5 Integración

5.1 Introducción

Dada una función $f(x)$ sobre un intervalo de interés $[a, b]$, se quiere obtener la integral I bajo la curva $f(x)$ en dicho intervalo donde:

$$f: \Re \to \Re$$

Los métodos de integración más comúnmente usados pueden clasificarse en dos grupos: los que emplean valores dados de la función f(x) en abscisas equidistantes y se conocen como fórmulas de Newton-Cotes, y aquellos que utilizan valores de f(x) en abscisas desigualmente espaciadas, determinadas por ciertas propiedades de familias de polinomios ortogonales, conocidas como fórmulas de cuadratura gaussiana.

Ahora, por el teorema fundamental del cálculo, se tiene que: toda función $f: \Re \to \Re$ que es continua en el intervalo I_x tiene una antiderivada F en I_x. Esto es:

$$\frac{dF(x)}{dx} = F'(x) = f(x) \text{ para toda } x \in I_x \tag{5.1}$$

La antiderivada F de f es única excepto por una constante aditiva arbitraria.

La integral definida de una función f sobre $[a, b]$ esta definida para funciones integrables f como:

$$I(f: a, b) := \int_a^b f(x)dx \text{ para } [a, b] \subset I_x \tag{5.2}$$

Si f es continua en $[a, b] \subset I_x$, entonces, por el teorema fundamental del calculo se tiene:

$$I(f: a, b) = \int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a) \tag{5.3}$$

donde F es la antiderivada de f.

En la práctica comúnmente no se pueden evaluar directamente las integrales $I(f: a, b)$, sino que se hace a través de las llamadas formulas de cuadratura Q. Las principales razones de esto son:

1) Las expresiones funcionales par la antiderivada F de una función f son conocidas solo para algunas pocas funciones sencillas f.
2) La función f es conocida solo empíricamente en puntos discretos $x_k \in [a, b]$
3) La antiderivada F puede ser representada en una forma cercana, sin embargo, encontrar F o calcular $F(a)$ y $F(b)$ requiere de mucho tiempo o no puede hacerse con precisión debido a la complejidad de F.

Sino se puede evaluar directamente $I(f: a, b)$, entonces tenemos que utilizar otros métodos. Una posible alternativa son los métodos de integración de sumas pesadas Q, formadas a partir de valores funcionales $f(x_k)$ de la integral en ciertos nodos discretos $x_k \in [a, b]$, los cuales son multiplicados o pesados por ciertos pesos A_k.

$$Q(f: a, b) = \sum_k A_k f(x_k) \approx \int_a^b f(x)dx \text{ , donde } x_k \in [a, b] \tag{5.4}$$

Estas sumas imitan la definición de la *integral de Riemann*. Alternativamente, una integral definida puede aproximarse por sumas de productos que involucran valores funcionales y aquellos de la derivada de f en ciertos nodos x_k. Tales formulas de cuadratura Q pueden aproximar valores de la integral definida $I\,(f : a, b)$.

Por ejemplo:

$$Q^R(f: a, b) = (b - a)f(a) \approx \int_a^b f(x)dx \tag{5.5}$$

Lo cual es llamado *formula del rectángulo*, construido para el intervalo de referencia $[a, b]$.

Si se quiere determinar un valor aproximado de $I\,(f : a, b)$ usando esta formula del rectángulo, debemos particionar el intervalo $[a, b]$

$$P: a = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_n = b \tag{5.6}$$

En subintervalos $[t_k, t_{k+1}]$ de longitud $h_k := t_{k+1} - t_k$. En conjunto $P = \{t_0, \ldots, t_n\}$ es llamado partición del intervalo de integración. Debido a la linearidad de la integración se tiene:

$$f(x)dx = \int_{t_0}^{t_1} f(x)dx + \int_{t_1}^{t_2} f(x)dx + \cdots + \int_{t_{n-1}}^{t_n} f(x)dx \tag{5.7}$$

,

Y por lo tanto se puede aplicar la formula del rectángulo $Q^R(f : t_k, t_{k+1})$ a cada subintervalo $[t_k, t_{k+1}]$.

Consecuentemente la formula sumada del rectángulo

$$Q_{hk}^R(f: a, b) = \sum_{k=0}^{n-1} (t_{k+1} - t_k) f(t_k) \approx \int_a^b f(x)dx \tag{5.8}$$

Es una aproximación para $I\,(f : a, b)$.

La diferencia entre el valor real de una integral y el resultado dado por una fórmula de cuadratura para un subintervalo es llamado el *error local de cuadratura*. La diferencia entre el valor real de una integral y el resultado de la formula sumada de cuadratura es llamado el *error global de cuadratura*. Este error puede ser reducido a cualquier tamaño realizando una partición más fina del intervalo de integración. Por lo tanto, conociendo una solo formula de cuadratura podría ser suficiente en teoría para evaluar numéricamente todas las integrales definidas. Pero una partición más fina, requerirá más evaluaciones $f(t_k)$. Por lo tanto, para economizar será necesario determinar los pesos óptimos A_k y los posibles nodos x_k, de manera que:

$$Q(f: a, b) = \sum_k A_k f(x_k) \tag{5.9}$$

aproxime bien a $\int_a^b f(x)dx$ para un pequeño número de términos.

5.2 Formulas de cuadratura con interpolación

Para un intervalo de referencia dado $[a, b]$, se debería construir formulas de cuadratura Q que evalúen exactamente las integrales de los polinomios del grado más alto posible. Asumimos que los valores $y_k = f(x_k)$ son conocidos en $n + 1$ nodos distintos x_k, con $k = 0, ..., n$, pero no necesariamente equidistantes, en el intervalo de referencia $[a, b]$

El problema sugiere conectar los $n + 1$ puntos de interpolación $(x_k, y_k = f(x_k))$ por un polinomio de interpolación p de grado al menos n y evaluar la integral definida de p sobre $[a, b]$: $I(p;\ a,\ b)$, la cual es una aproximación de la integral deseada $I(f;\ a,\ b)$. Considerando la diferencia de la interpolación $R(x)$ podemos expresar como:

$$f(x) = p(x) + R(x), \text{ para } x \in [a, b] \tag{5.10}$$

y por lo tanto la integral $I(f;$ a, $b)$:

$$\begin{cases} I(f\colon a,b) = \int_a^b f(x)dx = Q(f\colon a,b) + E(f;a,b) \\ Q(f\colon a,b) = I(p\colon a,b) = \int_a^b p(x)dx \\ E(f\colon a,b) = I(R\colon a,b) = \int_a^b R(x)dx \end{cases} \tag{5.11}$$

donde $Q(f;a,b)$ es el resultado de la formula de cuadratura y $E(f;a,b)$ es el residuo asociado de la cuadratura. La suma de Q y E es llamada regla de integración.

El remanente de la cuadratura puede escribirse como:

$$E(f\colon a,b) = \int_a^b R(x)dx = \int_a^b \big(f(x) - p(x)\big)dx \tag{5.12}$$

Si f - p alternan en signo en $[a, b]$, entonces los errores cometidos positivos y negativos al evaluar $I(f{:}a,b)$ pueden neutralizarse de manera que el error resultante de la integración sea pequeño, aunque p no sea una buena aproximación de f. Esto sugiere que la integración puede tener algunos errores.

En general una formula de cuadratura puede ser representada por:

$$Q(f\colon a,b) = \sum_{k=o}^{n} A_k f(x_k) = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \cdots + A_n f(x_n) \tag{5.13}$$

5.3 Métodos de Newton-Cotes

Para estimar la integral $I = \int_a^b f(x)dx$, los métodos de Newton-Cotes funcionan en general en dos pasos.

1.- Se divide el intervalo [a, b] en n intervalos de igual amplitud cuyos valores extremos son sucesivamente

$$x_i = x_0 + i\frac{b-a}{n},\ i = 0, 1, 2, \ldots, n \tag{5.14}$$

Para quedar en la nueva notación $x_0 = a$ y $x_n = b$

2.- Se aproxima $f(x)$ por un polinomio de grado n, $p_n(x)$ y se integra para obtener la aproximación de I.

Método del trapecio

En el caso de $n = 1$, el intervalo de integración [a, b] queda tal cual y $x_0 = a$ y $x_1 = b$; la aproximación polinomial de f(x) es una línea recta (un polinomio de primer grado $p_1(x)$) y la aproximación a la integral es el área del trapezoide bajo esta línea recta.

Para realizar la integración es $I \approx \int_{x_o}^{x_1} p_1(x)dx$, es preciso seleccionar una de las formas de representación del polinomio $p_1(x)$, y como $f(x)$ está dada para valores equidistantes de x con distancia h, la elección lógica es una de las fórmulas en diferencias finitas. Eligiendo diferencias finitas hacia delante tendremos que:

$$f(x) \approx p_1(x) \tag{5.15}$$

donde $p_1(x)$ es,

$$p_1(x) = p(x_0 + sh) = f(x_0) + s\Delta f(x_0) \tag{5.16}$$

Remplazando $p_1(x)$ en la integral se tiene:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_{x_0}^{x_1} [f(x_0) + s\Delta f(x_0)]\,dx \tag{5.17}$$

Para realizar la integral de lado derecho de la ecuación 5.17 es necesario tener a toda la integral en términos de la nueva variable s.

Considerando

$$x = x_0 + sh$$

se tiene que la diferencial de x queda en términos de s de la siguiente manera:

$$dx = hds$$

Para que los límites de integración x_0 y x_1 a su vez queden en términos de s, se sustituyen por x en $x = x_0 + sh$ y se despeja s lo que da respectivamente:

$x_0 = x_0 + sh$, $s = 0$
$x_1 = x_0 + sh$, $s = 1$

$$\int_{x_0}^{x_1} [f(x_0) + s\Delta f(x_0)]dx = \int_0^1 h[f(x_o) + s\Delta f(x_0)]ds \tag{5.18}$$

que al integrar queda:

$$h\int_{0}^{1}[f(x_o)+s\Delta f(x_0)]ds = h\left[sf(x_0)+\frac{s^2}{2}\Delta f(x_0)\right]\Bigg|_0^1$$
$$= h\left[f(x_0)+\frac{\Delta f(x_0)}{2}\right] \tag{5.19}$$

y como $\Delta f(x_0) = f(x_0+h) - f(x_0$ se llega a:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0)+f(x_1)] \tag{5.20}$$

Método de Simpson

Si $n = 2$; es decir el intervalo de integración $[a, b]$ se divide en dos subintervalos, y se tendrán tres abscisas dadas por 5.14:

$$x_0 = a$$
$$x_1 = x_0 + 1\frac{(b-a)}{2} = \frac{1}{2}(b+a)$$
$$x_2 = b$$

La función $f(x)$ se aproxima mediante un polinomio de grado 2 (una parábola) y la aproximación a la integral será dada por el área bajo el segmento de parábola comprendida entre $f(x_0)$ y $f(x_2)$. Esto es:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \int_{x_1}^{x_2} p_2(x)dx \tag{5.21}$$

Para realizar esta integración se utilizan la formula de Newton en diferencias finitas hacia delante para expresar $p_2(x)$.

$$p_2(x) = p_2(x_0+sh) = f(x_0) + s\Delta f(x_0) + \frac{s(s-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0) \tag{5.22}$$

Y al sustituir $p_2(x)$ y expresar toda la integral en términos de la nueva variable s, nos queda:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_2} p_2(x)dx = h\int_{0}^{2} p_2(x_0+sh)ds \tag{5.23}$$

$$h\int_{0}^{2} p_2(x_0+sh)ds = h\int_{0}^{2}\left[f(x_0)+s\Delta f(x_0)+\frac{s(s-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0)\right]ds \tag{5.24}$$

$$= h\left[sf(x_0)+\frac{s^2}{2}\Delta f(x_0)+\frac{s^3}{3!}\Delta^2 f(x_0)-\frac{s^2}{4}\Delta^2 f(x_0)\right]\Bigg|_0^2 \tag{5.24}$$

$$= h\left[2f(x_0) + 2\Delta f(x_0) + \frac{1}{3}\Delta^2 f(x_0)\right] \quad (5.25)$$

A partir de las definiciones de la primera y segunda diferencias finitas

$$\Delta f(x_0) = f(x_0 + h) - f(x_0) = f(x_1) - f(x_0) \quad (5.26)$$

y

$$\Delta^2 f(x_0) = f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) + f(x_0) = f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0) \quad (5.27)$$

se tiene que:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] \quad (5.28)$$

Caso general

En el caso más general, el intervalo de integración $[a, b]$ se divide en n subintervalos y da lugar a $n+1$ abscisas equidistantes $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$, con $x_0 = a$ y $x_n = b$. El polinomio de interpolación es de n-ésimo grado $p_n(x)$.

La aproximación a la integral I esta dada por:

$$\int_a^b f(dx) \approx \int_{x_0}^{x_n} p_n(x)dx = h\int_0^n p_n(x_0 + sh)ds \quad (5.29)$$

$$\begin{aligned} &= h\int_0^n \left[f(x_0) + s\Delta f(x_0) + \frac{s(s-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0) + \frac{s(s-1)(s-2)}{3!}\Delta^3 f(x_0)\right. \\ &\qquad \left. + \cdots + \frac{s(s-1)\ldots(s-(n-1))}{n!}\Delta^n f(x_0)\right] ds \end{aligned} \quad (5.30)$$

Con la integración de los cinco primeros términos se tiene:

$$\begin{aligned} &h\int_0^n p_n(x_0 + sh)ds \\ &\qquad = h\left[sf(x_0) + \frac{s^2}{2}\Delta f(x_0) + \left(\frac{s^3}{6} - \frac{s^2}{4}\right)\Delta^2 f(x_0)\right. \\ &\qquad + \left(\frac{s^4}{24} - \frac{s^3}{6} + \frac{s^2}{6}\right)\Delta^3 f(x_0) \\ &\qquad \left. + \left(\frac{s^5}{120} - \frac{s^4}{16} + \frac{11s^3}{72} - \frac{s^2}{8}\right)\Delta^4 f(x_0) + \cdots\right]\Bigg|_0^n \end{aligned} \quad (5.31)$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\left[nf(x_0) + \frac{n^2}{2}\Delta f(x_0) + \left(\frac{n^3}{6} - \frac{n^2}{4}\right)\Delta^2 f(x_0) + \left(\frac{n^4}{24} - \frac{n^3}{6} + \frac{n^2}{6}\right)\Delta^3 f(x_0) + \left(\frac{n^5}{120} - \frac{n^4}{16} + \frac{11n^3}{72} - \frac{n^2}{8}\right)\Delta^4 f(x_0) + \cdots\right] \tag{5.32}$$

A continuación, se dan las formulas de Newton-Cotes para integrar cuando n = 1, 2, 3, 4 y 5.

n =1 (método trapezoidal)

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] \qquad (5.)$$

n =2 (método Simpson 1/3)

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$$

n =3 (método Simpson 3/8)

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{3h}{8}[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)]$$

n =4

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{2h}{45}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$$

n =5

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{5h}{288}[19f(x_0) + 75f(x_1) + 50f(x_2) + 50f(x_3) + 75f(x_4) + 19f(x_5)]$$

5.4 Extrapolación de Richardson

La extrapolación de Richardson son un conjunto de técnicas que genera mejores aproximaciones a los resultados buscados o aproximaciones equivalentes a métodos de alto orden, a partir de las aproximaciones obtenidas con algún método de bajo orden y pocos cálculos. Estas aproximaciones están basadas en el análisis del error de truncamiento.

Supongamos que el error de truncamiento de cierto algoritmo de aproximación de la integral

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

se expresa por:

$$E = ch^r f^r$$.

en donde c es independiente de h, r es un entero positivo y ξ un punto desconocido del (a, b). Luego de obtener dos aproximaciones de I empleando h_1 y h_2, llamar a dichas aproximaciones I_1 y I_2 respectivamente y despreciar errores de redondeo, se puede escribir:

$$I - I_1 = ch_1^r f_1^r$$.
$$I - I_2 = ch_2^r f_2^r$$

Estas dos últimas ecuaciones se dividen miembro a miembro y como $f^{(r)}(\xi_1)$ y $f^{(r)}(\xi_2)$ son prácticamente iguales, se tiene:

$$\frac{I - I_1}{I - I_2} = \frac{ch_1^r f_1^r}{ch_2^r f_2^r}$$.

de donde:

$$I = \frac{h_1^r I_2 - h_2^r I_1}{h_1^r - h_2^r}$$.

Particularmente se tiene que $h_2 = h_1/2$ y entonces la ecuación anterior se simplifica a:

$$I \approx \frac{2^r I_2 - I_1}{2^r - 1}$$.

A este proceso se le conoce como extrapolación de Richardson y es efectivo cuando $f^{(r)}(x)$ no varía bruscamente en (a, b) y no cambia de signo en dicho intervalo. En estos casos las ecuaciones anteriores permiten obtener una mejor aproximación a I a partir de I_1 y I_2 sin repetir el proceso de integración y con cálculos breves.

En el método trapezoidal, se tiene $r = 2$ y la ecuación anterior toma la forma:

$$I \approx \frac{2^r I_2 - I_1}{2^r - 1} = \frac{4I_2 - I_1}{3}$$.

5.5 Integración de Romberg

Para sistematizar la integración de Romberg en la aproximación trapezoidal, denótense por $I_k^{(0)}$ las aproximaciones de I obtenidas empleando $2k$ trapezoides. Ahora para obtener mejores resultados mediante $I_k^{(0)}$ y $I_{k+1}^{(0)}$, se aplica la extrapolación de Richardson

$$I \approx \frac{2^2 I_{k+1}^{(0)} - I_k^{(0)}}{2^2 - 1}.$$

Este resultado se denota por $I_k^{(0)}$ y se genera la cuarta columna de la tabla siguiente.

k	**Número de trapezoides 2*k***	**Aproximación trapezoidal**	**Primera Extrapolación**	**Segunda Extrapolación**	**...**
0	1	$I_0^{(0)}$			
1	2	$I_1^{(0)}$	$I_0^{(1)}$		
2	4	$I_2^{(0)}$	$I_1^{(1)}$	$I_0^{(2)}$	
3	8	$I_3^{(0)}$	$I_2^{(1)}$	$I_1^{(2)}$	...
4	16	$I_4^{(0)}$	$I_3^{(1)}$	$I_2^{(2)}$	...
. . .	. . .	. . .	. . .	. . .	

Estos valores sirven para producir una segunda extrapolación y obtener una mejor aproximación de I. Con el empleo de $I_k^{(1)}$ y $I_{k+1}^{(1)}$, se llega a:

$$I \approx \frac{2^4 I_{k+1}^{(1)} - I_k^{(1)}}{2^4 - 1}.$$

que se denota por $I_k^{(2)}$, con lo que se genera la quinta columna de la tabla. Este proceso puede continuar en tanto cada iteración responda al algoritmo

$$I \approx \frac{4^m I_{k+1}^{(m-1)} - I_k^{(m-1)}}{2^m - 1}; m = 1,2,3,\ldots.$$

Cuando los valores de $I_k^{(0)} \to I$ al crecer, los valores de la diagonal superior de la tabla convergen a I.

Integración anidada – Regla del Trapecio

Al aplicar repetidamente la regla del trapecio se obtiene para el primer trapecio:

$$I_0^{(0)} = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h_0}{2}[f(x_0) + f(x_1)]$$

con $x_0 = a$, $x_1 = b$ y $h_0 = b - a$.

Para la segunda ocasión se tiene que:

$$I_1^{(0)} = \int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx$$

con $x_0 = a$, $x_1 = (a + b)/2$, $x_2 = b$ y $h_1 = h_0/2$, de donde:

$$I_1^{(0)} = \frac{h_1}{2}[f(x_0) + f(x_1)] + \frac{h_1}{2}[f(x_1) + f(x_2)]$$

quedando al desarrollar:

$$I_1^{(0)} = \frac{h_1}{2}[f(x_0) + f(x_1) + f(x_1) + f(x_2)]$$

y reagrupando y sustituyendo h_1 por $h_0/2$, queda:

$$I_1^{(0)} = \frac{h_0}{4}[f(a) + f(b)] + \frac{h_0}{4}[2f(x_1)]$$

de donde:

$$I_1^{(0)} = \frac{I_0^{(0)}}{2} + \frac{h_0}{2}[f(x_1)]$$

Para obtener $I^{(0)}{}_2$ se tiene que $x_0 = a$, $x_1 = a + (b - a)/4$, $x_2 = (a + b)/2$, $x_3 = a + 3(b - a)/4$ y $x_4 = b$ y $h_2 = h_1/2$, quedando:

$$I_2^{(0)} = \frac{h_2}{2}[f(x_0) + f(x_1)] + \frac{h_2}{2}[f(x_1) + f(x_2)] + \frac{h_2}{2}[f(x_2) + f(x_3)] + \frac{h_2}{2}[f(x_3) + f(x_4)]$$

reagrupando:

$$I_2^{(0)} = \frac{h_2}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + 2f(x_3) + f(x_4)]$$

$$I_2^{(0)} = \frac{h_1}{4}\left[f(a) + 2f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] + \frac{h_1}{2}[f(x_2) + f(x_3)]$$

de donde:

$$I_2^{(0)} = \frac{I_1^0}{2} + \frac{h_1}{2}[f(x_2) + f(x_3)]$$