para unos pocos dígitos. Si comparamos con los métodos de integración numérica vistos hasta ahora, los métodos de Monte Carlo son extremadamente caros desde un punto de vista computacional para obtener un resultado de baja calidad en la aproximación. La ventaja de los métodos de Monte Carlo, además de la sencillez en la implementación, radica en su habilidad para tratar integrales múltiples.

Lecturas complementarias

J. P. Howard (2017). *Computational methods for numerical analysis with R*. Nueva York: Chapman & Hall/CRC.

Bibliografía

Delshams, A.; Benseny, A.; Aubanell, A. (1998). *Útiles básicos de cálculo numérico*. Barcelona: Servei de Publicacions de la Universitat Autònoma de Barcelona.

Howard, J. P. (2017). *Computational methods for numerical analysis with R*. Nueva York: Chapman & Hall/CRC.

