Integración Numérica II

- **Método de Romberg.**
- **Reglas de Gauss-Legendre.**
- **Integrales Múltiples.**
- **Integrales Impropias.**

Método de Romberg

Usando la regla de trapecios con diferentes pasos h se pueden obtener reglas de mayor orden. El siguiente proceso, aplicable a funciones muy suaves, se llama **método de Romberg** y se basa en que si $I_T(f)$ es la aproximación de $\int_a^b f(x)\,dx$ con paso h, entonces

$$\int_a^b f(x)\,dx = I_T(f) + c_2 h^2 + c_4 h^4 + \cdots + c_{2m} h^{2m} + \cdots$$

donde las constantes c_i son independientes de h.

Sean

$I := \int_a^b f(x)\,dx$: el valor exacto de la integral,

$T_h^0 := I_T(f)$: el valor de la integral calculado por trapecios con paso h.

Con esta notación,

$$I = T_h^0 + c_2 h^2 + c_4 h^4 + \cdots + c_{2m} h^{2m} + \cdots \tag{1}$$

Análogamente, calculando I por trapecios con paso $\frac{h}{2}$, se tiene

$$I = T_{\frac{h}{2}}^0 + c_2 \left(\frac{h}{2}\right)^2 + c_4 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + \cdots + c_{2m} \left(\frac{h}{2}\right)^{2m} + \cdots \tag{2}$$

Multiplicando la ec. (2) por 4 y restándole la ec. (1), se obtiene

$$I = T_{\frac{h}{2}}^0 + \frac{T_{\frac{h}{2}}^0 - T_h^0}{3} + \hat{c}_4 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + \hat{c}_6 \left(\frac{h}{2}\right)^6 + \cdots \tag{3}$$

Comparando la ec. (2)

$$I = T^0_{\frac{h}{2}} + c_2 \left(\frac{h}{2}\right)^2 + c_4 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + \cdots + c_{2m} \left(\frac{h}{2}\right)^{2m} + \cdots \tag{2}$$

con la ec. (3)

$$I = T^0_{\frac{h}{2}} + \frac{T^0_{\frac{h}{2}} - T^0_h}{3} + \hat{c}_4 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + \hat{c}_6 \left(\frac{h}{2}\right)^6 + \cdots \tag{3}$$

vemos que

- $\dfrac{T^0_{\frac{h}{2}} - T^0_h}{3}$ es una estimación de la parte principal del error de $T^0_{\frac{h}{2}}$.
- $T^1_{\frac{h}{2}} := T^0_{\frac{h}{2}} + \dfrac{T^0_{\frac{h}{2}} - T^0_h}{3}$ es una aproximación de I de orden $\left(\dfrac{h}{2}\right)^4$:

$$I = T^1_{\frac{h}{2}} + \hat{c}_4 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + \hat{c}_6 \left(\frac{h}{2}\right)^6 + \cdots \tag{4}$$

Calculando I por trapecios con paso $\frac{h}{4}$, se tiene

$$I = T^0_{\frac{h}{4}} + c_2\left(\frac{h}{4}\right)^2 + c_4\left(\frac{h}{4}\right)^4 + \cdots + c_{2m}\left(\frac{h}{4}\right)^{2m} + \cdots \tag{5}$$

Multiplicando la ec. (5) por 4 y restándole la ec. (2), se obtiene

$$I = T^0_{\frac{h}{4}} + \frac{T^0_{\frac{h}{4}} - T^0_{\frac{h}{2}}}{3} + \hat{c}_4\left(\frac{h}{4}\right)^4 + \hat{c}_6\left(\frac{h}{4}\right)^6 + \cdots \tag{6}$$

Comparando (5) con (6) vemos que:

- $\dfrac{T^0_{\frac{h}{4}} - T^0_{\frac{h}{2}}}{3}$ es una estimación de la parte principal del error de $T^0_{\frac{h}{4}}$.
- $T^1_{\frac{h}{4}} := T^0_{\frac{h}{4}} + \dfrac{T^0_{\frac{h}{4}} - T^0_{\frac{h}{2}}}{3}$ es una aproximación de I de orden $\left(\dfrac{h}{4}\right)^4$:

$$I = T^1_{\frac{h}{4}} + \hat{c}_4\left(\frac{h}{4}\right)^4 + \hat{c}_6\left(\frac{h}{4}\right)^6 + \cdots \tag{7}$$

Además, a partir de las ec. (4) y (7):

$$I = T^1_{\frac{h}{2}} + \hat{c}_4 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + \hat{c}_6 \left(\frac{h}{2}\right)^6 + \cdots \tag{4}$$

$$I = T^1_{\frac{h}{4}} + \hat{c}_4 \left(\frac{h}{4}\right)^4 + \hat{c}_6 \left(\frac{h}{4}\right)^6 + \cdots \tag{7}$$

multiplicando la ec. (7) por 16 y restándole la ec. (4), se obtiene que:

- $\dfrac{T^1_{\frac{h}{4}} - T^1_{\frac{h}{2}}}{15}$ es una estimación de la parte principal del error de $T^1_{\frac{h}{4}}$.
- $T^2_{\frac{h}{4}} := T^1_{\frac{h}{4}} + \dfrac{T^1_{\frac{h}{4}} - T^1_{\frac{h}{2}}}{15}$ es una aproximación de I de orden $\left(\dfrac{h}{4}\right)^6$:

$$I = T^2_{\frac{h}{4}} + \hat{\hat{c}}_6 \left(\frac{h}{4}\right)^6 + \cdots$$

Este procedimiento se puede iterar como se indica en el siguiente gráfico:

Paso	Trap.	$\dfrac{\Delta}{2^2-1}$		$\dfrac{\Delta}{2^4-1}$		$\dfrac{\Delta}{2^6-1}$	
h	T_h^0						
		$\frac{T_{h/2}^0-T_h^0}{3}$					
$h/2$	$T_{h/2}^0$		$T_{h/2}^1$				
		$\frac{T_{h/4}^0-T_{h/2}^0}{3}$		$\frac{T_{h/4}^1-T_{h/2}^1}{15}$			
$h/4$	$T_{h/4}^0$		$T_{h/4}^1$		$T_{h/4}^2$		
		$\frac{T_{h/8}^0-T_{h/4}^0}{3}$		$\frac{T_{h/8}^1-T_{h/4}^1}{15}$		$\frac{T_{h/8}^2-T_{h/4}^2}{63}$	
$h/8$	$T_{h/8}^0$		$T_{h/8}^1$		$T_{h/8}^2$		$T_{h/8}^3$
		$\frac{T_{h/16}^0-T_{h/8}^0}{3}$					
$h/16$	$T_{h/16}^0$		$T_{h/16}^1$	$\dots$ etc.			

Ejemplo: Cálculo de $\displaystyle\int_0^1 \mathrm{e}^{-x^2}\,dx$ con error menor que 10^{-9}.

Paso	Trapecios	$\dfrac{\Delta}{2^2-1}$		$\dfrac{\Delta}{2^4-1}$		$\dfrac{\Delta}{2^6-1}$
0.5	$0.731\,370\,251$					
		$0.003\,871\,281$				
0.25	$0.742\,984\,097$		$0.746\,855\,379$			
		$0.000\,960\,505$		$-0.000\,001\,950$		
0.125	$0.745\,865\,614$		$0.746\,826\,120$		$0.746\,824\,169\,910$	
		$0.000\,239\,660$		$-0.000\,000\,124$		$-0.000\,000\,000\,582$
0.0625	$0.746\,584\,596$		$0.746\,824\,257$		$0.746\,824\,133\,230$	
$\vdots$						$0.746\,824\,132\,647$
0.00025	$0.746\,824\,128$	$(n{=}4000)$				
$\vdots$						
0.000125	$0.746\,824\,131$	$(n{=}8000)$				

Valor exacto de la integral: $0.746\,824\,132\,812\ldots$.

REGLAS DE GAUSS-LEGENDRE

Se considera el cálculo de integrales en el intervalo $[-1, 1]$:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx,$$

usando reglas de integración de la forma:

$$I_n(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i).$$

A diferencia de las reglas anteriores, en las **reglas Gaussianas**, tanto los **nodos** x_i, como las coeficientes A_i, $i = 1, \ldots, n$, se determinan de modo que $I_n(f)$ **resulte exacta cuando** f **es un polinomio del grado mayor posible**.

Polinomios de Legendre

Se trata de una base del espacio de polinomios, ortogonal en el producto interior:

$$(p, q) := \int_{-1}^{1} p(x)q(x)\, dx.$$

Puede obtenerse a partir de la base canónica $\{1, x, x^2, \dots\}$, mediante el proceso de Gram-Schmidt:

$$\begin{aligned} p_0(x) &= 1, \\ p_1(x) &= x, \\ p_2(x) &= \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}, \\ &\dots \end{aligned}$$

Los polinomios de Legendre satisfacen entonces:

- $\{p_0, \ldots, p_n\}$ es una base de $\mathcal{P}_n$,
- $p_n \perp \mathcal{P}_{n-1}$.

Pueden calcularse fácilmente mediante la siguiente relación recursiva:

$$p_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1}\, x\, p_n(x) - \frac{n}{n+1} p_{n-1}(x).$$

Teorema. p_n tiene n raíces distintas $x_1, \ldots, x_n$, todas en el intervalo $(-1, 1)$.

Teorema. Existen coeficientes A_i, $i = 1, \ldots, n$, tales que la regla de integración

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$

es exacta para $f \in \mathcal{P}_{2n-1}$.

La regla del teorema anterior se llama **Regla de Gauss-Legendre**:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$

Errror de la regla de Gauss-Legendre:

Teorema. Si $f \in \mathcal{C}^{2n}([-1,1])$, entonces el error de la regla de Gauss-Legendre satisface:

$$R := \int_{-1}^{1} f(x)\,dx - \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_{-1}^{1} \left[p_n(x)\right]^2\,dx,$$

para algún $\xi \in (-1,1)$.

Cambio de intervalo.

Aunque las reglas de Gauss-Legendre se definen sobre el intervalo $[-1, 1]$, mediante el cambio de variables:

$$x(t) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t,$$

se pasa de una integral en $[a, b]$ a una integral en $[-1, 1]$:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(x(t)\right)\,dt,$$

Mediante esta transformación, las reglas de Gauss-Legendre son aplicables a integrales sobre cualquier intervalo $[a, b]$.

Tanto los nodos x_i, como los coeficientes A_i de las reglas de Gauss-Legedre en el intervalo $[-1, 1]$ se encuentran tabulados para distintos valores de n (típicamente $1 \leq n \leq 16$).

Algunos de estos valores se exhiben a continuación:

x_i	A_i	x_i	A_i
$n = 1$		$n = 2$	
0.000000000000000	2.000000000000000	$\pm$ 0.577350269189626	1.000000000000000
$n = 3$		$n = 4$	
$\pm$ 0.774596669241483	0.555555555555555	$\pm$ 0.861136311594053	0.347854845137455
0.000000000000000	0.888888888888889	$\pm$ 0.339981043584856	0.652145154862547
$n = 5$		$n = 6$	
$\pm$ 0.906179845938664	0.236926885056189	$\pm$ 0.932469514203152	0.171324492379170
$\pm$ 0.538469310105683	0.478628670499367	$\pm$ 0.661209386466265	0.360761573048138
0.000000000000000	0.568888888888889	$\pm$ 0.238619186083197	0.467913934572691
$n = 7$		$n = 8$	
$\pm$ 0.949107912342759	0.129484966168870	$\pm$ 0.960289856497537	0.101228536290376
$\pm$ 0.741531185599394	0.279705391489276	$\pm$ 0.796666477413627	0.222381034453375
$\pm$ 0.405845151377397	0.381830050505119	$\pm$ 0.525532409916329	0.313706645877887
0.000000000000000	0.417959183673470	$\pm$ 0.183434642495650	0.362683783378362

Ejemplo: Valor calculado de las siguientes integrales mediante la regla de Gauss-Legendre de n puntos:

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{e}^{-x^2}\,dx \qquad\qquad \int_{0}^{\sqrt{\pi}} \operatorname{sen} x^2\,dx$$

n	integral calculada
1	2.00000000000000
2	1.43306262114758
3	1.49867959566003
4	1.49333462244954
5	1.49366392070263
6	1.49364761415061
7	1.49364828886942
8	1.49364826489901
	...
12	1.49364826562485
	...
16	1.49364826562485

n	integral calculada
1	1.25331413731550
2	0.945846306765387
3	0.881724441044291
4	0.895101280858322
5	0.894873008285135
6	0.894829867593220
7	0.894831432899344
8	0.894831471817628
	...
12	0.894831469484145
	...
16	0.894831469484145

INTEGRALES MULTIPLES

Las ideas anteriores se extienden a más dimensiones. Como ejemplo, considere el cálculo de la integral de una función de dos variables $f(x,y)$ en el rectángulo $D := [a,b] \times [c,d]$:

$$I = \int_D f(x,y)\,dx\,dy = \int_a^b \left[\int_c^d f(x,y)\,dy \right] dx.$$

Se tiene que

$$I = \int_a^b F(x)\,dx,$$

para

$$F(x) := \int_c^d f(x,y)\,dy.$$

La integral I se calcula con una regla

$$\int_a^b F(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i F(x_i), \qquad x_i \in [a,b],$$

con error

$$R_F := \int_a^b F(x)\,dx - \sum_{i=0}^{n} A_i F(x_i)$$

y, para cada $i = 0, \ldots, n$, $F(x_i)$ se calcula con otra regla

$$F(x_i) = \int_c^d f(x_i, y)\,dy \approx \sum_{j=0}^{m} B_j f(x_i, y_j), \qquad y_j \in [c,d],$$

con errores

$$R_f^i := \int_c^d f(x_i, y)\,dy - \sum_{j=0}^{m} B_j f(x_i, y_j),$$

Entonces,

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)\,dx\,dy \approx \sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{m} A_i B_j f(x_i, y_j),$$

y el error R de la regla de integración doble resultante es

$$R := \int_a^b \int_c^d f(x,y)\,dx\,dy - \sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{m} A_i B_j f(x_i, y_j) = R_F + \sum_{i=0}^{n} A_i R_f^i.$$

INTEGRALES IMPROPIAS

Todas las reglas de integración anteriores son aplicables cuando:

- f es **acotada** en el intervalo $[a, b]$ y
- el intervalo $[a, b]$ es **finito**.

Para aplicarlos a integrales impropias se debe previamente hacer ciertos ajustes que dependen de la integral misma.

Integrando no acotado.

Considere la integral

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

con integrando $f(x)$ **no acotado** en $x = a$, pero tal que la integral es convergente.

Dada una tolerancia ϵ para el error, se debe determinar (analíticamente) $r > a$ tal que

$$\left|\int_a^r f(x)\,dx\right| \leq \epsilon$$

y luego tomar

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_r^b f(x)\,dx.$$

Dominio no acotado.

La misma idea anterior se puede aplicar cuando el intervalo de integración **no es acotado**.

Por ejemplo, para

$$\int_0^\infty f(x)\,dx,$$

se debe determinar (analíticamente) $r > 0$ tal que

$$\left|\int_r^\infty f(x)\,dx\right| \leq \epsilon$$

y luego tomar

$$\int_0^\infty f(x)\,dx \approx \int_0^r f(x)\,dx.$$

A veces un cambio de variable es útil!

Por ejemplo,

- Para cualquier $f \in \mathcal{C}([0,1])$, el cambio $x = t^n$ transforma

$$\int_0^1 x^{-\frac{1}{n}} f(x)\, dx \qquad \text{en} \qquad n \int_0^1 f(t^n) t^{n-2}\, dt.$$

- El cambio $x = \dfrac{1}{t}$ transforma

$$\int_1^\infty \frac{e^{-1/x^2}}{x^2}\, dx \qquad \text{en} \qquad \int_0^1 e^{-t^2}\, dt.$$