

INTEGRACION NUMERICA (Version papel)

Para calcular integrales de la forma:

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

en las cuales w es positiva, se verán *reglas de cuadratura* de la forma:

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i),$$

donde $x_i \in [a, b]$, A_i son constantes, $i = 0, \dots, n$ para $n = 0$ o $n \in \mathbb{N}$.

FORMULAS DE NEWTON-COTES

Para estas reglas $w(x) = 1$ y los *nodos de cuadratura* son arbitrarios en $[a, b]$. Usaremos $x_i = a + ih$, $i = 0, \dots, n$ con $h = (b - a)/n$. Los *coeficientes* A_i se determinan de modo que $I_n(f)$ *resulte exacta* cuando $f \in P_n([a, b])$. Si $f \notin P_n([a, b])$, la función f se aproxima por el polinomio de interpolación respecto a x_0, \dots, x_n .

En general, los coeficientes A_i se obtienen del sistema:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_0 \\ m_1 \\ \vdots \\ m_n \end{bmatrix}, \quad (1)$$

en el cual,

$$m_k = \int_a^b x^k dx, \quad k = 0, \dots, n.$$

Para $f \notin P_n([a, b])$, sea p_n el polinomio de interpolación de f y escribamos:

$$f(x) = p_n(x) + E_n(x), \quad x \in [a, b],$$

donde $E_n(x)$ es el error de interpolación. Entonces:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \int_a^b (p_n(x) + E_n(x))dx = \sum_{i=0}^n A_i p_n(x_i) + \int_a^b E_n(x)dx \\ &= \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) + \int_a^b E_n(x)dx, \end{aligned}$$

y luego, *el error de integración* es,

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

Regla del punto medio. Corresponde al caso $n = 0$ con $x_0 = (a+b)/2$. Resolviendo el sistema (1) se encuentra $A_0 = b - a$, luego la *regla del punto medio* es:

$$I_0(f) = (b - a)f\left(\frac{b + a}{2}\right).$$

Si $f \in C^2([a, b])$, el error de integración está dado por:

$$\begin{aligned} R_0(f) &= \int_a^b E_0(x)dx = \int_a^b (f(x) - f(x_0))dx \\ &= \int_a^b \left[f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}f''(\zeta_x)(x - x_0)^2 \right] dx, \end{aligned}$$

para algún ζ_x entre x y x_0 . Usando $M_2 := \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|$ y evaluando la integral, se encuentra:

$$|R_0(f)| \leq \frac{M_2}{24}(b - a)^3.$$

Regla del punto medio general (o compuesta)

El intervalo $[a, b]$ se divide en n subintervalos introduciendo los nodos $x_i := a + ih$, $i = 0, \dots, n$ para $h := (b - a)/n$.

La regla general se obtiene aplicando la anterior en cada subintervalo $I = [x_i, x_{i+1}]$:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx, \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \left\{ (x_{i+1} - x_i)f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) + R_0(f|_I) \right\}, \quad f|_I := \text{restricción de } f \\ &= h \sum_{i=0}^{n-1} f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) + \sum_{i=0}^{n-1} R_0(f|_I) \end{aligned}$$

luego, la *regla del punto medio general* es:

$$I_M(f) = h \sum_{i=0}^{n-1} f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right)$$

y para el error se tiene:

$$|R_M(f)| \leq \sum_{i=0}^{n-1} \frac{M_2}{24} h^3 = \frac{M_2}{24}(b - a)h^2.$$

Regla del trapecio. Corresponde al caso $n = 1$ con $x_0 = a$, $x_1 = b$. Del sistema (1) se obtienen $A_0 = A_1 = \frac{b-a}{2}$. Luego, la *regla del trapecio* es:

$$I_1(f) = \frac{(b-a)}{2}[f(a) + f(b)].$$

Si $f \in C^2([a, b])$, para el *error de integración* se obtiene:

$$R_1(f) := \int_a^b (x - x_0)(x - x_1) \frac{f''(\xi_x)}{2} dx = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\theta),$$

para algún $\theta \in [a, b]$.

Regla de trapecios general (o compuesta)

El intervalo $[a, b]$ se divide en n subintervalos introduciendo los nodos $x_i := a + ih$, para $i = 0, \dots, n$ y $h := (b-a)/n$. La regla general se obtiene aplicando la del trapecio en cada subintervalo.

Regla de trapecios general:

$$T(f) := h \left\{ \frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right\}.$$

Para $f \in C^2([a, b])$, se tiene:

$$R_T(f) = -n \frac{h^3}{12} f''(\theta) = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\theta), \quad \text{para algún } \theta \in [a, b].$$

Regla de Simpson. Corresponde al caso $n = 2$ con $x_0 = a$, $x_1 = (a+b)/2$, $x_2 = b$. Del sistema (1) se obtienen, $A_0 = A_2 = \frac{b-a}{6}$ y $A_1 = 4 \frac{b-a}{6}$. Luego, la *regla Simpson* es:

$$I_2(f) := \frac{(b-a)}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right].$$

Para $f \in C^4([a, b])$, el *error de integración* satisface:

$$R_2(f) := -\frac{1}{90} \left(\frac{b-a}{2} \right)^5 f^{(4)}(\theta),$$

para algún $\theta \in [a, b]$.

Regla de Simpson general (o compuesta)

En el intervalo $[a, b]$ se introducen los $2n + 1$ nodos $x_i := a + ih$ para $i = 0, \dots, 2n$ y $h := (b - a)/(2n)$. La *regla general* se obtiene aplicando la regla de Simpson en cada subintervalo $[x_{2i}, x_{2i+2}]$, $i = 0, \dots, n - 1$.

Regla de Simpson general:

$$I_S(f) := \frac{h}{3} \left[f(a) + f(b) + 4 \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{2i+1}) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) \right].$$

Cuando $f \in C^4([a, b])$, el error de $I_S(f)$ satisface:

$$R_S(f) = -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\theta) = -\frac{nh^5}{90} f^{(4)}(\theta), \quad \text{para algún } \theta \in [a, b].$$

Ejercicio. Encontrar el valor aproximado, con un error menor o igual a 10^{-3} , para

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

usando cada método visto anteriormente.

Observaciones.

- (1) Es costumbre referirse a las reglas generales $I_T(f)$ y $I_S(f)$ simplemente como regla de trapecios y regla de Simpson.
- (2) Existen versiones de las Reglas para nodos *no igualmente espaciados*.

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:

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

donde las constantes c_i son independientes de h . Para $h = \frac{b-a}{n}$ sean:

$$I = \int_a^b f(x)dx, \quad T_h^0 = I_T(f).$$

Con esta notación,

$$I = T_h^0 + c_2 h^2 + c_4 h^4 + \dots + c_{2m} h^{2m} + \quad (2)$$

Calculando I por trapecios con $\frac{h}{2}$ se tiene,

$$I = T_{\frac{h}{2}}^0 + c_2 \left(\frac{h}{2}\right)^2 + c_4 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + \dots + c_{2m} \left(\frac{h}{2}\right)^{2m} + \quad (3)$$

Restando a (3) la (2) multiplicada por $\frac{1}{4}$ se encuentra

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

Comparando (4) con (3) vemos que:

- (1) $\frac{T_{\frac{h}{2}}^0 - T_h^0}{3}$ es una estimación para el error en $T_{\frac{h}{2}}^0$
- (2) $T_{\frac{h}{2}}^1 = T_{\frac{h}{2}}^0 + \frac{T_{\frac{h}{2}}^0 - T_h^0}{3}$ es una aproximación para I de orden $\left(\frac{h}{2}\right)^4$.

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

$$I = T_{\frac{h}{4}}^0 + c_2\left(\frac{h}{4}\right)^2 + c_4\left(\frac{h}{4}\right)^4 + \dots + c_{2m}\left(\frac{h}{4}\right)^{2m} + \quad (5)$$

Procediendo de forma similar, se encuentra que

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

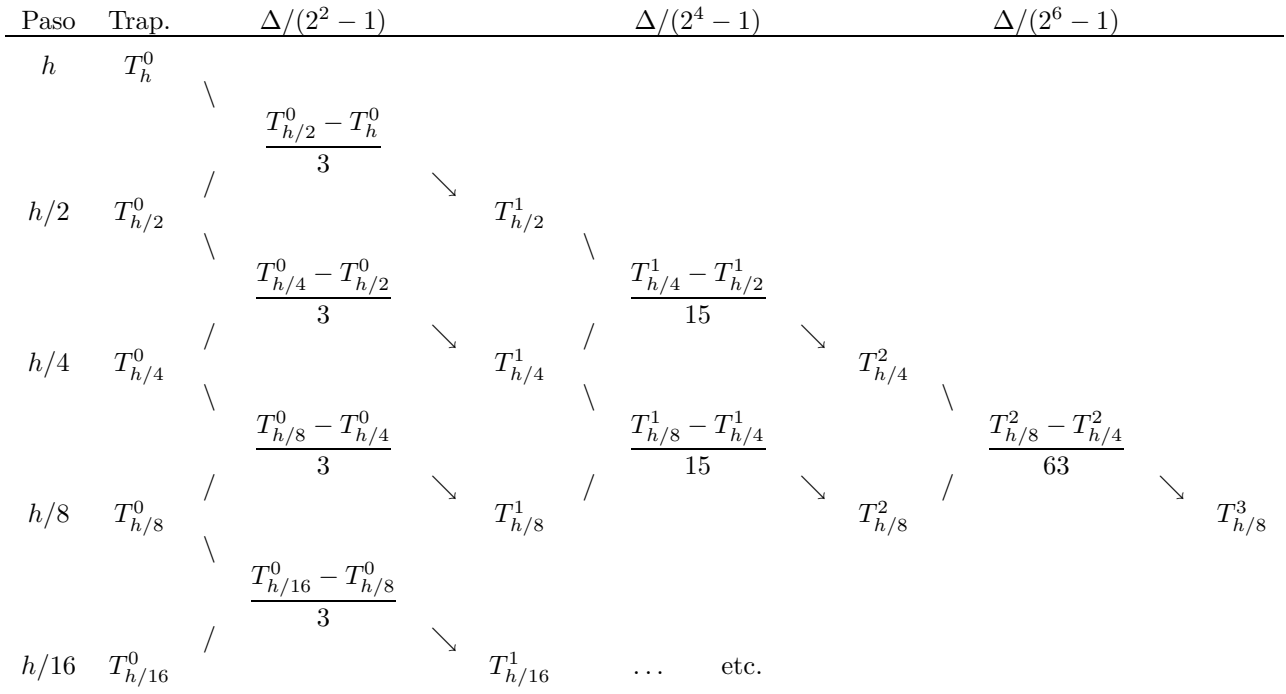
Comparando (5) con (6) vemos que:

- (1) $\frac{T_{\frac{h}{4}}^0 - T_{\frac{h}{2}}^0}{3}$ es una estimación para el error en $T_{\frac{h}{4}}^0$
- (2) $T_{\frac{h}{4}}^1 = T_{\frac{h}{4}}^0 + \frac{T_{\frac{h}{4}}^0 - T_{\frac{h}{2}}^0}{3}$ es una aproximación para I de orden $\left(\frac{h}{4}\right)^4$.

Además, con $T_{\frac{h}{2}}^1$ y $T_{\frac{h}{4}}^1$ se obtiene que

$$T_{\frac{h}{4}}^2 = T_{\frac{h}{4}}^1 + \frac{T_{\frac{h}{4}}^1 - T_{\frac{h}{2}}^1}{15}$$

es una aproximación para I de orden $\left(\frac{h}{4}\right)^6$.



Ejemplo: Calcular $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ con error menor que 10^{-9} (valor exacto de la integral: 0.746 824 132 812...).

Paso	Trapezios	$\Delta/(2^2 - 1)$	$\Delta/(2^4 - 1)$	$\Delta/(2^6 - 1)$
0.5	0.731 370 251 829			
		0.003 871 281 991		
0.25	0.742 984 097 800		0.746 855 379 791	
		0.000 960 505 682		
0.125	0.745 865 614 846		0.746 826 120 527	
		0.000 239 660 648		
0.0625	0.746 584 596 788		0.746 824 257 438	
\vdots				
0.00025	0.746 824 128 980	(n=4000)		
\vdots				
0.000125	0.746 824 131 854	(n=8000)		

FORMULAS DE GAUSS

Se considera nuevamente el cálculo de

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

con w positiva en $[a, b]$, usando *reglas de cuadratura* de la forma:

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i).$$

A diferencia de las fórmulas de Newton-Cotes, en las fórmulas Gaussianas, tanto los nodos x_i , como las constantes A_i $i = 0, \dots, n$ se determinan de modo que $I_n(f)$ *resulte exacta* cuando $f \in P_{2n+1}([a, b])$. Esta condición implica que los nodos x_i ahora *no son arbitrarios*; dependen de w .

Veremos las fórmulas de Gauss-Legendre, en las cuales $w(x) = 1$ para cada $x \in [-1, 1]$. Tanto los nodos x_i , como las constantes A_i , para la fórmula de Gauss

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$$

se pueden ver en la tabla siguiente.

Puntos y pesos de la regla de Gauss de integración

x_i	A_i	x_i	A_i
$n = 0$		$n = 8$	
0.0000000000000000	2.0000000000000000	± 0.968160239507626	0.081274388361574
		± 0.836031107326636	0.180648160694858
$n = 1$		± 0.613371432700590	0.260610696402936
± 0.577350269189626	1.0000000000000000	± 0.324253423403809	0.312347077040003
		0.0000000000000000	0.330239355001260
$n = 2$		$n = 9$	
± 0.774596669241483	0.5555555555555555	± 0.973906528517172	0.066671344308688
0.0000000000000000	0.8888888888888889	± 0.865063366688984	0.149451349150580
$n = 3$		± 0.679409568299024	0.219086362515982
± 0.861136311594053	0.347854845137455	± 0.433395394129247	0.269266719309996
± 0.339981043584856	0.652145154862547	± 0.148874338981631	0.295524224714752
$n = 4$		$n = 10$	
± 0.906179845938664	0.236926885056189	± 0.978228658146057	0.055668567116174
± 0.538469310105683	0.478628670499367	± 0.887062599768095	0.125580369464905
0.0000000000000000	0.5688888888888889	± 0.730152005574049	0.186290210927734
$n = 5$		± 0.519096129206811	0.233193764591990
± 0.932469514203152	0.171324492379170	± 0.269543155952345	0.262804544510247
± 0.661209386466265	0.360761573048138	0.0000000000000000	0.272925086777902
± 0.238619186083197	0.467913934572691	$n = 11$	
$n = 6$		± 0.981560634246719	0.047175336386512
± 0.949107912342759	0.129484966168870	± 0.904117256370475	0.106939325995318
± 0.741531185599394	0.279705391489276	± 0.769902674194305	0.160078328543346
± 0.405845151377397	0.381830050505119	± 0.587317954286617	0.203167426723066
0.0000000000000000	0.417959183673470	± 0.367831498998180	0.233492536538355
$n = 7$		± 0.125233408511469	0.249147045813403
± 0.960289856497537	0.101228536290376		
± 0.796666477413627	0.222381034453375		
± 0.525532409916329	0.313706645877887		
± 0.183434642495650	0.362683783378362		

x_i	A_i	x_i	A_i
$n = 12$		$n = 14$	
± 0.984183054718588	0.040484004765315	± 0.987992518020486	0.030753241996117
± 0.917598399222978	0.092121499837728	± 0.937273392400706	0.070366047488108
± 0.801578090733310	0.138873510219787	± 0.848206583410427	0.107159220467172
± 0.642349339440340	0.178145980761946	± 0.724417731360170	0.139570677926155
± 0.448492751036447	0.207816047536889	± 0.570972172608538	0.166269205816994
± 0.230458315955135	0.226283180262897	± 0.394151347077563	0.186161000015561
0.000000000000000	0.232551553230874	± 0.201194093997435	0.198431485327112
		0.000000000000000	0.202578241925561
$n = 13$		$n = 15$	
± 0.986283808696813	0.035119460331751	± 0.989400934991650	0.027152459411754
± 0.928434883663574	0.080158087159760	± 0.944575023073233	0.062253523938648
± 0.827201315069765	0.121518570687903	± 0.865631202387832	0.095158511682493
± 0.687292904811685	0.157203167158194	± 0.755404408355003	0.124628971255534
± 0.515248636358154	0.185538397477938	± 0.617876244402644	0.149595988816577
± 0.319112368927890	0.205198463721296	± 0.458016777657228	0.169156519395003
± 0.108054948707343	0.215263853463158	± 0.281603550779259	0.182603415044924
		± 0.095012509837637	0.189450610455068

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

$$\int_{-1}^1 e^{-x^2} dx$$

$$\int_0^{\sqrt{\pi}} \sin x^2 dx$$

n	integral calculada	n	integral calculada
0	2.000000000000000	0	1.253314137315500
1	1.43306262114758	1	0.945846306765387
2	1.49867959566003	2	0.881724441044291
3	1.49333462244954	3	0.895101280858322
4	1.49366392070263	4	0.894873008285135
5	1.49364761415061	5	0.894829867593220
6	1.49364828886942	6	0.894831432899344
7	1.49364826489901	7	0.894831471817628
8	1.49364826564500	8	0.894831469487727
9	1.49364826562435	9	0.894831469482569
10	1.49364826562487	10	0.894831469484157
11	1.49364826562485	11	0.894831469484145
12	1.49364826562485	12	0.894831469484146
13	1.49364826562485	13	0.894831469484145
14	1.49364826562485	14	0.894831469484144
15	1.49364826562485	15	0.894831469484145

Respecto al error de estas fórmulas se tiene el siguiente teorema.

Teorema. Si $f \in C^{2n+2}([-1, 1])$, existe $\theta \in [-1, 1]$ tal que

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) + \frac{f^{(2n+2)}(\theta)}{(2n+2)!} \int_{-1}^1 p_{n+1}^2(x)dx,$$

donde p_{n+1} es el polinomio de Legendre de grado $n+1$.

Ejemplo. La fórmula de Gauss de $m = 3$ “puntos” ($m := n+1$) se obtiene con $x_0 = -.774597$, $x_1 = .000000$, $x_2 = .774597$ y con constantes $A_0 = .555556$, $A_1 = .888889$, $A_2 = .555556$. Esta fórmula es exacta para integrar polinomios $p \in P_5([-1, 1])$. Si $f \notin P_5([-1, 1])$, el error se calcula usando el teorema.

Cambio de intervalo. Notando que

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

donde

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

Así, las fórmulas de Gauss anteriores se aplican a integrales sobre $[a, b]$.

Integrales múltiples

Las ideas anteriores se extienden a más dimensiones. Como ejemplo del procedimiento, considere calcular

$$I = \int_D f(x, y) dA = \int_a^b \int_c^d f(x, y) dy dx.$$

Para

$$g(x) = \int_c^d f(x, y) dy$$

se tiene:

$$I = \int_a^b g(x) dx.$$

Si la integral I se calcula con la regla

$$\int_a^b g(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i g(x_i) + R_g, \quad x_i \in [a, b]$$

y si los $g(x_i)$ se obtienen como:

$$g(x_i) = \sum_{j=0}^m B_j f(x_i, y_j) + R_f, \quad y_j \in [c, d],$$

entonces,

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

donde el error R es

$$R = R_g + \sum_{i=0}^n A_i R_{f(x_i, y)}.$$

Ejemplo. Calcular usando la fórmula de Gauss de 3 puntos en cada dirección

$$\int_0^1 \int_{-1}^0 e^{-(x^2+y^2)} dx dy.$$

Solución. Note que:

$$I = \int_0^1 \int_{-1}^0 f(x, y) dx dy = \int_0^1 F(y) dy = B \int_{-1}^1 F(A + Bt) dt$$

con $A = \frac{a+b}{2} = \frac{1}{2}$ y $B = \frac{b-a}{2} = \frac{1}{2}$. Usando la fórmula de Gauss de 3 puntos:

$$I \approx \sum_{i=0}^2 \frac{1}{2} A_i F\left(\frac{1+x_i}{2}\right)$$

donde

$$F(y) = \int_{-1}^0 f(x, y) dx = \hat{B} \int_{-1}^1 f(\hat{A} + \hat{B}z, y) dz = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 e^{-((\frac{z-1}{2})^2 + y^2)} dz$$

para $\hat{A} = \frac{a+b}{2} = -\frac{1}{2}$ y $\hat{B} = \frac{b-a}{2} = \frac{1}{2}$. Usando la fórmula de Gauss de 3 puntos:

$$F(y) \approx \frac{1}{2} \sum_{j=0}^2 A_j e^{-((\frac{x_j-1}{2})^2 + y^2)}$$

y luego,

$$I \approx \frac{1}{4} \sum_{i=0}^2 \sum_{j=0}^2 A_i A_j e^{-((\frac{x_j-1}{2})^2 + (\frac{x_i+1}{2})^2)}.$$

Ejercicio. Calcular

$$\int_0^1 \left[\int_{e^{-x}}^{e^x} \operatorname{sen}\left(\frac{x}{1+y^2}\right) dx \right] dy$$

usando trapecios con n puntos en la dirección x , y m puntos en la dirección y .

Integrales impropias

Todas las reglas de cuadratura anteriores son aplicables cuando f es **acotada** en el intervalo $[a, b]$ y cuando éste es **finito**. Para aplicarlos a integrales impropias se debe previamente hacer ciertos ajustes que dependen de la integral misma.

Considere la integral

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

con integranda **no acotada** en a , pero convergente.

(1) Si es posible determinar analíticamente un r tal que

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

entonces se toma

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

(2) Si $\{r_k\}$ es una sucesión estrictamente decreciente con límite a , entonces se escribe

$$\int_a^b f = \int_{r_1}^b f + \int_{r_2}^{r_1} f + \cdots + \int_{r_{n+1}}^{r_n} f +$$

y se consideran sumandos hasta que

$$\left| \int_{r_{n+1}}^{r_n} f \right| \leq \epsilon.$$

- (3) A veces un cambio de variable es útil. Por ejemplo, para $f \in C^1([0, 1])$, el cambio $t^n = x$ transforma

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

- (4) Otras ideas.

Cuando el **intervalo de integración no es acotado**, las mismas ideas anteriores se pueden aplicar cambiando el punto de singularidad por ∞ . Por ejemplo, para

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

- (1) determinar analíticamente un r tal que

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

y luego se toma

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

- (2) Si $\{r_k\}$ es una sucesión estrictamente creciente con límite ∞ , entonces se escribe

$$\int_0^\infty f = \int_0^{r_1} f + \int_{r_1}^{r_2} f + \cdots + \int_{r_n}^{r_{n+1}} f +$$

y se consideran sumandos hasta que

$$\left| \int_{r_n}^{r_{n+1}} f \right| \leq \epsilon.$$

- (3) A veces un cambio de variable es útil. Por ejemplo, el cambio $x = \operatorname{tg}(t)$ transforma

$$\int_{-\infty}^\infty f(x) dx \quad \text{en} \quad \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{f(\operatorname{tg}(t))}{\cos^2(t)} dt.$$

- (4) Otras ideas.