TEMA 31

Integración numérica. Métodos y aplicaciones

Jorge Navarro Camacho

Índice sistemático

1. Introducción

Uno de los problemas más complicados que aparecen en las diversas aplicaciones de las matemáticas en Ingenierías, Ciencias Biomédicas, Económicas, Estadística, etc., es el del cálculo de integrales definidas (áreas, volúmenes, superficies, probabilidades, etc.). La popularización de los ordenadores personales permite la resolución de este problema complejo por medio de la Integración numérica, que engloba una serie de métodos para el cálculo aproximado de integrales definidas mediante computadores (métodos iterativos). Estos métodos, además de aplicarse a funciones difíciles (o imposibles) de integrar, también pueden utilizarse sobre funciones dadas en forma de tabla, es decir, a funciones que sólo se conocen en unos cuantos puntos.

Comenzaremos estudiando algunos métodos de interpolación (polinomios de interpolación de Lagrange, ver tema 24) en los que se basarán algunos de los sistemas de integración más utilizados, denominados Métodos Cerrados de Newton-Cotes que consistirán, básicamente, en construir un polinomio de interpolación que aproxime la función a integrar para, posteriormente, aproximar su integral por la integral del polinomio. También veremos otro método, denominado Regla de Romberg, bastante más potente que los métodos basados en la interpolación, pero que necesita que la función a integrar sea sencilla, ya que se deberá evaluar en bastantes puntos.

2. Interpolación polinómica

A menudo se proporcionan datos obtenidos experimentalmente sobre alguna función como un conjunto discreto (finito) de puntos (pares). Sin embargo, a veces es necesario estimar la función en puntos intermedios entre los valores obtenidos. La idea de la interpolación (polinómica) es sencilla, obtener una función simple (un polinomio) que pase por todos los puntos disponibles y utilizarla para aproximar la función en los puntos desconocidos. Sólo estudiaremos los polinomios de interpolación de Lagrange, puesto que son los que utilizaremos en las fórmulas de integración de Newton-Cotes.

2.1. Interpolación lineal

La forma más sencilla de interpolación es la de conectar dos puntos con una línea recta. Así, dados dos puntos obtenidos experimentalmente $(x_0, f(x_0))$ y $(x_1, f(x_1))$ la ecuación de la recta que los une es

$$\frac{y - f(x_0)}{x - x_0} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

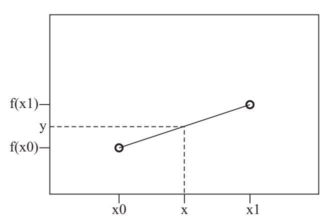

Figura 31.1

(ver figura 31.1) que también se puede escribir como

$$y = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0)$$

o como

$$y = f(x_0)\frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f(x_1)\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}.$$

Otra forma de construir el polinomio de interpolación lineal será resolver el sistema que resulta de sustituir los dos puntos iniciales sobre la función $y = ax + b$,

$$f(x_0) = ax_0 + b$$

$$f(x_1) = ax_1 + b$$

sistema que tiene solución única siempre que $x_0 \neq x_1$. De igual forma que se interpola

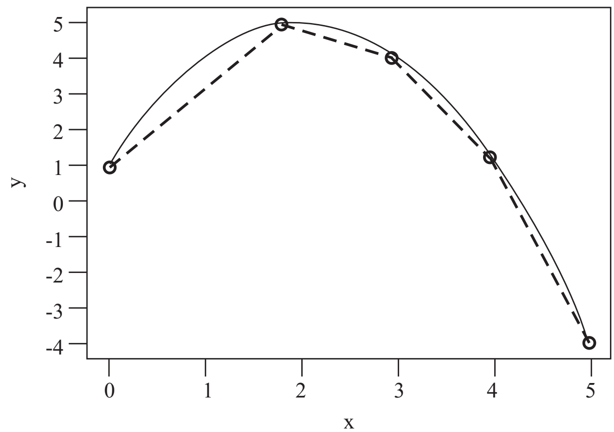

Figura 31.2

entre dos puntos, se puede interpolar por poligonales sobre cualquier conjunto finito de puntos uniendo a los puntos consecutivos (eje x) mediante líneas rectas (ver figura 31.2).

2.2. Interpolación cuadrática

De igual forma que se usa una recta cuando disponemos de dos puntos, podemos pensar en utilizar una parábola cuando dispongamos de tres puntos no alineados, obteniéndose el denominado polinomio de interpolación cuadrático.

Se puede comprobar que el polinomio de grado 2 que pasa por tres puntos dados es

$$y = f(x_0)\frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + f(x_1)\frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + f(x_2)\frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}.$$

Otra forma de construir el polinomio de interpolación cuadrático será resolver el sistema que resulta de sustituir los tres puntos iniciales sobre la función $y = ax^2+bx+c$,

$$f(x_0) = ax_0^2 + bx_0 + c$$

$$f(x_1) = ax_1^2 + bx_1 + c$$
$$f(x_2) = ax_2^2 + bx_2 + c$$

sistema que tiene solución única siempre que los puntos x_0, x_1 y x_2 sean distintos.

2.3. Interpolación polinómica de grado k

De igual forma que se usa una recta o una parábola si disponemos de $k + 1$ puntos podemos, en general, usar un polinomio de grado menor o igual que k. Veamos un resultado general.

Proposición 2.1 *Si $x_0, x_1 \dots x_k$ son puntos distintos y $f(x_0), \dots, f(x_k)$ son conocidos, entonces existe un único polinomio de grado menor o igual que k que coincide con f en dichos puntos.*

Demostración.

En primer lugar veamos que si existe, es único. Supongamos que P y Q son dos polinomios de grado menor o igual que k pasando por los puntos $(x_i, f(x_i))$. Entonces, el polinomio $R = P - Q$ tiene grado menor o igual que k y se anula en $k+1$ puntos, por lo que, por el teorema fundamental del álgebra, R debe ser cero.

Para ver que existe basta comprobar que el polinomio

$$P_k(x) = \sum_{i=0}^{k} f(x_i) \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

tiene grado menor o igual que k y que pasa por todos los puntos $(x_i, f(x_i))$.

Definición 2.1 *Llamaremos **polinomio de interpolación de Lagrange** de grado k sobre $(x_i, f(x_i))$, $i = 0, \dots, k$ a*

$$P_k(x) = \sum_{i=0}^{k} f(x_i) \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Otra forma de construir el polinomio de interpolación de grado k será resolver el sistema que resulta de sustituir los $k + 1$ puntos iniciales sobre la función $y = a_k x^k + {} + a_{k-1}x^{k-1} + \dots + a_0$,

$$\begin{aligned} f(x_0) &= a_k x_0^k + a_{k-1}x_0^{k-1} + \dots + a_0 \\ \vdots \quad & \quad \vdots \\ f(x_k) &= a_k x_k^k + a_{k-1}x_k^{k-1} + \dots + a_0 \end{aligned}$$

sistema que tiene solución única siempre que los puntos $x_0, x_1, \dots, x_k$ sean distintos. El error que se comete al sustituir una función por su polinomio de interpolación de grado k viene dado en el resultado siguiente:

Proposición 2.2 *Si $x_0, x_1, \ldots, x_k$ son puntos distintos en el intervalo $[a, b]$, $f(x_0), \ldots, f(x_k)$ son conocidos, $P_k(x)$ es el polinomio de interpolación de grado k y $f \in C^{k+1}[a, b]$, entonces, para cada $x \in [a, b]$ existe un valor $\xi(x) \in (a, b)$ tal que*

$$f(x) = P_k(x) + \frac{f^{(k+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_0)\ldots(x - x_k).$$

La demostración puede verse al final del tema.

En particular, si $k = 1$, es decir, si usamos interpolación lineal, el error viene dado por

$$e_1(x) = |f(x) - P_1(x)| = \left|\frac{f''(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1)\right|$$

y si $k = 2$, entonces

$$e_2(x) = |f(x) - P_2(x)| = \left|\frac{f'''(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\right|.$$

Nótese que el error disminuye cuando x está cerca de los puntos conocidos. Aunque el error dependa de x y de la función desconocida $f^{(k+1)}$, basta con conocer una cota superior C de $\left|f^{(k+1)}\right|$ -como ocurre, por ejemplo, con $\cos(x)$- para que podamos obtener una cota superior del error cometido en cualquier punto

$$e_k(x) \leq \frac{C}{(n+1)!}(b - a)^{k+1}.$$

Nota: todo esto corresponde al tema 24, por lo que se puede exponer de forma mucho más breve.

3. Integración numérica

El concepto de integral corresponde inicialmente al área encerrada por una función en un intervalo finito. Durante mucho tiempo la técnica principal para el cálculo práctico del área de una región fue la triangulación. Sin embargo, en la definición del concepto de integral matemática se utilizan los rectángulos como forma de aproximación del área de una región.

Recordaremos la definición de integral de Riemman. Dada una función f y una partición del intervalo $[a, b]$, $\pi = \{t_0 = a < t_1 < \ldots < t_n = b\}$, llamaremos sumas inferior y superior a

$$s(f, \pi) = \sum_{i=1}^{n} m_i(t_i - t_{i-1})$$

$$S(f, \pi) = \sum_{i=1}^{n} M_i(t_i - t_{i-1})$$

donde $m_i = \inf_{t_{i-1} \leq x \leq t_i} f(x)$ y $M_i = \sup_{t_{i-1} \leq x \leq t_i} f(x)$. Entonces, f es integrable Riemman si

$$\sup_{\pi} s(f, \pi) = \inf_{\pi} S(f, \pi)$$

representándose dicho número mediante

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sup_{\pi} s(f, \pi) = \inf_{\pi} S(f, \pi).$$

El teorema fundamental del cálculo integral y la regla de Barrow permiten el cálculo de integrales mediante una primitiva de f. Sin embargo, para algunas funciones es complicado o imposible el cálculo de una primitiva. En otras ocasiones el problema es que no se dispone de una expresión analítica de la función a integrar, sino únicamente de sus valores en una serie de puntos. En ambos casos, es necesario disponer de técnicas que nos permitan obtener, aunque sea de forma aproximada, el valor de I. La misma definición de Riemman puede ser utilizada para obtener aproximaciones (por defecto o por exceso) de I. El principal problema será el cálculo de m_i y M_i pero también pueden obtenerse buenas aproximaciones sustituyéndolos por $f(\xi_i)$ para un $\xi_i \in [t_{i-1}, t_i]$. Veamos otros métodos para aproximar I.

4. Fórmulas de integración de Newton-Cotes

Los métodos de Newton-Cotes son los más usuales dentro de la integración numérica. Se basan en la estrategia de reemplazar la función a integrar por una función más sencilla (por ejemplo un polinomio de interpolación). Veamos los más usuales.

4.1. Regla del trapecio simple

La más sencilla de las fórmulas de Newton-Cotes consiste en sustituir el integrando por un polinomio interpolador de primer orden

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \int_a^b P_1(x)dx.$$

Para ello basta conocer f en a y b, con lo que

$$\int_a^b P_1(x)dx = \int_a^b f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a)dx = f(a)(b - a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}\frac{(b - a)^2}{2}$$
$$= (b - a)\frac{f(b) + f(a)}{2}$$

expresión que recibe el nombre de regla trapezoidal, ya que equivale a aproximar el área bajo f por el área del trapecio que se forma con los puntos $(a, f(a))$ y $(b, f(b))$ (ver figura 31.3). Nótese que también equivale a sustituir f por la constante $[f(a) + f(b)]/2$.

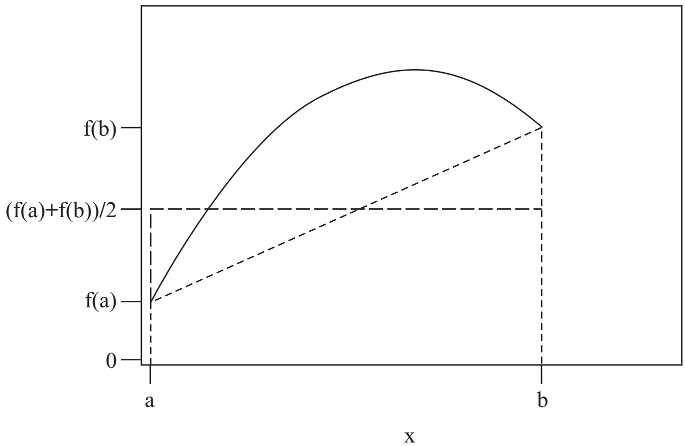

Figura 31.3

Veamos qué error se comete. Si recordamos, se tenía

$$f(x) - P_1(x) = \frac{f''(\xi(x))}{2!}(x-a)(x-b)$$

e, integrando,

$$\int_a^b f - \int_a^b P_1 = \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2!}(x-a)(x-b)dx$$

y, aplicando el teorema de valor medio del cálculo integral, existirá un $\delta \in (a, b)$ tal que

$$\begin{aligned}
\int_a^b f - \int_a^b P_1 &= \frac{f''(\delta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx = \frac{f''(\delta)}{2}\left[\frac{x^3}{3} - (a+b)\frac{x^2}{2} + abx\right]_a^b \\
&= \frac{f''(\delta)}{2}\left[\frac{b^3}{3} - (a+b)\frac{b^2}{2} + ab(b-a) - \frac{a^3}{3} + (a+b)\frac{a^2}{2}\right] \\
&= \frac{f''(\delta)}{2}\frac{2b^3 - 3ab^2 - 3b^3 + 6ab^2 - 6a^2b - 2a^3 + 3a^3 + 3a^2b}{6} \\
&= \frac{f''(\delta)}{2}\frac{a^3 - 3a^2b + 3ab^2 - b^3}{6} = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\delta).
\end{aligned}$$

4.2. Regla del trapecio con segmentos múltiples

Como acabamos de ver, el error que se comente con la regla del trapecio es proporcional al cubo de la longitud del intervalo sobre el que se aplica, por lo que, si el intervalo es grande, no dará buenos resultados. Ahora bien, si se conoce el valor de la función en $n+1$ puntos en el intervalo de integración $(x_0 = a < x_1 < \ldots < x_n = b)$

podemos aplicar la regla del trapecio a cada uno de los intervalos correspondientes

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \simeq \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} P_1(x)dx$$

con lo que se obtiene

$$I \simeq \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1}) \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2}.$$

Note la similitud entre esta expresión y las sumas utilizadas para definir la integral de Riemman. Lo que se hace es sustituir los valores (desconocidos) máximo y mínimo de f por el promedio de los valores en los extremos (conocidos). En la práctica suele ocurrir que los puntos están igualmente espaciados $\left(x_i - x_{i-1} = h = \frac{(b-a)}{n}\right)$ con lo que

$$I \simeq h \sum_{i=1}^{n} \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} = h \left(\frac{f(x_0) + f(x_n)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right)$$

$$= (b-a) \frac{f(a) + f(b) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(a + i\frac{(b-a)}{n})}{2}.$$

Gráficamente, el método es equivalente a sustituir la función f por una poligonal que pase por los puntos conocidos de f (ver figura 31.2).

El error que se comete es la suma de los errores que se cometen en cada intervalo

$$E_{\text{Total}} = -\frac{h^3}{12} \sum_{i=1}^{n} f''(\delta_i) = -\frac{(b-a)^3}{12n^3} \sum_{i=1}^{n} f''(\delta_i)$$

donde $\delta_i \in [x_{i-1}, x_i]$. Si la segunda derivada está acotada

$$|f''(x)| \leq C$$

entonces

$$|E_{\text{Total}}| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} C$$

que tiende a cero si $n \to \infty$.

4.3. Regla de Simpson 1/3 simple.

La técnica consiste en aproximar la función a integrar por un polinomio de interpolación cuadrático, para lo que necesitaremos conocer el valor de la función en los puntos x_0, x_1 y x_2

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \int_a^b P_2(x)dx$$

donde P_2 viene dado por

$$P_2(x) = f(x_0)\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1)\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2)\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}.$$

Habitualmente $x_0 = a, x_2 = b$ y $x_1 = \frac{(a+b)}{2}$ y, en este caso, se tiene

$$\int_a^b P_2(x)dx = (b-a)\frac{f(a) + 4f(x_1) + f(b)}{6} = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$$

donde $h = x_i - x_{i-1} = \frac{b-a}{2}$. El error que se comete es

$$\int_{x_0}^{x_2} f'''(\xi(x))(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)dx$$

que, usando el desarrollo de Taylor en torno al punto x_1, es igual a

$$-\frac{1}{90}h^5 f^{(iv)}(\delta) = -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(iv)}(\delta)$$

(ver apéndice) para un $\delta \in (a, b)$.

4.4. Regla de Simpson 1/3 con segmentos múltiples

Como acabamos de ver, el error que se comete con la regla de Simpson $1/3$ es proporcional a la potencia quinta de la longitud del intervalo sobre el que se aplica, por lo que, si el intervalo es grande, no dará buenos resultados. Ahora bien, si se conoce el valor de la función en $n+1$ puntos en el intervalo de integración $(x_0 = a < x_1 < \ldots < x_n = b)$ y n es par (disponemos de un número impar de datos), podemos aplicar la regla de Simpson a cada uno de los intervalos $[x_{2i-2}, x_{2i}]$ para $i = 1, 2, \ldots, n/2$

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n/2}\int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)dx \simeq \sum_{i=1}^{n/2}\int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} P_2(x)dx$$

con lo que, si los puntos están igualmente espaciados $(h = x_i - x_{i-1})$, se obtiene

$$I \simeq \frac{h}{3}\sum_{i=1}^{n/2}[f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-2}) + f(x_{2i})]$$

$$= \frac{x_n - x_0}{3n}\left[f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n/2-2} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-2}) + f(x_n)\right].$$

El error total se puede obtener mediante

$$E_{\text{Total}} = -\frac{1}{90}h^5 \sum_{i=1}^{n/2} f^{(iv)}(\delta_i) = -\frac{(b-a)^5}{90n^5} \sum_{i=1}^{n/2} f^{(iv)}(\delta_i)$$

donde $\delta_i \in [x_{2i-2}, x_{2i}]$. Si la derivada cuarta está acotada

$$\left| f^{(iv)}(x) \right| \leq C$$

entonces

$$|E_{\text{Total}}| \leq \frac{(b-a)^5}{180n^4} C$$

que tiende a cero si $n \longrightarrow \infty$. Aunque las derivadas no son comparables, si la cotas son similares, la regla de Simpson $1/3$ es más precisa que la regla del trapecio, aunque tiene el inconveniente de que se necesita un número impar de puntos (mientras que la del trapecio se puede usar para cualquier número de puntos).

4.5. Regla de Simpson 3/8 simple

La técnica consiste en aproximar la función a integrar por un polinomio de interpolación de grado 3, para lo que necesitaremos conocer el valor de la función en 4 puntos x_0, x_1, x_2 y x_3

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \int_a^b P_3(x)dx$$

donde P_3 viene dado por la expresión general de los polinomios de Lagrange (ver sección 2). Suponiendo que los puntos están igualmente espaciados, es decir $x_0 = a$, $x_3 = b$, $x_1 = a + h$ y $x_2 = a + 2h$, donde $h = x_i - x_{i-1} = \dfrac{b-a}{3}$, en este caso se obtiene

$$\int_a^b P_3(x)dx = \frac{3h}{8}\left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)\right]$$

de donde le viene el número del nombre (Regla de Simpson $3/8$). El error que se comete es igual a

$$-\frac{3}{80}h^5 f^{(iv)}(\delta) = -\frac{(b-a)^5}{6480} f^{(iv)}(\delta)$$

para un $\delta \in (a, b)$. Puede observarse que la regla de Simpson $3/8$ simple es algo más precisa $6480/2880$ que la $1/3$, sin embargo, tiene el inconveniente de necesitar un punto más.

4.6. Regla de Simpson 3/8 con segmentos múltiples

Como acabamos de ver, el error que se comete con la regla de Simpson $\dfrac{1}{3}$ es proporcional a la potencia quinta de la longitud del intervalo sobre el que se aplica, por lo que, si el intervalo es grande, no dará buenos resultados. Ahora bien, si se conoce el valor de la función en $n+1$ puntos en el intervalo de integración $(x_0 = a < x_1 < \ldots < x_n = b)$ y n es múltiplo de tres, podemos aplicar la regla de Simpson a cada uno de los intervalos $[x_{3i-3}, x_{3i}]$ para $i = 1, 2, \ldots, \frac{n}{3}$

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{\frac{n}{3}} \int_{x_{3i-3}}^{x_{3i}} f(x)dx \simeq \sum_{i=1}^{\frac{n}{3}} \int_{x_{3i-3}}^{x_{3i}} P_3(x)dx$$

con lo que, si los puntos están igualmente espaciados $(h = x_i - x_{i-1})$, se obtiene

$$I \simeq \frac{3h}{8} \sum_{i=1}^{\frac{n}{3}} [f(x_{3i-3}) + 3f(x_{3i-2}) + 3f(x_{3i-1}) + f(x_{3i})]$$

$$= \frac{x_n - x_0}{3n} \left[f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{\frac{n}{3}-3} f(x_{3i}) + 3\sum_{i=1}^{\frac{n}{3}} f(x_{3i-2}) + 3\sum_{i=1}^{\frac{n}{3}} f(x_{3i-1}) + f(x_n) \right].$$

El error total se puede obtener mediante

$$E_{\text{Total}} = -\frac{3}{80} h^5 \sum_{i=1}^{\frac{n}{3}} f^{(iv)}(\delta_i) = -\frac{3(b-a)^5}{80n^5} \sum_{i=1}^{\frac{n}{3}} f^{(iv)}(\delta_i)$$

donde $\delta_i \in [x_{3i-3}, x_{3i}]$. Si la derivada cuarta está acotada

$$\left| f^{(iv)}(x) \right| \leq C$$

entonces

$$|E_{\text{Total}}| \leq \frac{(b-a)^5}{80n^4} C$$

que tiende a cero si $n \rightarrow \infty$. Note que, aunque la regla de Simpson $\frac{3}{8}$ simple es más precisa que la $\frac{1}{3}$, al aplicarse sobre intervalos mayores, la regla de Simpson $\frac{3}{8}$ en segmentos múltiples es peor que la regla $\frac{1}{3}$ si tomamos el mismo número de puntos en ambas. Sí sería mejor si se toman los mismos intervalos de integración (es decir, un punto más en cada intervalo). Sin embargo, cuando n sea impar y múltiplo de 3 $(3, 9, 15, \ldots)$, podemos usarla en lugar de la regla $\frac{1}{3}$.

4.7. Regla de Simpson para un número par de puntos

En general, si tenemos un número par de puntos (n impar mayor que 4), podemos optar por aplicar la regla de Simpson $\frac{3}{8}$ sobre el intervalo $[x_0, x_3]$ (usando x_1 y x_2) y aplicar la regla $\frac{1}{3}$ al resto de los intervalos $(x_3 \ldots, x_n)$, ya que queda un número impar de puntos $(n-2)$ mediante

$$I \simeq \frac{3h}{8}[f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)] + \frac{h}{3}\sum_{i=3}^{\frac{n+1}{2}}[f(x_{2i-3})+4f(x_{2i-2})+f(x_{2i-1})]$$

y el error será

$$E_{\text{Total}} = -\frac{3}{80}h^5 f^{(iv)}(\delta_1) - \frac{1}{90}h^5\sum_{i=3}^{\frac{n+1}{2}} f^{(iv)}(\delta_i).$$

5. Integración Romberg

Veamos un método diferente a los anteriores, ya que no utiliza ningún polinomio de interpolación para aproximar f. El método partirá de un valor aproximado de la integral de f (que puede obtenerse por cualquiera de los métodos anteriores), para conseguir paso a paso mejores aproximaciones de ésta.

Como veremos, el método sólo será aplicable a funciones conocidas (fácilmente calculables) o de las que se disponen gran cantidad de puntos. En primer lugar veremos el método de extrapolación de Richardson, en el que se basa la Regla de Romberg.

5.1. Método de extrapolación de Richardson

Como hemos visto en los apartados anteriores, cualquier método de integración sigue el modelo

$$I = \int_a^b f = I(h) + E(h)$$

donde $I(h)$ es el valor aproximado de la integral, $E(h)$ es el error que se comete y h es la distancia entre los puntos utilizados (o “paso”). Si tomamos dos valores diferentes de h, tendremos

$$I = I(h_1) + E(h_1) = I(h_2) + E(h_2). \tag{31.1}$$

Si, por ejemplo, usamos la regla trapezoidal, los errores vendrán dados por

$$E(h_j) \simeq -\frac{b-a}{12}h_j^2 C, \quad j = 1, 2$$

donde $f''(x) \simeq C$. De esta forma,

$$E(h_2) \simeq \frac{h_2^2}{h_1^2}E(h_1)$$

que junto con (31.1) da

$$E(h_1) - \frac{h_2^2}{h_1^2} E(h_1) = I(h_2) - I(h_1)$$

$$E(h_1) = \frac{I(h_2) - I(h_1)}{1 - \left(\frac{h_2}{h_1}\right)^2}$$

y se tiene

$$I \simeq I(h_1) + \frac{I(h_2) - I(h_1)}{1 - \left(\frac{h_2}{h_1}\right)^2}$$

$$I \simeq \frac{-\left(\frac{h_2}{h_1}\right)^2}{1 - \left(\frac{h_2}{h_1}\right)^2} I(h_1) + \frac{1}{1 - \left(\frac{h_2}{h_1}\right)^2} I(h_2)$$

$$I \simeq \frac{h_2^2}{h_2^2 - h_1^2} I(h_1) + \frac{h_1^2}{h_1^2 - h_2^2} I(h_2)$$

que es una mejor aproximación del valor de la integral, ya que el error que se comete es

$$E = I - \frac{h_2^2}{h_2^2 - h_1^2} I(h_1) - \frac{h_1^2}{h_1^2 - h_2^2} I(h_2)$$

y como

$$I = [E(h_1) + I(h_1)] \frac{h_2^2}{h_2^2 - h_1^2} - [E(h_2) + I(h_2)] \frac{h_1^2}{h_2^2 - h_1^2}$$

entonces

$$\begin{aligned} E &= \frac{h_2^2}{h_2^2 - h_1^2} E(h_1) + \frac{-h_1^2}{h_2^2 - h_1^2} E(h_2) \\ &\simeq \frac{h_2^2}{h_2^2 - h_1^2} E(h_1) + \frac{-h_2^2}{h_2^2 - h_1^2} E(h_1) = 0. \end{aligned}$$

Evidentemente, el error final nunca es cero, pero sí se consigue aumentar su orden de convergencia a cero que es $o(E(h_1))$ y $o(E(h_2))$, es decir, mas rápido que ambos métodos por separado. En general, si aplicamos este método a dos reglas que nos den errores $E(h_1)$ y $E(h_2)$, la mejor aproximación será

$$I \simeq I(h_1) + \frac{I(h_2) - I(h_1)}{1 - \frac{E(h_2)}{E(h_1)}}$$

$$I \simeq \frac{E(h_2)}{E(h_2) - E(h_1)} I(h_1) + \frac{E(h_1)}{E(h_1) - E(h_2)} I(h_2). \tag{31.2}$$

5.2. Método de Romberg

El método consiste en aplicar de forma reiterada el método de extrapolación tomando como longitud de los intervalos $h, \frac{h}{2}, \frac{h}{4}$, etc. Si $h_2 = \frac{h_1}{2}$, se tiene

$$I \simeq \frac{\frac{h_1^4}{4}}{\frac{h_1^2}{4} - h_1^2} I(h_1) + \frac{h_1^2}{h_1^2 - \frac{h_1^2}{4}} I(h_2)$$

$$I \simeq \frac{4I(h_2) - I(h_1)}{3}.$$

El método así generado tendría un error $O(h^4)$. El proceso se puede repetir con $h_2 = \frac{h}{2}$ y $h_3 = \frac{h}{4}$, etc.

Además, si ya tenemos dos aproximaciones obtenidas por este método (por ejemplo las obtenidas con h y $\frac{h}{2}$ y con $\frac{h}{2}$ y $\frac{h}{4}$) de orden $O(h^4)$ se puede obtener una nueva aproximación (a partir de (31.2)), mediante

$$I \simeq \frac{16I(h_2) - I(h_1)}{15}$$

y el error sería $O(h^6)$. De nuevo, si tenemos dos aproximaciones podemos volver a aplicar el método, etc. En general, la ley de recurrencia que permite pasar de una etapa a otra que se obtiene de (31.2) es

$$I_{j,k} \simeq \frac{4^{k-1} I_{j+1,k-1} - I_{j,k-1}}{4^{k-1} - 1}$$

donde j denota el número de subintervalos $(h_j = \frac{h}{2^{j-1}})$ y k la etapa de aplicación de la regla de extrapolación. Puede demostrarse que $I_{j,k}$ tiende hacia el verdadero valor de I tanto si $j \to \infty$ como si $k \to \infty$ (para $h < 1$). Además, el error de la etapa k será de orden $O(h^{2k})$.

Los valores obtenidos por este método se suelen poner en forma de tabla triangular mediante:

$$\begin{array}{cccccc}
I_{1,1} & & & & & \\
 & I_{1,2} & & & & \\
I_{2,1} & & I_{1,3} & \dots & & \\
 & I_{2,2} & & & & \\
I_{3,1} & & & & & \\
\dots & \dots & \dots & \dots & I_{1,n} & \text{Solución final} \\
I_{n-2,1} & & & & & \\
 & I_{n-2,2} & & & & \\
I_{n-1,1} & & I_{n-2,3} & \dots & & \\
 & I_{n-1,2} & & & & \\
I_{n,1} & & & & &
\end{array}$$

Ejemplo. *Si para calcular la integral de la función*

$$f(x) = 0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5$$

en el intervalo $[0, 0.8]$, *aplicamos la regla trapezoidal*

$$I = (b-a)\frac{f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)}{2n}$$

(n es el número de intervalos) se obtienen

$$\begin{aligned} I_{1,1} &= 0.172 \text{ (un intervalo, } h = 0.8) \\ I_{2,1} &= 1.0688 \text{ (dos intervalos , } h_2 = \frac{h}{2}) \\ I_{3,1} &= 1.4848 \text{ (cuatro intervalos , } h_3 = \frac{h}{4}) \\ I_{4,1} &= 1.6008 \text{ (ocho intervalos , } h_4 = \frac{h}{8}). \end{aligned}$$

Con estos valores (primera etapa), usando

$$I \simeq \frac{4I(\frac{h}{2}) - I(h)}{3}$$

podemos calcular los valores para la segunda etapa (columna),

$$I_{1,2} = \frac{4I_{2,1} - I_{1,1}}{3} = 1.6234$$

$$I_{2,2} = \frac{4I_{3,1} - I_{2,1}}{3} = 1.6394$$

$$I_{3,2} = \frac{4I_{4,1} - I_{3,1}}{3} = 1.6405$$

en la siguiente etapa se obtienen

$$I_{1,3} = \frac{16I_{2,2} - I_{1,2}}{15} = 1.64053333$$

$$I_{2,3} = \frac{16I_{3,2} - I_{2,2}}{15} = 1.64053333$$

y la solución final es

$$I_{1,4} = \frac{64I_{2,3} - I_{1,3}}{63} = 1.64053333$$

(en la computación se usan más decimales de los que mostramos aquí). Note cómo la estabilidad numérica nos indica cuándo debemos detener el método. **Nota:** Cada opositor debe preparar sus propios ejemplos.

6. Apéndice

Los contenidos de esta sección no son, a nuestro juicio, indispensables.

Proposición 6.1 *Si $x_0, x_1, \ldots, x_k$ son puntos distintos en el intervalo $[a, b]$, $f(x_0), \ldots, f(x_k)$ son conocidos, $P_k(x)$ es el polinomio de interpolación de grado k y $f \in C^{k+1}[a, b]$, entonces, para cada $x \in [a, b]$ existe un valor $\xi(x) \in (a, b)$ tal que*

$$f(x) = P_k(x) + \frac{f^{(k+1)}(\xi(x))}{(k+1)!}(x - x_0)\ldots(x - x_k). \tag{31.3}$$

Demostración:

Para cada $x \in [a, b]$ distinto de $x_0, x_1, \ldots, x_k$ definimos la función

$$g(t) = f(t) - P_k(t) - [f(x) - P_k(x)]\,\frac{t - x_0}{x - x_0}\ldots\frac{t - x_k}{x - x_k}.$$

Como $f \in C^{k+1}[a, b]$ y P_k es un polinomio, entonces $g \in C^{k+1}[a, b]$. Además, $g(x) = 0$ y $g(x_i) = 0$ para todo i, es decir, se anula en $k + 2$ puntos. Utilizando el teorema de Rolle generalizado, existe un punto $\xi(x)$ donde $g^{(k+1)}$ se anula. Derivando se tiene

$$g^{(k+1)}(t) = f^{(k+1)}(t) - P_k^{(k+1)}(t) - [f(x) - P_k(x)]\,\frac{d^{k+1}}{dt^{(k+1)}}\left(\frac{t - x_0}{x - x_0}\ldots\frac{t - x_k}{x - x_k}\right)$$

$$= f^{(k+1)}(t) - [f(x) - P_k(x)]\,\frac{1}{x - x_0}\ldots\frac{1}{x - x_k}(k+1)!$$

y, como se anula en $\xi(x)$, tenemos (31.3).

Proposición 6.2 *El error que se comete en la regla de Simpson $\frac{1}{3}$ es*

$$\int_a^b f(x)dx - \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right] = -\frac{1}{90}h^5 f^{(iv)}(\delta) \tag{31.4}$$

para $h = x_i - x_{i-1}$, $a = x_0$, $b = x_2$ y un $\delta \in (a, b)$.

Demostración.

Usando el desarrollo de Taylor para f en torno al punto x_1,

$$f(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1) + \frac{1}{2}f''(x_1)(x - x_1)^2 + \frac{1}{6}f'''(x_1)(x - x_1)^3$$

$$+\frac{1}{24}f^{(iv)}(x_1)(x - x_1)^4 + \ldots$$

e integrando, se tiene

$$
\begin{aligned}
I = \int_a^b f(x)dx &= f(x_1)2h + \frac{1}{6}f''(x_1)2h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(x_1)\frac{2h^5}{5} + \dots \\
&= 2hf(x_1) + \frac{1}{3}f''(x_1)h^3 + \frac{1}{60}f^{(iv)}(x_1)h^5 + \dots
\end{aligned}
$$

Por otro lado, la aproximación de I usando Simpson es

$$
\begin{aligned}
I(h) &= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right] \\
&= \frac{h}{3}\Big[f(x_1) - f'(x_1)h + \frac{1}{2}f''(x_1)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x_1)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(x_1)h^4 + \dots \\
&\quad +4f(x_1) + f(x_1) + f'(x_1)h + \frac{1}{2}f''(x_1)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x_1)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(x_1)h^4 + \dots\Big] \\
&= 2hf(x_1) + \frac{1}{3}f''(x)h^3 + \frac{1}{36}f^{(iv)}(x_1)h^5 + \dots
\end{aligned}
$$

con lo que el error será

$$
E(h) = I - I(h) = \left(\frac{1}{60} - \frac{1}{36}\right)f^{(iv)}(x_1)h^5 + \dots = -\frac{1}{90}f^{(iv)}(x_1)h^5 + \dots
$$

que, por Taylor, también puede expresarse como en (31.4).