Tema 3

Introducción a la interpolación y a la integración numérica

3.1. Introducción a la interpolación

Un problema que se presenta con frecuencia en las ciencias experimentales y en ingeniería es tratar de construir una función (denominada "función interpolante") de la que se conoce una serie de datos (denominados "datos de interpolación"). Estos datos pueden ser fruto de las observaciones realizadas en un determinado experimento en el que se relacionan dos o más variables e involucran valores de una función y/o de sus derivadas. El objetivo será determinar una función que verifique estos datos y que además sea fácil de construir y manipular. Por su sencillez y operatividad los polinomios se usan frecuentemente como funciones interpolantes.

3.1.1. Generalidades

Un problema de interpolación en general puede enunciarse de la siguiente forma:

> Dado un conjunto de datos, generalmente valores de una función y/o sus derivadas en determinados puntos x_i, $i = 0, 1, \cdots, n$, que llamaremos nodos, nuestro objetivo es construir otra función que coincida con la función dada en los datos de interpolación.

Según el tipo de los datos de interpolación, podemos considerar los siguientes tipos de interpolación:

- Interpolación de Lagrange: Conocemos los valores de la función $f(x_i)$ en $n+1$ puntos distintos, x_i, $i = 0, 1, \cdots, n$
- Interpolación de Taylor: Los datos son el valor de la función y sus derivadas sucesivas en un punto x_0 hasta el orden n.

$$f^{i)}(x_0), \qquad i = 0, 1, \cdots, n.$$

- Interpolación de Hermite: Disponemos de los valores de una función y de algunas de sus derivadas sucesivas en determinados puntos. Por ejemplo, $f(x_i)$ y $f'(x_i)$ en $n+1$ puntos distintos, x_i, $i = 0, 1, \cdots, n$

En general, las funciones interpolantes forman un espacio vectorial de dimensión finita, es decir son del tipo:

$$\psi(x) = a_0\,\psi_0(x) + a_1\,\psi_1(x) + \cdots + a_n\,\psi_n(x),$$

donde $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$, $\cdots$, $\psi_n(x)$, son funciones dadas que forman base del espacio vectorial correspondiente y a_i, $i = 0, 1, \cdots, n$ números reales a determinar.

Dependiendo del tipo de funciones que utilicemos como funciones interpolantes, la interpolación se llamará polinómica, racional, trigonométrica, spline polinomial,... Entre las diferentes funciones interpolantes, por su sencillez y facilidad para operar, los polinomios son los utilizados con mayor frecuencia en problemas de interpolación, en este caso las funciones de base son $\psi_i(x) = x^i$, $i = 0, 1, \cdots, n$. Sin embargo, no siempre dan una respuesta satisfactoria, especialmente si la solución del problema requiere el uso de polinomios de alto grado o, por ejemplo, si se observa un comportamiento periódico en los datos de interpolación.

Por simplicidad, nos centraremos en este Tema en el estudio del caso particular de la interpolación polinómica de Langrange.

3.1.2. La interpolación de Lagrange

El problema de la interpolación polinómica de Lagrange consiste en lo siguiente:

> Conocidos los valores de una función f en $n+1$ puntos distintos x_i, $i = 0, 1, \cdots, n$ de un intervalo $[a, b]$, nos planteamos obtener un polinomio P_n de grado no superior a n, que coincida con la función f en estos $n+1$ puntos, es decir,
>
> $$P_n(x_i) = f(x_i), \qquad \text{para} \quad i = 0, 1, \cdots, n.$$

El polinomio P_n buscado forma parte del conjunto de los polinomio de grado menor o igual que n y, por tanto, $P_n(x)$ será de la forma

$$P_n(x) = a_n\,x^n + a_{n-1}\,x^{n-1} + \cdots + a_1\,x + a_0,$$

y, para determinarla, habrá que hallar los $n+1$ coeficientes reales a_0, a_1, $\cdots$, a_n. En el caso que a_n sea no nulo, diremos que $P_n(x)$ tiene exactamente grado n.

La existencia y unicidad del polinomio de interpolación $P_n(x)$ se prueba en el siguiente resultado, además se determina una primera forma de construirlo.

Teorema 3.1 ***(Formula de interpolación de Lagrange)***
Sean $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ y $\{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n\}$, $n+1$ puntos distintos del intervalo $[a, b]$. Entonces, existe un único polinomio $P_n(x)$ de grado menor o igual que n, que verifica

$$P_n(x_i) = f(x_i), \qquad i = 0, 1, \cdots, n.$$

A este polinomio se le denomina polinomio de interpolación de f en los nodos $\{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n\}$ y viene dado por

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, L_i(x), \tag{1.1}$$

donde, para cada $i \in \{0, 1, \cdots, n\}$,

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Demostración.-

1. <u>Existencia:</u> Teniendo en cuenta que para cada $i \in \{0, 1, \cdots, n\}$,

   $$L_i(x) = \frac{x - x_0}{x_i - x_0}\,\frac{x - x_1}{x_i - x_1} \cdots \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}\,\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} \cdots \frac{x - x_n}{x_i - x_n},$$

   es inmediato comprobar que, para cada $i \in \{0, 1, \cdots, n\}$, $L_i(x)$ es un polinomio de grado exactamente n y verifica que $L_i(x_j) = \delta_{ij}$ para cada $j \in \{0, 1, \cdots, n\}$. En consecuencia, $P_n(x)$ es un polinomio de grado n como máximo y $P_n(x_j) = f(x_j)$, para cada $j \in \{0, 1, \cdots, n\}$.

2. <u>Unicidad:</u> Supongamos que existen $P_n(x)$ y $Q_n(x)$ dos polinomios de grado menor o igual que n, que verifican $P_n(x_i) = f(x_i) = Q_n(x_i)$, para cada $i = 0, 1, \cdots, n$. Entonces, el polinomio $D_n(x) = P_n(x) - Q_n(x)$ es también un polinomio de grado menor o igual que n y satisface $D_n(x_i) = P_n(x_i) - Q_n(x_i) = 0$, para cada $i = 0, 1, \cdots, n$.

   Es decir, $D_n(x)$ es un polinomio de grado menor o igual que n con $n + 1$ raíces distintas, por tanto, por el teorema Fundamental del Álgebra, $D_n(x) \equiv 0$ de donde se concluye que $P_n(x) \equiv Q_n(x)$.

$\diamond$

Observaciones 3.1

- *La expresión (1.1) se conoce como fórmula de Lagrange del polinomio de interpolación. El Teorema 3.1 proporciona un método constructivo para obtener el polinomio de interpolación $P_n(x)$ mediante la fórmula (1.1).*

  Ejemplo.- Obtener el polinomio que interpola a los valores $(-1, 3)$, $(2, 1)$, $(3, 2)$, $(4, 4)$.

- *Si algún dato es* $f(x_j) = 0$*, no hace falta calcular* $L_j(x)$.
- *Los polinomios* $L_k(x)$ *sólo dependen de los nodos de interpolación* $\{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$*. De modo que, una vez calculado cada* $L_k(x)$ *se construyen los polinomios de interpolación poniendo los* $f(x_k)$ *como coeficientes de una combinación lineal, lo cual es una ventaja si queremos resolver varios problemas de interpolación con los mismos nodos* x_k*. En este sentido,* $\{L_0(x), L_1(x), \cdots, L_n(x)\}$ *es la base del espacio vectorial de los polinomios de interpolación asociados a los nodos* $\{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$.
- *No obstante, la fórmula de Lagrange (1.1) tiene el inconveniente de que hay que realizar numerosos cálculos y sobre todo que si añadimos un dato más de interpolación, hemos de volver a calcular todos los polinomios* $L_k(x)$.

Notación 3.1 *Dados* $n+1$ *puntos distintos* $\{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$ *denotaremos por*

$$\Pi_n(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n).$$

3.1.3. Error de interpolación

Una vez calculado el polinomio de interpolación, pretendemos ahora usarlo para estimar el valor de la función f en cualquier punto del intervalo $[a, b]$. Si el punto elegido coincide con alguno de los nodos de interpolación $\{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$, entonces $f(x_i) = P_n(x_i)$. Sin embargo, si tomamos un punto $x \in [a, b]$ distinto de los nodos de interpolación, en general $f(x) \neq P_n(x)$. Se produce entonces un error que llamaremos error de interpolación que denotaremos por

$$E_n(x) = f(x) - P_n(x).$$

Nuestro objetivo en esta sección es estimar este error. Para ello, notemos en primer lugar que sin hipótesis adicionales, no podemos decir nada acerca de esta cantidad pues podemos cambiar la función f en puntos que no sean los de interpolación sin que cambie el polinomio. Además, si sólo se conoce los valores de f en algunos puntos, sin llegar a tener su expresión analítica, entonces, es imposible estimar el error que se comete con el polinomio de interpolación.

No obstante, vamos a probar que cuando la función f es suficientemente regular, podemos precisar el error que se comete en cada punto de interpolación en término de las derivadas de f.

Teorema 3.2 *Sean* $f \in C^{n+1}([a,b])$, $\{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$, $n+1$ *puntos distintos del intervalo* $[a,b]$ *y* P_n *el polinomio de interpolación de* f *en* $\{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$*. Entonces, para cada* $x \in [a,b]$ *existe* $\xi_x \in I_x$ *(con* I_x *el menor intervalo cerrado que contiene a* $\{x_0, x_1, \cdots, x_n, x\}$*), tal que*

$$E_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\Pi_n(x). \tag{1.2}$$

Demostración.- Sea $x \in [a,b]$ cualquiera, entonces pueden presentarse dos casos:

1. Si $x = x_i$ para algún $i \in \{0, 1, \cdots, n\}$, entonces el resultado es trivial, pues $f(x_i) = P_n(x_i)$ y $\Pi_n(x_i) = 0$.

2. Si $x \neq x_i$ para todo $i \in \{0, 1, \cdots, n\}$, entonces, consideramos la función $F : [a,b] \to \mathbb{R}$ definida, para cada $y \in [a,b]$, por

$$F(y) = [f(y) - P_n(y)]\,\Pi_n(x) - [f(x) - P_n(x)]\,\Pi_n(y),$$

que verifica $F \in C^{n+1}([a,b])$,

$$F(x_i) = [f(x_i) - P_n(x_i)]\,\Pi_n(x) - [f(x) - P_n(x)]\,\Pi_n(x_i) = 0,$$

para cada $i \in \{0, 1, \cdots, n\}$ y

$$F(x) = [f(x) - P_n(x)]\,\Pi_n(x) - [f(x) - P_n(x)]\,\Pi_n(x) = 0.$$

Es decir, F es una función de clase $n+1$ en un intervalo donde, además, posee $n+2$ raíces reales distintas, entonces, por el Teorema de Rolle, la función F' es de clase n en I_x y tiene al menos $n+1$ raíces en I_x, repitiendo este razonamiento llegaríamos a que $F^{n+1)}$ es una función continua en I_x y posee al menos una raíz $\xi_x \in I_x$. De aquí, como para cada $y \in [a,b]$, es

$$\begin{aligned} F^{n+1)}(y) &= [f^{n+1)}(y) - P_n^{n+1)}(y)]\,\Pi_n(x) - [f(x) - P_n(x)]\,\Pi_n^{n+1)}(y) \\ &= f^{n+1)}(y)\,\Pi_n(x) - [f(x) - P_n(x)]\,(n+1)! \end{aligned}$$

usando que P_n es un polinomio de grado menor o igual que n y que Π_n es un polinomio mónico (de coeficiente líder igual a 1) de grado exacto $n+1$. En particular, se deduce que

$$0 = F^{n+1)}(\xi_x) = f^{n+1)}(\xi_x)\,\Pi_n(x) - [f(x) - P_n(x)]\,(n+1)!,$$

de donde se concluye el resultado.

$\diamond$

Observaciones 3.2

- *La expresión (1.2) permite obtener una cota del error de interpolación, pues, para cada $x \in [a,b]$, es*

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{|\Pi_n(x)|}{(n+1)!}\,\|f^{n+1)}\|_{L^\infty(a,b)},$$

siendo

$$\|g\|_{L^\infty(a,b)} = \max_{a \leq x \leq b} |g(x)|,$$

la norma del máximo de una función continua $g : [a,b] \to \mathbb{R}$.

- *Se prueba que la función* $g : [a, b] \to \mathbb{R}$ *definida, para cada* $x \in [a, b]$, *por*

$$g(x) = f^{n+1)}(\xi_x),$$

es continua en $[a, b]$.

- *La estimación del error precedente es óptima en el sentido de que existe una función para la que se da la igualdad. En efecto, si consideramos la función*

$$f(x) = \Pi_n(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i),$$

se verifica que $P_n(x) \equiv 0$ *y* $f^{n+1)}(x) = (n+1)!$ *en cada* $x \in [a, b]$. *En consecuencia,*

$$|f(x) - P_n(x)| = |\Pi_n(x)| = \frac{|\Pi_n(x)|}{(n+1)!} \|f^{n+1)}\|_{L^\infty(a,b)}.$$

3.1.4. Fórmula de interpolación de Newton

En esta sección vamos a estudiar otra forma de calcular el polinomio de interpolación $P_n(x)$ que no presenta los inconvenientes de la fórmula de Lagrange. Esta nueva forma es la denominada fórmula de interpolación de Newton para el polinomio de interpolación de Lagrange, que nos va a permitir una representación del polinomio de interpolación en términos de "diferencias"(ya sean divididas o finitas) de los valores de la función en los puntos de interpolación. Comencemos con la definición de esta "diferencias"

Definición 3.1 *Sean* $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ *y* $\{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$, $n+1$ *puntos distintos del intervalo* $[a, b]$. *Para cada* $i \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ *sean*

$$\begin{cases} f[x_i] = f(x_i), \\ f[x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+m}] = \dfrac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, \cdots, x_{i+m}] - f[x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+m-1}]}{x_{i+m} - x_i}. \end{cases}$$

$f[x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+m}]$ *se denomina diferencia dividida de orden* $m \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ *de* f *en el punto* x_i. *Análogamente, sean*

$$\begin{cases} \Delta^0 f(x_i) = f(x_i), \\ \Delta^m f(x_i) = \Delta^{m-1} f(x_{i+1}) - \Delta^{m-1} f(x_i). \end{cases}$$

$\Delta^m f(x_i)$ *se denomina diferencia finita de orden* $m \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ *de* f *en el punto* x_i.

Las diferencias divididas y las finitas están relacionadas entre si, en el caso que los nodos de interpolación estén uniformemente espaciados, como muestra el siguiente resultado.

Teorema 3.3 *Sean $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ y $\{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$, $n+1$ puntos uniformemente espaciados del intervalo $[a,b]$, es decir, existe $h > 0$ tal que, para cada $i \in \{0,1,\cdots,n\}$, es $x_i = x_0 + i\,h$. Entonces,*

$$f\,[x_i,\, x_{i+1},\, \cdots,\, x_{i+m}] = \frac{\Delta^m f\,(x_i)}{m!\,h^m}.$$

Demostración.- Lo mostramos por inducción sobre el orden m de la diferencias:

1. Para las diferencias de orden $m=1$, como $x_{i+1} = x_i + h$ entonces

$$f\,[x_i,\, x_{i+1}] = \frac{f\,(x_{i+1}) - f\,(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{f\,(x_{i+1}) - f\,(x_i)}{h} = \frac{\Delta f\,(x_i)}{h}.$$

2. Supongamos cierto el resultado para las diferencias de orden $m-1$ y lo probamos para las de orden m. Por definición se tiene que

$$f\,[x_i,\, x_{i+1},\, \cdots,\, x_{i+m}] = \frac{f\,[x_{i+1},\, x_{i+2},\, \cdots,\, x_{i+m}] - f\,[x_i,\, x_{i+1},\, \cdots,\, x_{i+m-1}]}{x_{i+m} - x_i}.$$

Como $x_{i+m} - x_i = m\,h$, aplicando la hipótesis de inducción podemos escribir

$$f\,[x_i,\, x_{i+1},\, \cdots,\, x_{i+m}] = \frac{1}{m\,h}\left(\frac{\Delta^{m-1} f\,(x_{i+1})}{(m-1)!\,h^{m-1}} - \frac{\Delta^{m-1} f\,(x_i)}{(m-1)!\,h^{m-1}}\right) = \frac{\Delta^m f\,(x_i)}{m!\,h^m}$$

◇

Estamos ya en condiciones de obtener la fórmula de Newton del polinomio de interpolación.

Teorema 3.4 ***(Formula de interpolación de Newton)***
Sean $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ y $\{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n\}$, $n+1$ puntos distintos del intervalo $[a,b]$. Entonces, el polinomio de interpolación de f en los nodos $\{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n\}$ viene dado por

$$\begin{aligned} P_n\,(x) &= \sum_{i=0}^{n} f\,[x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_i]\,(x - x_0)\,(x - x_1)\,\cdots\,(x - x_{i-1}) \\ &= f\,(x_0) + f\,[x_0,\, x_1]\,(x - x_0) + f\,[x_0,\, x_1,\, x_2]\,(x - x_0)\,(x - x_1) \\ &\quad + \cdots + f\,[x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n]\,(x - x_0)\,(x - x_1)\,\cdots\,(x - x_{n-1}). \end{aligned} \tag{1.3}$$

Además, si $x \notin \{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n\}$, entonces

$$E_n\,(x) = f\,(x) - P_n\,(x) = f\,[x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n,\, x]\,\Pi_n\,(x). \tag{1.4}$$

Demostración.- Lo probaremos por inducción sobre el grado del polinomio:

1. Para $n = 0$, $P_0(x) = f(x_0)$ es el polinomio de interpolación de f en x_0. Además, para todo punto $x \neq x_0$, se verifica que

$$f[x_0, x] = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0},$$

por lo que

$$f(x) = f(x_0) + f[x_0, x](x - x_0) = P_0(x) + f[x_0, x]\,\Pi_0(x).$$

2. Suponemos cierto el resultado para $n-1$, es decir, que

$$\begin{aligned} P_{n-1}(x) &= f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \cdots \\ &\quad + f[x_0, x_1, \cdots, x_{n-1}](x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-2}), \end{aligned}$$

es el polinomio de interpolación de f en los nodos $\{x_0, x_1, \cdots, x_{n-1}\}$ y

$$f(x) - P_{n-1}(x) = f[x_0, x_1, \cdots, x_{n-1}, x]\,\Pi_{n-1}(x), \tag{1.5}$$

para $x \notin \{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$.

Lo probamos ahora para n. Para ello, consideramos el polinomio

$$\begin{aligned} Q(x) &= f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \cdots \\ &\quad + f[x_0, x_1, \cdots, x_n](x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1}), \end{aligned}$$

que, por hipótesis de inducción, podemos expresarlo como

$$Q(x) = P_{n-1}(x) + \Pi_{n-1}(x)\,f[x_0, x_1, \cdots, x_n].$$

Obviamente, por construcción, $Q(x)$ es un polinomio de grado menor o igual que n que interpola a f en $\{x_0, x_1, \cdots, x_{n-1}\}$ y, además $Q(x)$ interpola a f en x_n por que

$$Q(x_n) = P_{n-1}(x_n) + \Pi_{n-1}(x_n)\,f[x_0, x_1, \cdots, x_n] = f(x_n).$$

donde esta última igualdad se obtiene aplicando (1.5) en el punto $x = x_n$. En consecuencia, $Q \equiv P_n$ polinomio de interpolación de f en $\{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$.

Por otra parte, para todo punto $x \notin \{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$ se verifica que

$$\begin{aligned} f[x_0, x_1, \cdots, x_n, x] &= f[x_n, x_{n-1}, \cdots, x_0, x] \\ &= \frac{f[x_{n-1}, x_{n-2}, \cdots, x_0, x] - f[x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1, x_0]}{x - x_n} \\ &= \frac{f[x_0, x_1, \cdots, x_{n-1}, x] - f[x_0, x_1, \cdots, x_{n-1}, x_n]}{x - x_n}, \end{aligned}$$

de donde

$$f\,[x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_{n-1},\, x] \;=\; f\,[x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_{n-1},\, x_n] \;+\; (x \,-\, x_n)\, f\,[x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n,\, x]$$

Sustituyendo este valor en (1.5) se obtiene que

$$f\,(x) \,-\, P_{n-1}\,(x) \;=\; \Pi_{n-1}\,(x)\,(f\,[x_0,\, \cdots,\, x_{n-1},\, x_n] \,+\, (x \,-\, x_n)\, f\,[x_0,\, \cdots,\, x_n,\, x])$$

para $x \notin \{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n\}$, es decir,

$$\begin{aligned} f\,(x) &= P_{n-1}\,(x) \,+\, \Pi_{n-1}\,(x)\, f\,[x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_{n-1},\, x_n] \\ &\quad + \Pi_{n-1}\,(x)\,(x \,-\, x_n)\, f\,[x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n,\, x] \\ &= P_n\,(x) \,+\, \Pi_n\,(x)\, f\,[x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n,\, x], \end{aligned}$$

de donde se sigue (1.4). $\diamond$

Observaciones 3.3

- *Si en particular los puntos* $\{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n\}$ *están uniformemente espaciados en el intervalo* $[a, b]$ *con paso* $h > 0$*, entonces el polinomio de interpolación de* f *en* $\{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n\}$*, viene dado por:*

$$\begin{aligned} P_n\,(x) &= \sum_{i=0}^{n} (x \,-\, x_0)\,(x \,-\, x_1)\,\cdots\,(x \,-\, x_{i-1})\,\frac{\Delta^i\, f\,(x_0)}{i!\, h^i} \\ &= f\,(x_0) \,+\, (x \,-\, x_0)\,\frac{\Delta\, f\,(x_0)}{h} \,+\, (x \,-\, x_0)\,(x \,-\, x_1)\,\frac{\Delta^2\, f\,(x_0)}{2\, h^2} \\ &\quad + \cdots \,+\, (x \,-\, x_0)\,(x \,-\, x_1)\,\cdots\,(x \,-\, x_{n-1})\,\frac{\Delta^n\, f\,(x_0)}{n!\, h^n}. \end{aligned}$$

- *El cálculo de las diferencias divididas para construir el polinomio de interpolación de* f *en* $\{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n\}$ *se realizan mediante el algoritmo que muestra la siguiente tabla:*

$f\,(x_0)$	$f\,[x_0,\, x_1]$	$\cdots$	$f\,[x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_{n-1}]$	$f\,[x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n]$
$f\,(x_1)$	$f\,[x_1,\, x_2]$	$\cdots$	$f\,[x_1,\, x_2,\, \cdots,\, x_n]$	
$f\,(x_2)$	$f\,[x_2,\, x_3]$	$\cdots$		
$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$		
$f\,(x_{n-2})$	$f\,[x_{n-2},\, x_{n-1}]$			
$f\,(x_{n-1})$	$f\,[x_{n-1},\, x_n]$			
$f\,(x_n)$				

El cálculo de las diferencias finitas es similar.

La propiedad más importante de la fórmula de interpolación de Newton es que permite obtener el polinomio de interpolación de f en ciertos puntos, a partir del polinomio de interpolación en subconjuntos de ellos. En particular,

Corolario 3.1 *Sean $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ y $\{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n\}$, $n+1$ puntos distintos del intervalo $[a,b]$. Sea P_n el polinomio de interpolación de f en $\{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n\}$ y x_{n+1} un punto de $[a,b]$ tal que $x_{n+1} \notin \{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n\}$, entonces*

$$P_{n+1}(x) = P_n(x) + \Pi_n(x)\, f[x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n,\, x_{n+1}],$$

es el polinomio de interpolación de f en $\{x_0,\, x_1,\, \cdots,\, x_n,\, x_{n+1}\}$. $\diamond$

3.2. Introducción a la integración numérica

Uno de los problemas matemáticos más antiguos es el del cálculo del área que encierra una curva. Como sabemos, la regla de Barrow resuelve el problema de calcular la integral de una función en un intervalo $[a,b]$, mediante la fórmula

$$\int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a),$$

siendo F una primitiva de la función f en el intervalo $[a,b]$, es decir, $F'(x) = f(x)$, $\forall\, x \in [a,b]$. Sin embargo, en muchos casos esto no es posible, dado que:

- Para ciertas funciones no es posible calcular dicha primitiva, a pesar de saber que existe. Por ejemplo, para las funciones

  $$f(x) = e^{x^2}, \qquad f(x) = \frac{\operatorname{sen} x}{x}, \qquad f(x) = \sqrt{x^5 + 1},$$

  no es posible encontrar una primitiva expresable en término de funciones elementales.

- En muchos de los problemas que se plantean, a la hora de integrar funciones, están relacionados con funciones definidas en forma de tabla de valores o gráfica y no se conoce una expresión analítica de $f(x)$.

En ambos casos se precisa de fórmulas de integración numérica (también llamadas fórmulas de cuadratura), que nos van a permitir calcular un valor aproximado de la integral en la forma

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

donde los x_i, $i = 0,\, 1,\, \cdots,\, n$, son puntos del intervalo $[a,\, b]$ y los coeficientes a_i, $i = 0,\, 1,\, \cdots,\, n$, son números reales elegidos convenientemente.

3.2.1. Fórmulas de integración de tipo interpolatorio

Para obtener fórmulas de integración numérica seguiremos, básicamente, el procedimiento basado en calcular el polinomio de interpolación de la función f en algunos puntos del intervalo $[a,\ b]$ y aproximar el valor de la integral de la función por el valor de la integral del polinomio de interpolación. En concreto,

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \int_a^b P_n(x)\,dx,$$

donde

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\,L_i(x), \quad x \in [a,\ b]$$

es el polinomio de interpolación de f en los $n+1$ puntos distintos, x_i, $i = 0,\ 1,\ \cdots,\ n$, del intervalo $[a,\ b]$. Integrando esta expresión en $[a,\ b]$ obtenemos

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

siendo

$$c_i = \int_a^b L_i(x)\,dx,$$

para $i = 0,\ 1,\ \cdots,\ n$. Nótese que los coeficientes c_i, $i = 0,\ 1,\ \cdots,\ n$, son independientes de f y, por tanto, una vez calculados proporcionan una fórmula que se puede aplicar a cualquier función $f : [a,b] \to \mathbb{R}$.

Además, será necesario estudiar el error que se comete en este tipo de fórmulas, es decir, el valor de

$$\mathcal{R}_n(f) = \int_a^b f(x)\,dx - \int_a^b P_n(x)\,dx = \int_a^b E_n(x)\,dx.$$

con $E_n(x) = f(x) - P_n(x)$. En este sentido, en el estudio del error de interpolación, probamos que si $f \in C^{n+1}([a,b])$, se tiene que

$$E_n(x) = \frac{f^{n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\,\Pi_n(x),$$

con $\Pi_n(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$ y donde ξ_x es un punto intermedio entre $x_0,\ x_1,\ \cdots,\ x_n,\ x$. Entonces, en este caso el error de integración que se comete es

$$\mathcal{R}_n(f) = \int_a^b E_n(x)\,dx = \int_a^b \frac{f^{n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\,\Pi_n(x)\,dx.$$

Para determinar una expresión explícita del error de integración $\mathcal{R}_n(f)$, resulta de utilidad el siguiente resultado conocido como teorema del valor medio generalizado:

Teorema 3.5 *Sean $h,\ g\ :\ [a, b] \to \mathbb{R}$ funciones continuas en $[a,\ b]$ y supongamos que g no cambia de signo en $[a,\ b]$, entonces*

$$\int_a^b h\,(x)\,g\,(x)\,dx\ =\ h\,(\xi)\ \int_a^b g\,(x)\,dx,$$

donde ξ es un punto del intervalo $(a,\ b)$.

Por otro lado, es obvio que si f es un polinomio de grado menor o igual que n, entonces f coincidirá con su polinomio de interpolación. En consecuencia, las fórmulas de tipo interpolatorio sobre $n+1$ puntos distintos son exactas para todos los polinomios de grado menor o igual que n, en el sentido de que

$$\mathcal{R}_n\,(f)\ =\ 0.$$

En relación con esta observación, se tiene la siguiente definición:

Definición 3.2 *Se llama orden o grado de precisión de un fórmula de integración al mayor entero positivo m tal que la fórmula es exacta para todos los polinomios de grado menor o igual que m.*

En la práctica, para probar que una fórmula de integración es de orden m, es suficiente comprobar que

$$\mathcal{R}_n\,(x^k)\ =\ 0, \qquad \text{para} \quad k\ =\ 0,\ 1,\ \cdots,\ m \qquad \text{y} \qquad \mathcal{R}_n\,(x^{m+1})\ \neq\ 0.$$

3.2.2. Fórmulas básicas de integración numérica

Fórmula del rectángulo

La formula de integración más sencilla es aquella que utiliza el valor del función f en un sólo punto $x_0\ \in\ [a,\ b]$. En este caso el polinomio de interpolación de la función f es de grado, es decir, $P_0\,(x)\ =\ f\,(x_0)$, por lo que

$$\int_a^b f\,(x)\,dx\ \simeq\ \int_a^b P_0\,(x)\,dx\ =\ \int_a^b f\,(x_0)\,dx\ =\ f\,(x_0)\,(b\ -\ a).$$

Si $x_0\ =\ a$ se obtiene la fórmula del rectángulo izquierda dada por

$$\int_a^b f\,(x)\,dx\ \simeq\ f\,(a)\,(b\ -\ a). \tag{2.6}$$

Si la función $f\ \in\ C^1\,([a, b])$, el error cometido al usar la fórmula (2.6) es

$$\mathcal{R}_0\,(f)\ =\ \int_a^b f'\,(\xi_x)\,(x\ -\ a)\,dx\ =\ f'\,(\xi)\ \int_a^b (x\ -\ a)\,dx\ =\ \frac{f'\,(\xi)}{2}\,(b\ -\ a)^2,$$

con $\xi\ \in\ (a,\ b)$. Para deducir esta fórmula del error hemos utilizado el Teorema 3.5 puesto que la función $\Pi_0\,(x)\ =\ (x\ -\ a)$ no cambia de signo en $[a,\ b]$.

Observaciones 3.4

- *Un resultado similar se obtiene si tomamos $x_0 = b$, en este caso la fórmula de integración se denomina fórmula del rectángulo derecha,*

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq f(b)(b-a), \qquad \mathcal{R}_0(f) = -\frac{f'(\xi)}{2}(b-a)^2.$$

- *Geométricamente, si $f(x) \geq 0$ en $[a, b]$, el valor de $\int_a^b f(x)\,dx$ se aproxima por el área del rectángulo de base $(b-a)$ y altura $f(a)$ ó $f(b)$.*

En el caso de que $x_0 = \dfrac{a+b}{2}$, se obtiene la fórmula del punto medio dada por

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a). \tag{2.7}$$

Para obtener una expresión explícita del error de integración que se comete usando esta fórmula, suponemos que la función $f \in C^2([a,b])$ y hacemos uso del siguiente desarrollo de Taylor de la función f en el punto $(a+b)/2$:

$$f(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\left(x - \frac{a+b}{2}\right) + \frac{f''(\xi_x)}{2}\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2.$$

Integrando ambos miembros y usando la fórmula (2.7), se obtiene que

$$\mathcal{R}_0(f) = \int_a^b f(x)\,dx - f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a) = \frac{f''(\xi)}{24}(b-a)^3,$$

con $\xi \in (a, b)$. De nuevo para deducir esta fórmula del error hemos utilizado el Teorema 3.5 usando en esta ocasión que la función $\left(x - \dfrac{a+b}{2}\right)^2$ no cambia de signo en $[a, b]$.

La fórmula (2.7) es especialmente interesante, puesto que si observamos el término que nos da el error, podemos comprobar que se trata de una fórmula de integración de orden 1, debido a que $f''(x) = 0$, $\forall\, x \in (a, b)$, si f es un polinomio de grado menor o igual que 1.

Fórmula del trapecio

Se trata de un fórmula de integración con dos puntos. En este caso el polinomio de interpolación de la función f es de grado uno. En concreto, si consideramos los puntos $x_0, x_1 \in [a, b]$, el polinomio de interpolación de la función f será

$$P_1(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0).$$

Podemos entonces obtener la siguiente fórmula de integración numérica

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \int_a^b \left(f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) \right) dx$$

Para el caso particular $x_0 = a$ y $x_1 = b$ se obtiene la fórmula del trapecio que viene dada por

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{b-a}{2}\,(f(a) + f(b)). \tag{2.8}$$

Además, si suponemos que $f \in C^2([a,b])$ y dado que la función $\Pi_1(x) = (x-a)(x-b)$ no cambia de signo en el intervalo $[a, b]$, entonces la aplicación del Teorema 3.5 nos proporciona

$$\mathcal{R}_1(f) = \int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2!}(x-a)(x-b)dx = \frac{f''(\xi)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)^3,$$

donde ξ es un punto del intervalo (a, b).

Observaciones 3.5

- *La expresión del error nos asegura que la fórmula (2.8) es exacta para polinomios de grado no mayor que 1.*
- *Geométricamente, si $f(x) \geq 0$ en $[a, b]$, la fórmula del trapecio aproxima el valor de $\int_a^b f(x)\,dx$ por el área del trapecio resultante de unir los puntos $(a, 0)$, $(b, 0)$, $(b, f(b))$ y $(a, f(a))$.*

Fórmula del Simpson

Se trata de una fórmula para 3 puntos, pero consigue exactitud para los polinomios de grado menor o igual que 3, considerando los puntos $x_0 = a$, $x_1 = (a+b)/2$ y $x_2 = b$. Por integración del polinomio de interpolación, se deduce fácilmente que

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right). \tag{2.9}$$

La deducción del error en la fórmula (2.9) es un poco más laboriosa. Para ello, hay que suponer que $f \in C^4([a,b])$, integrar el desarrollo de Taylor de orden 3 de la función f en el punto x_1 y aplicar el Teorema 3.5, obteniéndose que

$$\mathcal{R}_2(f) = -\frac{f^{4)}(\xi)}{2880}(b-a)^5,$$

con $\xi \in (a, b)$

Observaciones 3.6

- *La fórmula de Simpson es una de las fórmulas de integración numérica más usadas en la práctica.*
- *En cuanto a la precisión, la expresión del error $\mathcal{R}_2(f)$, en términos de la derivada cuarta de f, confirma que la fórmula es exacta para los polinomios de grado menor o igual que 3. Sin embargo, se obtiene a partir de la integración de un polinomio de grado 2. La fórmula (2.9) tiene pues un grado extra de exactitud.*

Ejemplo.- Obtener un valor aproximado de la integral $\displaystyle\int_0^1 e^{-x^2}\,dx$ aplicando las fórmulas vistas en teoría. Dar, en cada caso, una estimación del error cometido.

3.2.3. Fórmulas de integración compuesta

Las fórmulas de integración anteriores no son apropiadas cuando el intervalo de integración $[a,\, b]$ es bastante grande, ya que el error que se comete al utilizarlas suele ser también bastante grande, como se deduce de las expresiones del error.

Con objeto de conseguir una mayor precisión, podría pensarse en utilizar fórmulas de tipo interpolatorio con mayor número de puntos. Sin embargo este procedimiento, a parte de ser más engorroso, no conduce necesariamente a fórmulas más exactas debido a los problemas que puede presentar el polinomio de interpolación cuando el grado es muy alto. Por esta razón, es aconsejable un método distinto y en la práctica más efectivo. Consiste en dividir el intervalo inicial en un número apropiado de subintervalos y aplicar un método de integración numérica simple en cada uno de ellos. De esta forma aparecen las fórmulas de integración numérica compuestas.

Si llamamos $h = (b-a)/n$, entonces los puntos $x_j = a + j\,h$, para $j = 0, 1, \cdots, n$, constituyen una partición (uniforme) del intervalo $[a,\, b]$ y se tiene que

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{j=0}^{n-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)\,dx.$$

Ahora aplicamos una fórmula de integración numérica para aproximar la integral de la función en cada uno de los intervalos $[x_j,\, x_{j+1}]$ para $j = 0, 1, \cdots, n-1$.

Fórmula del punto medio compuesta

Si utilizamos la fórmula del punto medio para aproximar la integral en cada uno de los subintervalos $[x_j,\, x_{j+1}]$, obtenemos la fórmula de integración compuesta dada por

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \sum_{j=0}^{n-1} f\left(\frac{x_j + x_{j+1}}{2}\right)(x_{j+1} - x_j) = h\sum_{j=0}^{n-1} f\left(\frac{x_j + x_{j+1}}{2}\right). \quad (2.10)$$

El error cometido al utilizar la fórmula (2.10) será la suma de los errores cometidos en cada uno de los subintervalos. En este caso, suponiendo que la función f es de clase 2 en $[a,\ b]$,

$$\mathcal{R}\,(f)\ =\ \sum_{j=0}^{n-1} \frac{f''\,(\xi_j)}{24}\, h^3\ =\ \frac{(b-a)}{24}\, h^2\, f''\,(\xi),$$

con $\xi\ \in\ (a,\ b)$.

Ejemplo.- Calcular un valor aproximado de la integral $\displaystyle\int_{10}^{16} x^{1/3} dx$ aplicando la fórmula del punto medio compuesta, dividiendo el intervalo en 3 partes iguales. Dar una estimación del error cometido.

Fórmula del trapecio compuesta

Si utilizamos la fórmula del trapecio en cada subintervalo, se llega a la fórmula de integración compuesta

$$\int_a^b f\,(x)\,dx\ \simeq\ \sum_{j=0}^{n-1} \left(\frac{f\,(x_j)\ +\ f\,(x_{j+1})}{2}\right)\ (x_{j+1}\ -\ x_j)\ =\ \frac{h}{2}\sum_{j=0}^{n-1} \left(f\,(x_j)\ +\ f\,(x_{j+1})\right). \tag{2.11}$$

Si $f\ \in\ C^2\,([a,b])$, el error viene dado por

$$\mathcal{R}\,(f)\ =\ -\sum_{j=0}^{n-1} \frac{f''\,(\xi_j)}{12}\, h^3\ =\ -\frac{(b-a)}{12}\, h^2\, f''\,(\xi),$$

con $\xi\ \in\ (a,\ b)$.

Ejemplo.- Hallar, por el método del trapecio compuesto, un valor aproximado de la integral $\displaystyle\int_0^{\pi/2}$ sen $x\,dx$, dividiendo el intervalo en 4 partes. Dar una estimación del error cometido.

Bibliografía

[1] A. Aubanell, A. Benseny & A. Delshams, *Útiles básicos de Cálculo Numérico*, Labor, Barcelona 1993.

[2] J. A. Infante y J. M. Rey, *Métodos Numéricos: Teoría, problemas y prácticas con MATLAB* , Ediciones Pirámide, Madrid, 1999.

[3] J. M. Quesada, C. Sánchez, J. Jódar & J. Martínez, *Análisis y Métodos Numéricos*, Publicaciones de la Universidad de Jaén, Jaén, 2004.

Como referencias complementarias destacamos:

[4] F. García & A. Nevot, *Métodos Numéricos*, Universidad Pontificia de Comillas, Madrid, 1997.

[5] D. Kincaid & W. Cheney, *Análisis Numérico*, Addison-Wesley Iberoamericana, Wilmington, 1994.