Tema 2: Derivación e integración numérica

Métodos Numéricos II. Grado en Matemáticas

Miguel A. Piñar y Teresa E. Pérez

Departamento de Matemática Aplicada
Facultad de Ciencias
Universidad de Granada

16 de abril de 2015

Introducción

Dado un conjunto de finito de datos

$$\{(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \ldots, (x_n, f(x_n))\},$$

se trata de estimar $f'(c)$ y/o $\int_a^b f(x)dx$.

Introducción

Dado un conjunto de finito de datos

$$\{(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \ldots, (x_n, f(x_n))\},$$

se trata de estimar $f'(c)$ y/o $\int_a^b f(x)dx$.

Necesidad de la derivación–integración numérica

1. f sólo se conoce en un conjunto finito de puntos $x_0, \ldots, x_n$,
2. f tiene una expresión complicada, difícil de derivar o integrar,
3. la expresión de la derivada (o la primitiva) de f es tan complicada que es necesario recurrir a aproximaciones para su evaluación,
4. existen funciones que, aún siendo integrables, carecen de primitivas expresables en términos de funciones elementales.

Aproximación de funcionales lineales

La derivación y la integración numérica son problemas muy similares en su planteamiento.
Ambas representan la aproximación de un determinado funcional lineal L por una combinación lineal finita de valores de la función

Fórmula de aproximación numérica

$$L(f) \simeq a_0 f(x_0) + \ldots + a_n f(x_n). \tag{1}$$

A los x_i se les llama los nodos y a los a_i se les llama pesos de la fórmula.

Error

$$R(f) \equiv L(f) - [a_0 f(x_0) + \ldots + a_n f(x_n)]\,. \tag{2}$$

Fórmulas de aproximación numérica

- Si $L(f) = f'(c)$, entonces es una fórmula de *derivación* numérica
- Si $L(f) = \int_a^b f(x)dx$, entonces es una fórmula de *integración* numérica (o de cuadratura)

Idea básica: Sustituir f por una función p aproximación de f (y para la cual es fácil obtener $L(p)$), y a continuación tomar

$$L(f) \simeq L(p)$$

Exactitud de una fórmula

Definición

La fórmula

$$L(f) \simeq a_0 f(x_0) + \ldots + a_n f(x_n),$$

se dice exacta para una función ϕ si

$$L(\phi) = a_0\phi(x_0) + \ldots + a_n\phi(x_n),$$

y se dice que es exacta en un espacio $\mathbb{V}$ si es exacta para toda función $\phi \in \mathbb{V}$.

Obviamente, una fórmula es exacta para ϕ si y sólo si el error es $R(\phi) = 0$.

Fórmulas de tipo interpolatorio

Definición

La fórmula de aproximación

$$L(f) \simeq a_0 f(x_0) + \ldots + a_n f(x_n),$$

se dice que es de tipo interpolatorio si

$$a_0 f(x_0) + \ldots + a_n f(x_n) = L(p_n)$$

siendo p_n el polinomio de interpolación en los datos

$$\{(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \ldots, (x_n, f(x_n))\}.$$

Equivalentemente, si

$$a_i = L(\ell_i(x)), \quad i = 0, 1, \ldots, n,$$

donde $\ell_i(x)$ son los polinomios de la base de Lagrange.

Exactitud de una fórmula de tipo interpolatorio

Teorema

La fórmula
$$L(f) \simeq a_0 f(x_0) + \ldots + a_n f(x_n),$$
es de tipo interpolatorio si y sólo si es exacta en $\mathcal{P}_n$.

Exactitud de una fórmula de tipo interpolatorio

Teorema

La fórmula

$$L(f) \simeq a_0 f(x_0) + \ldots + a_n f(x_n),$$

es de tipo interpolatorio si y sólo si es exacta en $\mathcal{P}_n$.

Si una fórmula es exacta en $\mathcal{P}_n$ se suele decir que su grado de exactitud es n.

Exactitud de una fórmula de tipo interpolatorio

Teorema

La fórmula

$$L(f) \simeq a_0 f(x_0) + \ldots + a_n f(x_n),$$

es de tipo interpolatorio si y sólo si es exacta en $\mathcal{P}_n$.

Si una fórmula es exacta en $\mathcal{P}_n$ se suele decir que su grado de exactitud es n.

Para construir fórmulas de tipo interpolatorio podemos:

1. Hallar el polinomio de interpolación y aplicar el funcional L.

Exactitud de una fórmula de tipo interpolatorio

Teorema

La fórmula

$$L(f) \simeq a_0 f(x_0) + \ldots + a_n f(x_n),$$

es de tipo interpolatorio si y sólo si es exacta en $\mathcal{P}_n$.

Si una fórmula es exacta en $\mathcal{P}_n$ se suele decir que su grado de exactitud es n.

Para construir fórmulas de tipo interpolatorio podemos:

1. Hallar el polinomio de interpolación y aplicar el funcional L.
2. Utilizar el método de los coeficientes indeterminados, imponiendo la exactitud de la fórmula para una base de $\mathcal{P}_n$.

Derivación Numérica

Si queremos obtener una fórmula de tipo interpolatorio para aproximar $f'(c)$, pueden seguirse varios procedimientos:

Derivación Numérica

Si queremos obtener una fórmula de tipo interpolatorio para aproximar $f'(c)$, pueden seguirse varios procedimientos:

1. Hallar $p(x)$ y aproximar mediante $f'(c) \simeq p'(c)$.

Derivación Numérica

Si queremos obtener una fórmula de tipo interpolatorio para aproximar $f'(c)$, pueden seguirse varios procedimientos:

1. Hallar $p(x)$ y aproximar mediante $f'(c) \simeq p'(c)$.
2. Imponer la exactitud en el espacio $\mathcal{P}_n$, lo que equivale a resolver el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n} a_i &= 0, \\ \sum_{i=0}^{n} a_i x_i^k &= k c^{k-1}, \quad 1 \leq k \leq n, \end{aligned}$$

   cuya matriz de coeficientes es de Vandermonde.

Derivación Numérica

Si queremos obtener una fórmula de tipo interpolatorio para aproximar $f'(c)$, pueden seguirse varios procedimientos:

1. Hallar $p(x)$ y aproximar mediante $f'(c) \simeq p'(c)$.
2. Imponer la exactitud en el espacio $\mathcal{P}_n$, lo que equivale a resolver el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n} a_i &= 0, \\ \sum_{i=0}^{n} a_i x_i^k &= k c^{k-1}, \quad 1 \leq k \leq n, \end{aligned}$$

   cuya matriz de coeficientes es de Vandermonde.
3. Hallar los ℓ_i de Lagrange, y tomar $a_i = \ell_i^{(k)}(c)$.

Error en las fórmulas de derivación numérica

Las fórmulas son más simples cuando los puntos x_i son equidistantes: $\ldots, c-2h, c-h, c, c+h, c+2h, \ldots$.

En este caso la expresión del error se puede obtener a partir de

Fórmula de Taylor

Si f es de clase $\mathcal{C}^{m+1}$ en un intervalo que contenga a c y $c+h$

$$f(c+h) = f(c) + f'(c)h + \ldots + \frac{f^{(m)}(c)}{m!}h^m + \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}h^{m+1}$$

con ξ comprendido entre c y $c+h$.

Error en las fórmulas de derivación numérica

Utilizaremos también el

Teorema de los valores intermedios generalizado

Sean $\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n \in [a, b]$, y sean $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$ números reales positivos.

Si $f \in \mathcal{C}[a, b]$, entonces existe ξ intermedio entre $\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n$, esto es, $\xi \in [a, b]$, tal que

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i f(\xi_i) = \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \right) f(\xi).$$

Fórmulas habituales de derivación numérica

Fórmulas con dos datos $\{(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1))\}$

1. Nodos $x_0 = c, \quad x_1 = c + h$

$$f'(c) \simeq \frac{f(c+h) - f(c)}{h}, \qquad R(f) = -\frac{f''(\xi)}{2} h$$

ξ entre c y $c + h$, f suficientemente regular

Fórmulas habituales de derivación numérica

Fórmulas con dos datos $\{(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1))\}$

1. Nodos $x_0 = c, \quad x_1 = c + h$

$$f'(c) \simeq \frac{f(c+h) - f(c)}{h}, \qquad R(f) = -\frac{f''(\xi)}{2} h$$

   ξ entre c y $c + h$, f suficientemente regular

2. Nodos $x_0 = c - h, x_1 = c$

$$f'(c) \simeq \frac{f(c) - f(c-h)}{h} \qquad R(f) = \frac{f''(\xi)}{2} h$$

   ξ entre $c - h$ y c, f suficientemente regular

Fórmulas habituales de derivación numérica

Fórmulas con dos datos $\{(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1))\}$

1. Nodos $x_0 = c, \quad x_1 = c + h$

$$f'(c) \simeq \frac{f(c+h) - f(c)}{h}, \qquad R(f) = -\frac{f''(\xi)}{2} h$$

   ξ entre c y $c + h$, f suficientemente regular

2. Nodos $x_0 = c - h, x_1 = c$

$$f'(c) \simeq \frac{f(c) - f(c-h)}{h} \qquad R(f) = \frac{f''(\xi)}{2} h$$

   ξ entre $c - h$ y c, f suficientemente regular

3. Nodos $x_0 = c - h, x_1 = c + h$

$$f'(c) \simeq \frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h}, \qquad R(f) = -\frac{f'''(\xi)}{6} h^2$$

   ξ entre $c - h$ y $c + h$, f suficientemente regular

Fórmulas habituales de derivación numérica

Fórmulas con tres datos $\{(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2))\}$

1. Nodos $x_0 = c, x_1 = c + h, x_2 = c + 2h$

$$f'(c) \simeq \frac{-f(c+2h) + 4f(c+h) - 3f(c)}{2h}, \qquad R(f) = \frac{f'''(\xi)}{3}h^2$$

ξ entre c y $c + 2h$, f suficientemente regular

Fórmulas habituales de derivación numérica

Fórmulas con tres datos $\{(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2))\}$

1. Nodos $x_0 = c, x_1 = c + h, x_2 = c + 2h$

$$f'(c) \simeq \frac{-f(c+2h) + 4f(c+h) - 3f(c)}{2h}, \qquad R(f) = \frac{f'''(\xi)}{3} h^2$$

   ξ entre c y $c + 2h$, f suficientemente regular

2. Nodos $x_0 = c - h, x_1 = c, x_2 = c + h$

$$f'(c) \simeq \frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h}, \qquad R(f) = -\frac{f'''(\xi)}{6} h^2$$

   ξ entre $c - h$ y $c + h$, f suficientemente regular

Fórmulas habituales de derivación numérica

Fórmulas con tres datos $\{(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2))\}$

1. Nodos $x_0 = c, x_1 = c + h, x_2 = c + 2h$

$$f'(c) \simeq \frac{-f(c+2h) + 4f(c+h) - 3f(c)}{2h}, \qquad R(f) = \frac{f'''(\xi)}{3} h^2$$

ξ entre c y $c + 2h$, f suficientemente regular

2. Nodos $x_0 = c - h, x_1 = c, x_2 = c + h$

$$f'(c) \simeq \frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h}, \qquad R(f) = -\frac{f'''(\xi)}{6} h^2$$

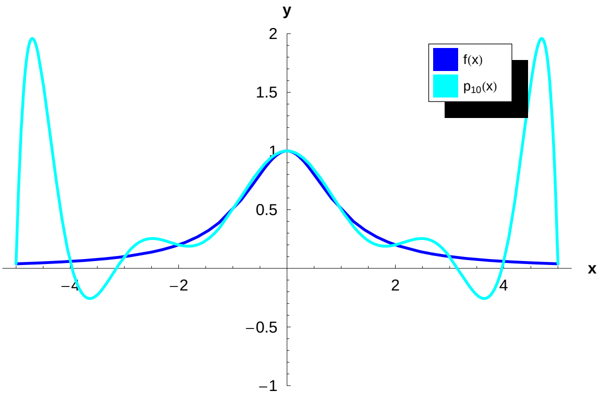
ξ entre $c - h$ y $c + h$, f suficientemente regular

3. Nodos $x_0 = c - 2h, x_1 = c - h, x_2 = c$

$$f'(c) \simeq \ldots, \qquad R(f) = \ldots$$

Mayor número de nodos no mejora los resultados

La derivación es un concepto local



Integración Numérica

Si queremos obtener una fórmula de tipo interpolatorio para aproximar la integral definida de una función real,

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

puedemos seguir varios procedimientos:

1. Hallar $p(x)$ el polinomio de interpolación en $x_0, x_1, \ldots, x_n$ y aproximar mediante

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

.

Integración Numérica

1. Imponer la exactitud en el espacio $\mathcal{P}_n$, lo que equivale a resolver el siguiente sistema:

$$\sum_{i=0}^{n} a_i x_i^k \quad = \quad \frac{1}{k+1}(b^{k+1} - a^{k+1}), \quad 0 \leq k \leq n,$$

cuya matriz de coeficientes es de Vandermonde.

Integración Numérica

1. Imponer la exactitud en el espacio $\mathcal{P}_n$, lo que equivale a resolver el siguiente sistema:

$$\sum_{i=0}^{n} a_i x_i^k \quad = \quad \tfrac{1}{k+1}(b^{k+1} - a^{k+1}), \quad 0 \leq k \leq n,$$

   cuya matriz de coeficientes es de Vandermonde.

2. Hallar los ℓ_i de Lagrange, y tomar

$$a_i = \int_a^b \ell_i(x)dx.$$

Error en las fórmulas de integración numérica

Error de interpolación

$$E(x) = f(x) - p_n(x) = f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x] \cdot \Pi(x),$$

donde $p_n(x)$ es el único polinomio de interpolación en $\{(x_0, f(x_0)),$ $(x_1, f(x_1)), \ldots, (x_n, f(x_n))\}$, y $\Pi(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$.

Error en las fórmulas de integración numérica

Error de interpolación

$$E(x) = f(x) - p_n(x) = f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x] \cdot \Pi(x),$$

donde $p_n(x)$ es el único polinomio de interpolación en $\{(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \ldots, (x_n, f(x_n))\}$, y $\Pi(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$.

Error de la fórmula de integración numérica

$$R(f) = \int_a^b E(x)\,dx = \int_a^b f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x] \cdot \Pi(x)\,dx.$$

Error en las fórmulas de integración numérica

Segundo teorema de la media del cálculo integral

Si f es una función continua en $[a, b]$, y g tiene signo constante y es integrable en $[a, b]$, entonces existe un punto $\eta \in [a, b]$ tal que

$$\int_a^b f(x)\, g(x)\, dx = f(\eta) \int_a^b g(x) dx.$$

Error en las fórmulas de integración numérica

Si $f \in \mathcal{C}^{n+1}[c, d]$, donde $[a, b] \subset [c, d]$, y $\Pi(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$ no cambia de signo en $[a, b]$, entonces

$$R(f) = f[x_0, x_1, \ldots, x_n, \eta] \int_a^b \Pi(x)\, dx.$$

Por otro lado, existe ξ un punto intermedio entre los nodos x_i y η, esto es, entre a y b tal que

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_n, \eta] = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!},$$

luego

$$R(f) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_a^b \Pi(x)\, dx.$$

Fórmulas simples de integración numérica

Fórmulas con un dato $\{(x_0, f(x_0))\}$

f suficientemente regular en $[a, b]$, $\xi \in (a, b)$

1. Fórmula del rectángulo inferior (o izquierda) $x_0 = a$

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

2. Fórmula del rectángulo superior (o derecha) $x_0 = b$

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

3. Fórmula del punto medio $x_0 = (a+b)/2$

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

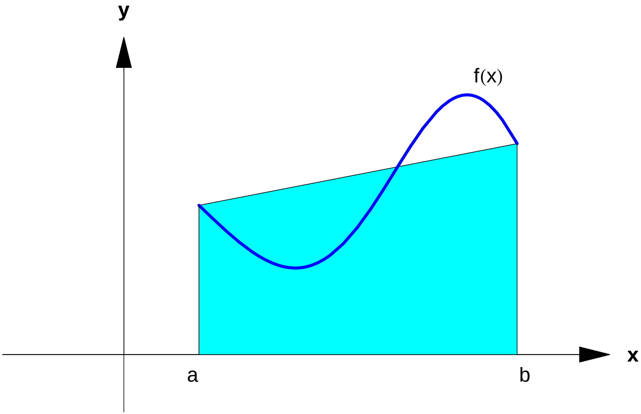
Fórmulas simples de integración numérica

Fórmula con dos datos $\{(a, f(a)), (b, f(b))\}$

- Fórmula del trapecio

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a), \qquad R(f) = -\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)^3$$

Interpretación de la fórmula del trapecio



Fórmulas simples de integración numérica

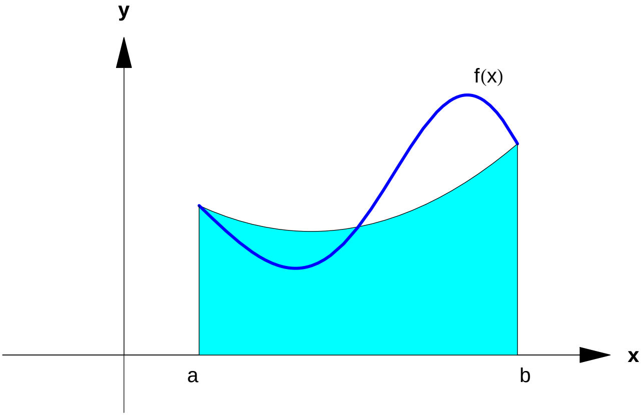
Fórmula con tres datos $\{(a, f(a)), (\frac{a+b}{2}, f(\frac{a+b}{2})), (b, f(b))\}$

Fórmula de Simpson

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

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

Interpretación de la fórmula de Simpson



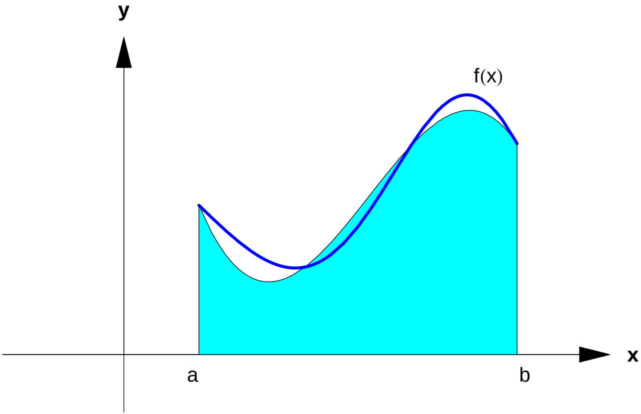
Fórmulas simples de integración numérica

Fórmula con cuatro datos: Fórmula de los 3/8 de Newton

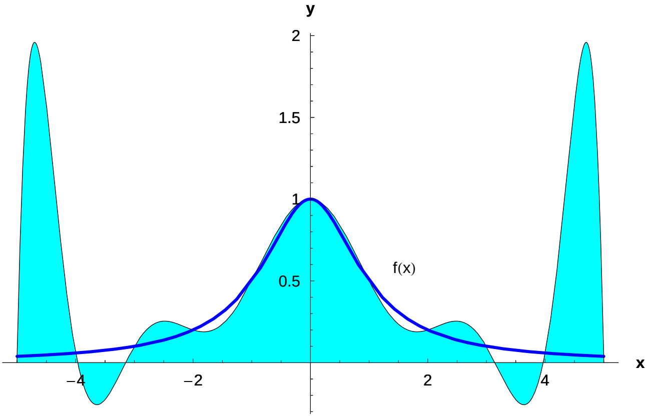
$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{b-a}{8}\left[f(a) + 3f\left(\frac{2\,a+b}{3}\right) + 3\,f\left(\frac{a+2\,b}{3}\right) + f(b)\right],$$

$$R(f) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{6480}(b-a)^5$$

Interpretación de la fórmula de los 3/8 de Newton



Mayor número de nodos no mejora los resultados



Fórmulas de Integración Compuestas

Con los métodos de integración vistos hasta el momento, si se desea disminuir el error es necesario utilizar un número de nodos cada vez más elevado y, además, estar seguros de que el proceso es convergente.

Fórmulas de Integración Compuestas

Con los métodos de integración vistos hasta el momento, si se desea disminuir el error es necesario utilizar un número de nodos cada vez más elevado y, además, estar seguros de que el proceso es convergente.

Un método que utilice muchos nodos tiene, además, el inconveniente de que el cálculo de los pesos puede ser muy costoso. Una forma de evitar estas dificultades es utilizar fórmulas compuestas.

Fórmulas de Integración Compuestas

Una fórmula compuesta se obtiene al aplicar una de las fórmulas obtenidas anteriormente a una partición del intervalo $[a, b]$ en subintervalos $[a_i, a_{i+1}]$, $i = 0, \ldots, N-1$; $a_i = a + ih$; $h = \frac{b-a}{N}$.

Fórmulas de Integración Compuestas

Una fórmula compuesta se obtiene al aplicar una de las fórmulas obtenidas anteriormente a una partición del intervalo $[a, b]$ en subintervalos $[a_i, a_{i+1}]$, $i = 0, \ldots, N-1$; $a_i = a + ih$; $h = \frac{b-a}{N}$.

Las fórmulas compuestas más utilizadas se obtienen a partir de fórmulas de Newton–Cotes muy simples, con pocos nodos.

Fórmulas de Integración Compuestas

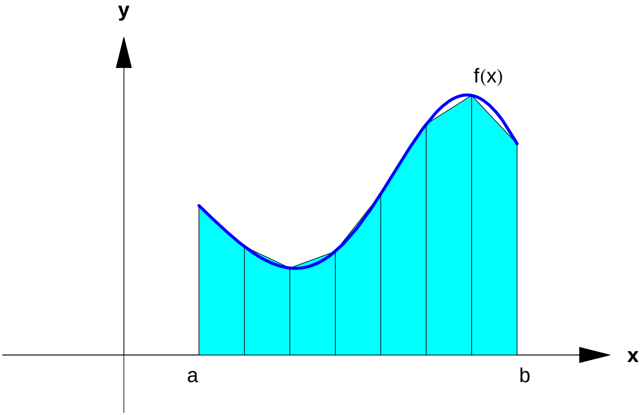
Así, por ejemplo, la fórmula del trapecio compuesta es

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left(f(a) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(a+ih) + f(b)\right)$$

y el error cometido, supuesta f de clase $\mathcal{C}^2$, es

$$R(f) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi), \quad a < \xi < b.$$

Interpretación de la fórmula del trapecio compuesta



Fórmulas de Integración Compuestas

La fórmula de Simpson compuesta es

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \frac{h}{6}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{i=1}^{N-1} f(a+ih)+4\sum_{j=0}^{N-1} f\big(a+ih+h/2\big)\right]\\ &= \frac{h}{6}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{i=1}^{N-1} f(a_i)+4\sum_{j=0}^{N-1} f(a_{i+1/2})\right]\end{aligned}$$

Para $h=(b-a)/N$. Y el error cometido, supuesta f de clase $\mathcal{C}^4$, es

$$R(f)=\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\xi), \quad a<\xi<b.$$

Integración de Romberg

Denotamos:

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

la fórmula del trapecio compuesta

$$T(f,h) = \frac{h}{2}\left(f(a) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(a+ih) + f(b) \right),$$

$$N \geq 1, \qquad h = \frac{b-a}{N}$$

Integración de Romberg

Teorema (fórmula de Euler–MacLaurin)

Si $f \in \mathcal{C}^{2n+1}[a,b]$, para algún $n \geq 1$, entonces

$$T(f,h) = I(f) + g_1\, h^2 + g_2\, h^4 + \ldots + g_n\, h^{2n} + \mathcal{O}(h^{2n+1}), \quad h \to 0,$$

donde

$$g_k = \frac{B_{2k}}{(2k)!} \left[f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) \right], \quad k = 1, 2, \ldots, n,$$

y los B_{2k} son los números de Bernouilli.

Luego $T(f,h)$ aproxima $I(f)$ con un error del orden $\mathcal{O}(h^2)$

Integración de Romberg

Para mejorar este resultado, podemos tomar:

$$\begin{aligned} T(f,h) &= I(f) + g_1\, h^2 + g_2\, h^4 + g_3\, h^6 + \ldots \\ T\left(f,\frac{h}{2}\right) &= I(f) + g_1 \left(\frac{h}{2}\right)^2 + g_2 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + g_3 \left(\frac{h}{2}\right)^6 + \ldots \end{aligned}$$

y eliminar el término en g_1, esto es,

$$\frac{4\,T\left(f,\frac{h}{2}\right) - T(f,h)}{3} = I(f) + \tilde{g}_2\, h^4 + \tilde{g}_3\, h^6 + \ldots$$

luego obtenemos una aproximación de $I(f)$ con un error del orden $\mathcal{O}(h^4)$

Integración de Romberg

Para $m = 0, 1, \ldots,$ y $1 \leq k \leq m$, definimos

$$
\begin{aligned}
R(m,0) &:= T\left(f, \frac{b-a}{2^m}\right), \\
R(m,k) &:= \frac{4^k\, R(m,k-1) - R(m-1,k-1)}{4^k - 1} \\
&= R(m,k-1) + \frac{R(m,k-1) - R(m-1,k-1)}{4^k - 1}
\end{aligned}
$$

Tabla de valores

$R(0,0)$			
$R(1,0)$	$R(1,1)$		
$R(2,0)$	$R(2,1)$	$R(2,2)$	
$R(3,0)$	$R(3,1)$	$R(3,2)$	$R(3,3)$

Integración de Romberg

Teorema

Sea $f \in \mathcal{C}^{2n+1}[a,b]$ para algún $n \geq 1$. Sea $m \geq 0$, $1 \leq k \leq n$

$$R(m,k) = I(f) + \mathcal{O}(h^{2k}), \quad h = \frac{b-a}{2^m} \to 0$$

En particular, para todo $k \leq n$, se cumple

$$\lim_{m\to\infty} R(m,k) = \int_a^b f(x)\,dx$$

Fórmulas de cuadratura gaussianas

- Las fórmulas de tipo interpolatorio con $n + 1$ puntos tienen, al menos, grado de exactitud n.
- Algunas fórmulas (por ejemplo, las de Newton–Cotes con número impar de nodos) superan este grado de exactitud.
- Eligiendo adecuadamente los nodos, ¿puede obtenerse más exactitud?
- ¿Cuál es el máximo grado de exactitud que se puede obtener para un número de nodos fijo?

Fórmulas de cuadratura gaussianas

Función peso

Una función $\omega(x)$ definida en un intervalo $(a, b) \subset \mathbb{R}$ se dice que es una función peso si

1. $\omega(x)$ es no negativa en (a, b)
2. $\omega(x)$ es integrable en (a, b)
3. $\omega(x) > 0$ en un subconjunto de (a, b) de forma que la integral

$$\int_a^b \omega(x) dx > 0.$$

Si (a, b) es un intervalo no acotado, impondremos también que existan los *momentos*

$$\mu_n = \int_a^b x^n \omega(x)\, dx, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Fórmulas de cuadratura gaussianas

Teorema

Sea $\omega(x)$ una función peso. Dada una integral de la forma

$$\int_a^b f(x)\omega(x)dx \simeq a_0 f(x_0) + a_1 f(x_1) + \ldots + a_n f(x_n). \tag{3}$$

Definimos $\pi(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)$. Entonces

(i) (3) tiene orden de exactitud $n + q$, $q \geq 0$, si y sólo si es de tipo interpolatorio, y los nodos x_j cumplen

$$\int_a^b \pi(x)x^k\omega(x)dx = 0, \quad k = 0, 1, \ldots, q - 1.$$

(ii) (3) no puede tener orden de exactitud mayor o igual a $2n + 2$.

(iii) Existen $n + 1$ puntos distintos $x_j \in (a, b)$, $j = 0, \ldots, n$, tales que (3) tiene orden de exactitud $2n + 1$.

Fórmulas de cuadratura gaussianas

- A las fórmulas que tienen orden de exactitud máximo se las denomina fórmulas de cuadratura gaussianas o fórmulas de Gauss.
- Así, si (3) es una fórmula de Gauss, tiene por nodos las raíces del polinomio ortogonal mónico $P_{n+1}(x)$ respecto al producto escalar

$$\langle f, g\rangle = \int_a^b f(x)g(x)\omega(x)dx.$$

- Algunas fórmulas gaussianas reciben nombres específicos que corresponden a funciones peso concretas. Por ejemplo,
  - si $\omega(x) = 1$, se denomina fórmula de Gauss–Legendre
  - si $\omega(x) = (1 - x^2)^{-\frac{1}{2}}$, se denomina de Gauss–Chebyshev

  en ambas se considera que el intervalo de integración es el $[-1, 1]$.

Fórmulas de cuadratura gaussianas

Teorema (Error en las fórmulas de cuadratura gaussianas)

Si $f \in \mathcal{C}^{2n+2}[a,b]$ el error en una fórmula gaussiana puede expresarse como

$$R(f) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b \pi^2(x)\omega(x)dx = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\langle P_{n+1}, P_{n+1}\rangle.$$

Fórmulas de cuadratura gaussianas

- Una propiedad importante de las fórmulas gaussianas es que sus coeficientes a_i son todos positivos. Ello se deduce de considerar la exactitud de la fórmula para los polinomios

$$f_j(x) = \frac{\pi^2(x)}{(x - x_j)^2}.$$

- Otra propiedad interesante es la convergencia de las fórmulas de cuadratura gaussianas al valor de la integral, cuando $n \to \infty$, para toda función continua en $[a, b]$.

Inconvenientes de las fórmulas de cuadratura gaussianas

- Para hallar los nodos hay que obtener un polinomio ortogonal y calcular sus raíces, que suelen ser números irracionales, así como los coeficientes de las fórmulas, lo que obliga a cometer errores de redondeo desde la misma fórmula.
- Si se tiene una fórmula de Gauss con n nodos y se desea obtener una con $n + 1$ nodos, es necesario rehacer todos los cálculos de nuevo, dado que no existe una ley de recurrencia para obtener los ceros de los polinomios ortogonales. Así pues, este tipo de fórmulas no es práctico para esquemas automáticos.

Referencias

- R. L. Burden, J. D. Faires, Análisis Numérico, 9ª ed. Thomson–Learning, México, 2011.
- D. Kincaid, W. Cheney, Análisis Numérico: las Matemáticas del cálculo científico. Addison Wesley, Argentina, 1994.