INTEGRACIÓN NUMÉRICA

Seguiremos la referencia [1].

En este tema vamos a estudiar métodos para el cálculo aproximado de integrales:

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx, \tag{1}$$

donde f es una función integrable en un intervalo acotado (a, b). El cálculo aproximado de integrales se denomina cuadratura. ¿ Por qué puede ser necesario usar cuadratura numérica?

- tal vez no se disponga de la expresión analítica de f sino solo de una tabla de valores de la función o un programa que permita evaluar f en un punto.
- puede que se conozca f y sea una función elemental pero su primitiva puede no ser una función elemental. Por ejemplo $f(x) = e^{-x^2}$.
- puede que el cálculo de la integral exacta precise de técnicas complejas o tediosas.

Reglas de cuadratura. Las reglas de cuadratura suelen estar formadas por una combinación lineal de valores nodales de la función f:

$$I_{N+1}(f) = \alpha_0 f(x_0) + \alpha_1 f(x_1) + \ldots + \alpha_N f(x_N). \tag{2}$$

Fijados N y los valores α_i y x_i, $i = 0, \ldots, N$ la expresión (2) nos da una aproximación al valor exacto de la integral (1). Los x_i se llaman abscisas o nodos de la regla de cuadratura, suponemos que son distintos dos a dos. Los nodos suelen pertenecer al intervalo $[a, b]$ pero no es imprescindible. Los α_i se llaman pesos de la regla de cuadratura.

Presentamos a continuación las cuatro reglas de cuadratura más sencillas.

Regla del rectángulo:

$$I^R(f) = (b - a)f(a).$$

Regla del punto medio:

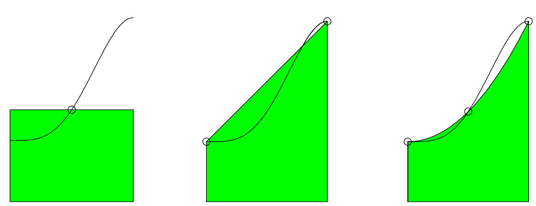
$$I^{PM}(f) = (b - a)f(c), \quad c = \frac{a + b}{2}.$$

Regla de los trapedios:

$$I^T(f) = \frac{b - a}{2} f(a) + \frac{b - a}{2} f(b).$$

Regla de Simpson:

$$I^S(f) = \frac{b - a}{6} f(a) + \frac{4(b - a)}{6} f(c) + \frac{b - a}{6} f(b), \quad c = \frac{a + b}{2}.$$



P. Medio Trapecios Simpson

En la figura podemos observar cómo aproximan las 3 últimas reglas de cuadratura, la zona en verde representa el área que calcula la regla de cuadratura como sustitución del valor real de la integral que es el área por debajo de la curva $f(x)$.

Grado de exactitud de las reglas de cuadratura. Una regla de cuadratura tiene grado de exactitud $M \geq 0$ si calcula exactamente la integral de cada polinomio de grado menor o igual que M pero no calcula exactamente la integral de todos los polinomios de grado $M+1$. Es decir, $I(f) = I_{N+1}(f)$, para todo f polinomio de grado hasta M.

Estudiemos el grado de exactitud de las reglas anteriores:

- regla del rectángulo. Si $f = 1$ entonces $I(f) = (b - a) = I^R(f)$. Si $f = (x - a)$ entonces $I(f) = (b - a)^2/2$ mientras que $I^R(f) = 0$. Por tanto, la regla tiene grado de exactitud 0.

- regla del punto medio. Es fácil ver (con un dibujo) que para $f = 1$ y $f = (x - a)$ la regla del punto medio es exacta. Dado que $\{1, (x - a)\}$ es una base del espacio de polinomios de grado menor o igual que 1 esto implica que la regla de cuadratura tiene al menos grado de precisión 1. Si calculamos el valor de la integral y la regla de cuadratura para $f(x) = (x - a)^2$ comprobamos que el grado de precisión es exactamente 1.
- regla del trapecio. Usando la base: $1, (x - a), (x - a)^2$ es muy fácil comprobar que la regla del trapecio tiene grado de precisión exactamente 1.
- regla de Simpson. El grado de precisión es 3. En este caso conviene usar la base

$$\left\{1, (x - c), (x - c)^2, (x - c)^3, (x - c)^4\right\}.$$

  Llamemos $h = (b - a)/2$.
  - Para $f = 1$ tenemos que $I(f) = (b - a) = 2h = I^S(f)$.
  - Para $f = (x - c)$, $I(f) = 0 = -h(b - a)/6 + h(b - a)/6 = I^S(f)$.
  - Para $f = (x - c)^2$ el valor de la integral es $I(f) = 2h^3/3 = 2h(-h)^2/6 + 2h(h^2)/6 = I^S(f)$.
  - Para $f = (x - c)^3$, $I(f) = I^S(f) = 0$.
  - Finalmente, para $f = (x - c)^4$ el valor de la integral $I(f) = 2h^5/5$ no coincide con $I^S(f) = 4h^5/6$.

Obtención de reglas de cuadratura. Fijado N y los nodos x_i, $i = 0, \ldots, N$ se trata de determinar los pesos α_i para obtener una regla de cuadratura con el mayor grado de precisión posible,

El método interpolatorio. Consiste en sustituir el integrando f por el polinomio interpolador de Lagrange de grado N, p, que coincide con f en los nodos x_i, $i = 0, \ldots, N$. De esta forma

$$\int_a^b f(x)dx \approx I_{N+1}(f) = \int_a^b p(x)dx.$$

Si escribimos p en forma de Lagrange tenemos

$$I_{N+1}(f) = f(x_0)\int_a^b l_0(x)dx + \ldots f(x_N)\int_a^b l_N(x)dx,$$

de modo que los pesos de la regla de cuadratura son las integrales de las funciones base:

$$\alpha_i = \int_a^b l_i(x)dx, \quad i = 0, \ldots, N.$$

La regla obtenida por este procedimiento se llama regla interpolatoria.

Theorem 1. *Dados $N \geq 0$ y $N + 1$ nodos x_i distintos dos a dos, la correspondiente regla de cuadratura interpolatoria tiene grado de precisión al menos N.*

Proof. Si f es un polinomio de grado hasta N su polinomio interpolador p coincide con f con lo que la regla es exacta. Como consecuencia, el grado de precisión de la regla de cuadratura es al menos N. □

Ejemplos.

- Para $N = 0$ la regla interpolatoria basada en el nodo $x_0 = a$ es la regla del rectángulo que tiene grado de precisión 0.
- Para $N = 0$ la regla interpolatoria basada en el nodo $x_0 = (a + b)/2$ es la regla del punto medio que tiene grado de precisión 1.
- Para $N = 1$ la regla interpolatoria basada en los nodos $x_0 = a$, $x_1 = b$ es la regla del los trapecios que tiene grado de precisión 1.
- Para $N = 2$ la regla interpolatoria basada en los nodos $x_0 = a$, $x_1 = (a + b)/2$ y $x_2 = b$ es la regla de Simpson que tiene grado de precisión 3.

Ejercicio. Compruebe que los ejemplos anteriores son ciertos escribiendo los correspondientes polinomios interpoladores en forma de Lagrange y calculando sus integrales.

El método de coeficientes indeterminados. Este método se basa en observar que la regla de cuadratura tiene grado de precisión N si y solo si $I_{N+1}(f) = I(f)$ para $f(x) = 1, x, \ldots, x^N$. Imponiendo estas condiciones obtenemos el sistema:

$$\begin{aligned}
&\alpha_0 + \alpha_1 + \ldots + \alpha_N = (b-a),\\
&\alpha_0 x_0 + \alpha_1 x_1 + \ldots + \alpha_N x_N = \frac{b^2-a^2}{2},\\
&\quad \ldots,\\
&\alpha_0 x_0^N + \alpha_1 x_1^N + \ldots + \alpha_N x_N^N = \frac{b^{N+1}-a^{N+1}}{N+1}.
\end{aligned} \tag{3}$$

Observemos que el anterior es un sistema de $N+1$ ecuaciones con $N+1$ incógnitas, los α_i, que tiene por matriz la matriz de Vandermonde que sabemos tiene determinante distinto de cero si los nodos son distintos dos a dos. Por tanto, concluimos que existe una única solución que nos da una regla de cuadratura con grado de precisión al menos N. Hemos probado el siguiente teorema.

Theorem 2. *Dados $N \geq 0$ y $N+1$ nodos distintos dos a dos existe una única regla de cuadratura de grado de precisisón al menos N. Los pesos de la regla se pueden calcular resolviendo el sistema* (3).

Theorem 3. *Dados $N \geq 0$ y $N+1$ nodos distintos dos a dos la regla interpolatoria es la única regla de grado de precisión al menos N.*

Proof. Como por el Teorema 2 sabemos que existe una única regla con grado de precisión al menos N y por el Teorema 1 la regla interpolatoria tiene grado al menos N se deduce que la única regla de grado al menos N es la interpolatoria y que por tanto la solución al sistema (3) es $\alpha_i = \int_a^b l_i(x)dx$. □

El método del desarrollo de Taylor. Vamos a ilustrar el método obteniendo una regla con dos nodos. Fijamos $N=1$ y los nodos $x_0 = a$ y $x_1 = b$. Si el integrando es suficientemente diferenciable tendremos

$$\begin{aligned}
f(b) &= f(a) + f'(a)(b-a) + f''(a)\frac{(b-a)^2}{2} + \ldots,\\
I_2(f) &= \alpha_0 f(a) + \alpha_1 f(b) = \alpha_0 f(a) + \alpha_1\left(f(a) + f'(a)(b-a) + f''(a)\frac{(b-a)^2}{2} + \ldots,\right).
\end{aligned} \tag{4}$$

Por otra parte

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= \int_a^b f(a) + f'(a)(x-a) + f''(a)\frac{(x-a)^2}{2} + \ldots dx\\
&= (b-a)f(a) + \frac{(b-a)^2}{2}f'(a) + \frac{(b-a)^3}{3!}f''(a) + \ldots.
\end{aligned} \tag{5}$$

Igualando los coeficientes de $f(a), f'(a), f''(a), \ldots$ en (4) y (5) obtenemos

$$\begin{aligned}
\alpha_0 + \alpha_1 &= b-a,\\
\alpha_1(b-a) &= \frac{(b-a)^2}{2},\\
\alpha_1\frac{(b-a)^2}{2} &= \frac{(b-a)^3}{3!},\\
\ldots
\end{aligned}$$

Se trata de satisfacer el mayor número posible de ecuaciones. En este caso, es claro que solo podemos satisfacer las dos primeras para los valores

$$\alpha_0 = \frac{b-a}{2}, \quad \alpha_1 = \frac{b-a}{2}.$$

La tercera ecuación no se satisface. Hemos vuelto a encontrar la regla de los trapecios. De la construcción de la fórmula se vuelve a deducir que el grado de precisión es 1. El método del desarrollo de Taylor puede verse como un método interpolatorio pensando que si f es un polinomio tiene un desarrollo de Taylor finito y se trata de igualar el mayor número de términos posibles, o lo que es lo mismo, llegar hasta el grado más alto posible para el polinomio.

En general para aplicar el método de Taylor seguiremos los siguientes pasos:

- Escoger un punto para hacer el desarrollo de Taylor. Puede ser uno de los nodos o cualquier punto que conduzca a simplificar los cálculos, en ocaciones el punto medio: $(a+b)/2$.
- Desarrollar los valores $f(x_i)$ en desarrollos de Taylor en torno al punto del apartado anterior.
- Desarrollar el integrando f en torno al mismo punto.

- Imponer que coincidan el mayor número de términos posibles en ambos desarrollos.

Error en las fórmulas de cuadratura. En este apartado vamos a medir el error que se comete al aproximar la integral por una fórmula de cuadratura: $E_{N+1} = I(f) - I_{N+1}(f)$. Se pueden probar las siguientes cotas de error para las fórmulas más conocidas:

- Regla del rectángulo. Si $f \in C^1[a,b]$ entonces existe $\eta \in [a,b]$ tal que
$$E^R(f) = \frac{(b-a)^2}{2} f'(\eta).$$
- Regla del punto medio. Si $f \in C^2[a,b]$ entonces existe $\eta \in [a,b]$ tal que
$$E^{PM}(f) = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\eta).$$
- Regla de los trapecios. Si $f \in C^2[a,b]$ entonces existe $\eta \in [a,b]$ tal que
$$E^T(f) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta).$$
- Regla de Simpson. Si $f \in C^4[a,b]$ entonces existe $\eta \in [a,b]$ tal que
$$E^S(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta).$$

En las fórmulas de error anteriores podemos observar que el orden de la derivada que aparece es una unidad superior al grado de exactitud de la regla de cuadratura. Esto es razonable porque para una regla de grado de exactitud M el error tiene que ser 0 si f es un polinomio de grado M y la derivada $M+1$ de un polinomio de grado M es nula. Observamos además que junto con la derivada $M+1$ aparece en el error la longitud del intervalo elevada a $M+2$. Si f es una velocidad, con unidades m/s y la variable x representa el tiempo s entonces la integral $\int(m/s)$ tiene unidades de m. El error debe tener las mismas unidades. Tenemos que las unidades de $f^{(M+1)}$ son $(m/s)s^{-M-1}$ que multiplicado por $(b-a)^{M+2}$ con unidades s^{M+2} nos da unidades en m.

Vamos a probar un lema que nos permitirá demostrar las fórmulas de error para las reglas de cuadratura.

Lemma 4. Sean α y g funciones reales en $[a,b]$ con $\alpha \geq 0$ y g continua. Supongamos que $A = \int_a^b \alpha(x)dx \neq 0$ y que existe $\int_a^b g(x)\alpha(x)dx$ entonces existe $\eta \in [a,b]$ tal que
$$\int_a^b g(x)\alpha(x)dx = g(\eta)\int_a^b \alpha(x)dx.$$

Proof. Como g es continua en $[a,b]$ alcanza un máximo y un mínimo en el intervalo: $m \leq g(x) \leq M$, $x \in [a,b]$. Observamos ahora que
$$m\int_a^b \alpha(x)dx \leq \int_a^b g(x)\alpha(x)dx \leq M\int_a^b \alpha(x)dx.$$
Y dividiendo por A:
$$m \leq \frac{\int_a^b g(x)\alpha(x)dx}{A} \leq M.$$
Como toda función continua toma todos los valores comprendidos entre el máximo y el mínimo deducimos que existe $\eta \in [a,b]$ tal que
$$g(\eta) = \frac{\int_a^b g(x)\alpha(x)dx}{A},$$
con lo que el resultado queda probado. □

Prueba de la cota de error en la regla del rectángulo. Sea $f \in C^1[a,b]$. Observamos en primer lugar que podemos escribir el error en la regla del rectángulo como
$$E^R(f) = \int_a^b (f(x) - f(a))dx.$$
Definimos la función
$$\begin{aligned} g(x) &= \frac{f(x)-f(a)}{x-a}, \quad x \neq a, \\ g(a) &= f'(a). \end{aligned}$$

Dado que $f \in C^1[a,b]$ la función g es continua. Por el Teorema 3 de la lección de interpolación de Taylor. Dado $\eta \in (a,b]$ existe $\eta^* \in [a,b]$ con

$$f(\eta) - f(a) = f'(\eta^*)(\eta - a).$$

Este hecho, unido a la definición de g en a, implica que para todo $\eta \in [a,b]$ existe $\eta^* \in [a,b]$ tal que $g(\eta) = f'(\eta^*)$. Por tanto

$$E^R(f) = \int_a^b \frac{f(x) - f(a)}{(x-a)}(x-a)dx = \int_a^b g(x)(x-a)dx.$$

Podemos aplicar ahora el Lema 4 con $\alpha(x) = (x-a)$. Concluimos entonces que existe $\eta \in [a,b]$ tal que

$$E^R(f) = g(\eta)\int_a^b (x-a)dx = g(\eta)\frac{(b-a)^2}{2} = f'(\eta^*)\frac{(b-a)^2}{2}.$$

Ejercicio. Obtenga la cota de error para la regla del punto medio con un razonamiento análogo al anterior.

<u>Indicación:</u> Se define la función $g(x) = (f(x) - f(c) - f'(c)(x-c))/(x-c)^2$ para $x \in [a,b]$, $x \neq c$ con $c = (a+b)/2$ y $g(c) = f''(c)/2$. La función g es continua. Se prueba que

$$E^{PM}(f) = \int_a^b (f(x) - f(c) - f'(c)(x-c))dx = \int_a^b g(x)(x-c)^2 dx$$

y se aplica el Lema 4 con $\alpha(x) = (x-c)^2$.

Reglas de cuadratura compuestas. Las reglas que hemos estudiado hasta ahora son de utilidad limitada aplicadas a un intervalo $[a,b]$ dado que, en vista de las cotas de error, excepto si el tamaño del intervalo es pequeño en comparación con el tamaño de la derivada, no hay garantía de que el error sea pequeño.

Aumentar el grado de precisión de las reglas de cuadratura no soluciona el problema. Es más conveniente, como veíamos con la interpolación, introducir una partición del intervalo

$$\Delta := a = x_0 < x_1 < \ldots < x_N = b, \tag{6}$$

y escribir

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \ldots + \int_{x_{N-1}}^{x_N} f(x)dx,$$

y aproximar cada una de las integrales por una de las reglas que hemos estudiado. Si aplicamos la regla del rectángulo compuesta obtendremos:

$$I^{RC}(f) = (x_1 - x_0)f(x_0) + (x_2 - x_1)f(x_1) + \ldots + (x_N - x_{N-1})f(x_{N-1}).$$

Aplicando la regla del punto medio:

$$I^{PMC}(f) = (x_1 - x_0)f(x_{1/2}) + (x_2 - x_1)f(x_{3/2}) + \ldots + (x_N - x_{N-1})f(x_{N-1/2}).$$

La regla del trapecio compuesta da lugar a:

$$\begin{aligned} I^{TC}(f) &= \frac{(x_1 - x_0)}{2}f(x_0) + \frac{(x_1 - x_0)}{2}f(x_1) + \frac{(x_2 - x_1)}{2}f(x_1) + \frac{(x_2 - x_1)}{2}f(x_2) + \ldots \\ &\quad + \frac{(x_N - x_{N-1})}{2}f(x_{N-1}) + \frac{(x_N - x_{N-1})}{2}f(x_N). \end{aligned}$$

Finalmente, la expresión de la regla de Simpson compuesta es:

$$\begin{aligned} I^{SC}(f) &= \frac{(x_1 - x_0)}{6}f(x_0) + \frac{4(x_1 - x_0)}{6}f(x_{1/2}) + \frac{(x_1 - x_0)}{6}f(x_1) + \ldots \\ &\quad + \frac{(x_N - x_{N-1})}{6}f(x_{N-1}) + \frac{4(x_N - x_{N-1})}{6}f(x_{N-1/2}) + \frac{(x_N - x_{N-1})}{6}f(x_N). \end{aligned}$$

Vamos a estudiar a continuación cual es el error que se comete al usar una regla de cuadratura compuesta. El error en las reglas compuestas va a ser la suma de los errores cometidos en cada una de las N integrales correspondientes a los subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$. Para la regla del rectángulo compuesta tenemos

$$\begin{aligned} E^{RC}(f) = I(f) - I^{RC}(f) &= \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx - (x_1 - x_0)f(x_0) \\ &+ \dots \\ &+ \int_{x_{N-1}}^{x_N} f(x)dx - (x_N - x_{N-1})f(x_{N-1}). \end{aligned}$$

Aplicando la fórmula de error de la regla del rectángulo en cada uno de los subintervalos obtenemos

$$E^{RC}(f) = \frac{(x_1 - x_0)}{2} f'(\eta_1) + \dots + \frac{(x_N - x_{N-1})^2}{2} f'(\eta_N),$$

donde $\eta_i \in [x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, \dots, N$.

A continuación vamos a probar un lema que nos permite dar una fórmula de error simplificada.

Lemma 5. Sea g una función continua en $[a, b]$, $\alpha_i \geq 0$, $i = 1, \dots, N$, no todos nulos, y $\eta_i \in [a, b]$, $i = 1, \dots, N$. Entonces, existe $\eta \in [a, b]$ tal que

$$\alpha_1 g(\eta_1) + \alpha_2 g(\eta_2) + \dots + \alpha_N g(\eta_N) = (\alpha_1 + \dots + \alpha_N)g(\eta).$$

Proof. Como g es una función continua en $[a, b]$ alcanza un máximo y un mínimo en dicho intervalo.

$$m \leq g(x) \leq M, \quad x \in [a, b].$$

Por tanto

$$m(\alpha_1 + \dots + \alpha_N) \leq \alpha_1 g(\eta_1) + \alpha_2 g(\eta_2) + \dots + \alpha_N g(\eta_N) \leq M(\alpha_1 + \dots + \alpha_N),$$

de donde

$$m \leq \frac{\alpha_1 g(\eta_1) + \alpha_2 g(\eta_2) + \dots + \alpha_N g(\eta_N)}{\alpha_1 + \dots + \alpha_N} \leq M.$$

Como toda función continua alcanza todos los valores comprendidos entre el mínimo y el máximo existe $\eta \in [a, b]$ tal que

$$g(\eta) = \frac{\alpha_1 g(\eta_1) + \alpha_2 g(\eta_2) + \dots + \alpha_N g(\eta_N)}{\alpha_1 + \dots + \alpha_N},$$

con lo que concluye la demostración. □

Si aplicamos el Lema 5 a la fórmula de error de la regla del rectángulo compuesta obtenemos que para algún $\eta \in [a, b]$

$$E^{RC}(f) = \frac{1}{2}\left[(x_1 - x_0)^2 + \dots + (x_N - x_{N-1})^2\right] f'(\eta).$$

Para $h = \max_{1 \leq i \leq N}(x_i - x_{i-1})$ tenemos que $(x_i - x_{i-1})^2 \leq h(x_i - x_{i-1})$ de donde

$$|E^{RC}(f)| \leq \frac{1}{2} h \left[(x_1 - x_0) + \dots + (x_N - x_{N-1})\right] f'(\eta) = \frac{1}{2} h(b - a)K_1,$$

donde K_1 es una cota de f' en $[a, b]$. Por tanto, si usamos la regla del rectángulo compuesta tenemos garantizada la convergencia lineal de la regla al valor de la integral cuando h tiende a 0.

Utilizando el mismo razonamiento, para la regla del punto medio se obtiene

$$\begin{aligned} E^{PMC} &= \frac{(x_1 - x_0)^3}{24} f''(\eta_1) \\ &+ \dots \\ &+ \frac{(x_N - x_{N-1})^3}{24} f''(\eta_N) \\ &= \frac{(x_1 - x_0)^3 + \dots + (x_N - x_{N-1})^3}{24} f''(\eta), \end{aligned}$$

donde $\eta_i \in [a, b]$, $i = 1, \dots, N$, $\eta \in [a, b]$. De aquí se deduce

$$|E^{PMC}| \leq \frac{1}{24} h^2 (b - a) K_2,$$

donde K_2 es una cota de la derivada segunda en $[a, b]$. En este caso la convergencia es cuadrática, cuando dividimos por 2 el diámetro de la partición la cota de error se divide por 4.

Para la regla de los trapecios compuesta obtenemos

$$\begin{aligned} E^{TC} &= -\frac{(x_1-x_0)^3}{12}f''(\eta_1) \\ &\quad - \dots \\ &\quad -\frac{(x_N-x_{N-1})^3}{12}f''(\eta_N) \\ &= \left[-\frac{(x_1-x_0)^3}{12} - \dots - \frac{(x_N-x_{N-1})^3}{12}\right] f''(\eta), \end{aligned}$$

donde hemos aplicado que, gracias al lema 5

$$\frac{(x_1-x_0)^3}{12}f''(\eta_1) + \dots + \frac{(x_N-x_{N-1})^3}{12}f''(\eta_N) = \left[\frac{(x_1-x_0)^3}{12} + \dots + \frac{(x_N-x_{N-1})^3}{12}\right] f''(\eta).$$

Por tanto

$$|E^{TC}(f)| \le \frac{1}{12}h^2(b-a)K_2,$$

donde K_2 es una cota de f'' en $[a,b]$ y tenemos convergencia cuadrática.

De la misma forma se obtiene (hágalo como ejercicio) para la regla de Simpson compuesta

$$|E^{SC}(f)| \le \frac{1}{2880}h^4(b-a)K_4,$$

donde K_4 es una cota de la derivada $f^{(4)}$ en $[a,b]$. La regla de Simpson compuesta converge por tanto con orden 4.

Relación con la interpolación polinónica a trozos. Al usr la regla de los trapecios compuesta sustituimos el integrando en $[x_{i-1},x_i]$ por la recta que interpola en esos dos nodos. En realidad la regla de los trapecios compuesta se obtiene sustituyendo f por su interpolante lineal a trozos en los nodos $x_0,x_1,\dots,x_N$. En el caso de la regla de Simpson, la regla compuesta se obtiene sustituyendo f por el interpolante cuadrático a trozos en los nodos $x_0,x_1,\dots,x_N$ y los puntos medios. El hecho de que los interpolantes a trozos convergen a la función es otra forma de acotar el error. Por ejemplo, recordemos que para el interpolante lineal a trozos disponemos de la siguiente cota de error (véase (5) del capítulo interpolación polinómica a trozos)

$$|f(x)-s(x)| \le \frac{1}{8}h^2K_2, \quad x\in[a,b].$$

De esta cota deducimos, para la regla del trapecio compuesta

$$|E^{TC}| \le \left|\int_a^b (f(x)-s(x))dx\right| \le \int_a^b |f(x)-s(x)|dx \le \frac{1}{8}h^2(b-1)K_2.$$

Observemos que esta cota es algo más grosera que la obtuvimos antes donde la fracción era $1/12$ en lugar de $1/8$.

Podemos observar que en el caso de la regla de los rectángulos compuesta la aproximación es la que se obtiene sustituyendo f por la función constante a trozos que coincide con f en los nodos $x_0,x_1,\dots,x_{N-1}$ (puede verse también como una suma de Riemann) y en el caso de la regla del punto medio compuesta como la aproximación que se obtiene integrando la función constante a trozos que coincide con f en los puntos medios de los intervalos.

Cuadratura gaussiana. Antes de introducir las reglas de cuadratura gaussiana vamos a estudiar unas nociones básicas sobre polinomios ortogonales. Dado un intervalo (a,b) y una función (que llamaremos función peso) $w(x)$ definida en (a,b) con $w(x)$ positiva excepto tal vez en un número finito de puntos donde es nula. Definimos el producto interno de dos funciones de cuadrado integrable respecto al peso $w(x)$ como

$$< f,g >_w = \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx.$$

Al espacio de funciones de cuadrado integrable respecto al peso $w(x)$ (f tal que $\int_a^b f(x)^2w(x)dx<\infty$) lo denotaremos por $L^2_w(a,b)$. Las funciones peso se definen de modo que exista $\int_a^b x^n w(x)dx$ para todo n.

Dada una función peso en (a,b) existe una familia de polinomios ortogonales en (a,b) respecto a esa función peso:

$$\{q_0, q_1, \dots q_n, \dots,\}$$

que verifican:

- el polinomio q_n tiene grado exactamente n
- $< q_n, q_m >_w = 0$ si $n \neq m$.
- los polinomios ortogonales son únicos (salvo una constante) y se pueden generar por recurrencia.

Polinomios de interés:

- Polinomios de Chebyshev. Son ortogonales en el intervalo $(-1, 1)$ respecto al peso $w(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$. Si denotamos por $T_n(x)$ el polinomio de grado n, se verifica la siguiente relación de recurrencia de tres términos:
$$T_0(x) = 1,\ T_1(x) = x,\ T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x).$$
Los polinomios de Chebyshev tienen la propiedad:
$$T_n(\cos(\theta)) = \cos(n\theta).$$
- Polinomios de Legendre. Son ortogonales en el intervalo $(-1, 1)$ respecto al peso $w(x) = 1$. Si denotamos por $L_n(x)$ el polinomio de grado n se cumple
$$L_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n}(x^2 - 1)^n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$
Además, verifican la siguiente relación de recurrencia de tres términos:
$$L_0(x) = 1,\ L_1(x) = x,\ L_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} x L_n(x) - \frac{n}{n+1} L_{n-1}(x).$$

Hasta ahora hemos supuesto que en la fórmula de cuadratura
$$I_{N+1}(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i),$$
los nodos x_i estaban fijos y buscábamos los coeficientes. Supongamos ahora que podemos elegir también los nodos $x_0, \ldots, x_N$. En ese caso disponemos de $2(N + 1)$ incógnitas. Si imponemos que la fórmula sea exacta para las funciones $1, x, \ldots, x^{2N+1}$ nos quedará un sistema no lineal. Las reglas de cuadratura que eligen los nodos para lograr el mayor grado de exactitud posible se llaman reglas de cuadratura gaussianas.

Vamos a buscar una fórmula interpolatoria de grado mayor posible. Para el error tendremos
$$E_{N+1}(f) \int_a^b f(x)dx - I_{N+1}(f) = \int_a^b (f(x) - p(x))dx = \int_a^b (x - x_0) \ldots (x - x_N) f[x_0, \ldots, x_N, x] dx,$$
utilizando la fórmula de error que vimos en el Teorema 4 en el capítulo interpolación polinómica de Lagrange. Llamemos
$$\omega(x) = (x - x_0) \ldots (x - x_N).$$
La fórmula de cuadratura será exacta para f si $f[x_0, \ldots, x_N, x]$ es ortogonal a $\omega(x)$ en $[a, b]$ respecto al peso 1. Esto significa justamente
$$\int_a^b \omega(x) f[x_0, \ldots, x_N, x] dx = 0.$$
Si f es un polinomio de grado $N + k + 1$ entonces $f[x_0, \ldots, x_N, x]$ es un polinomio de grado k. Buscamos nodos $x_0, x_1, \ldots, x_N$ de forma que $\omega(x)$ sea ortogonal al espacio de polinomios de grado menor o igual que k, con k lo mayor posible. Como $\omega(x)$ es un polinomio de grado $N + 1$ entonces podemos conseguir que sea ortogonal al espacio de polinomios de grado menor o igual que N. Por tanto, los nodos x_j son las $N + 1$ raíces distintas del polinomio de grado $N + 1$ ortogonal a los de grado N en $[a, b]$ respecto al peso 1. Como consecuencia, se cumple el siguiente teorema.

Theorem 6. *Una regla de cuadratura gaussiana puede tener a lo sumo grado de precisión $2N + 1$. Este grado se alcanza cuando los nodos x_i son las raíces del polinomio de grado $N + 1$ ortogonal a los de grado N en $[a, b]$ respecto al peso 1.*

Los polinomios ortogonales respecto al peso 1 en el intervalo $[-1, 1]$ son los polinomios de Legendre. Si la integral es en $[a, b]$ se puede hacer un cambio de variable para definir los polinomios ortogonales en dicho intervalo.

Ejemplo. Supongamos que queremos construir una regla de cuadratura gaussiana en el intervalo $[-1, 1]$ con 3 nodos. Los nodos van a ser los ceros del polinomio de Legendre $L_3(x)$ que tiene la propiedad de ser ortogonal a los polinomios de grado menor o igual que 2 en $[-1,1]$. Este polinomio es $L_3(x) = (5x^3-3x)/2$ (aplique la relación de recurrencia para los polinomios de Legendre) y sus ceros son $\pm\sqrt{3/5}, 0$. Ahora los pesos se determinan imponiendo que la regla sea exacta al integrar $1, x$ y x^2. De esta forma

$$\int_a^b f(x)dx \approx \alpha_0 f(0) + \alpha_1 f(\sqrt{3/5}) + \alpha_2 f(-\sqrt{3/5}).$$

Por tanto tendremos

$$\begin{aligned} 2 &= \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 \\ 0 &= \alpha_0 0 + \alpha_1\sqrt{3/5} - \alpha_2\sqrt{3/5} \\ \frac{2}{3} &= \alpha_0 0 + \alpha_1(3/5) + \alpha_2(3/5). \end{aligned}$$

Resolviendo el sistema obtenemos $\alpha_1 = \alpha_2 = 5/9$ y $\alpha_0 = 8/9$. Aunque solo hemos impuesto que la regla sea exacta para $1, x$ y x^2 debido a la forma en la que hemos elegido los nodos la regla va a ser exacta de grado $2N+1$ $(N = 2)$, es decir, 5.

Error en la regla de cuadratura.

Theorem 7. *Si $f \in C^{2N+2}[a,b]$ entonces el error en la regla de cuadratura gaussiana de grado $2N+1$ verifica*

$$E_{N+1}(f) = \frac{f^{(2N+2)}(\eta)}{(2N+2)!}\int_a^b (x-x_0)^2 \dots (x-x_N)^2 dx, \quad \eta \in [a,b].$$

Proof. Sea $p(x)$ el único polinomio de grado $2N+1$ que verifica (interpolante de Hermite) $p(x_j) = f(x_j)$, $p'(x_j) = f'(x_j)$, $j = 0,\dots,N$. Por las propiedades del polinomio y usando que la regla es exacta hasta grado $2N+1$ tenemos

$$E_{N+1}(f) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{j=0}^{N}\alpha_j f(x_j) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{j=0}^{n}\alpha_j p(x_j) = \int_a^b (f(x)-p(x))dx.$$

Usando ahora el Teorema 1 que nos proporciona el error en la lección de interpolación de Hermite deducimos

$$E_{N+1}(f) = \int_a^b \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(2N+1)!}(x-x_0)^2 \dots (x-x^N)^2 dx, \quad \xi \in [a,b].$$

Utilizando que $f^{(N+1)}$ es continua en $[a,b]$ y $\int_a^b (x-x_0)^2 \dots (x-x_N)^2 dx > 0$ es muy sencillo deducir la tesis del teorema (hágalo como ejercicio). $\square$

Cuadratura de Lobatto. Vamos a buscar una regla de cuadratura de la forma

$$\int_a^b f(x)dx \approx \alpha_0 f(a) + \alpha_1 f(x_1) + \dots + \alpha_{N-1} f(x_{N-1}) + \alpha_N f(b),$$

en la que, a diferencia de la regla anterior, hemos fijado los nodos a y b y dejamos libres los nodos $x_1,\dots,x_{N-1}$ y los pesos α_i, $i = 0,\dots,N$. Como tenemos $2N$ parámetros libres esperamos tener una regla de cuadratura de grado $2N-1$. Para buscar la única regla de cuadratura con este grado de precisión escribimos

$$E_{N+1}(f) = \int_a^b (f(x)-p(x))dx = -\int_a^b (x-a)(b-x)(x-x_1)\dots(x-x_{N-1})f[a,x_1,\dots,x_{N-1},b,x]dx.$$

Definimos la función peso positiva

$$w(x) = (x-a)(b-x).$$

Para que la regla tenga precisión $2N-1$ es necesario que $f[a,x_1,\dots,x_{N-1},b,x]$ sea ortogonal a $(x-x_1)\dots(x-x_{N-1})$ respecto al peso $w(x)$. Como $(x-x_1)\dots(x-x_{N-1})$ es un polinomio de grado $N-1$ entonces $f[a,x_1,\dots,x_{N-1},b,x]$ puede tener a lo sumo grado $N-2$ lo cual significa que f puede tener a lo sumo grado $N-2+(N+1) = 2N-1$. Por tanto, los nodos $x_1,\dots,x_{N-1}$ son los ceros del polinomio q_{N-1} de grado $N-1$ ortogonal a los de grado $N-2$ respecto al peso $w(x)$.

Vamos a ver que los nodos que buscamos son los $N-1$ ceros de la derivada del polinomio de grado N, p_N, ortogonal en $[a,b]$ respecto al peso 1 (y por tanto el trasladado a $[a,b]$ del polinomo de Legendre L_N.)

Theorem 8. *Sean $x_1, \ldots, x_{N-1}$ los ceros del polinomio ortogonal q_{N-1} de grado $N-1$ respecto al peso $w(x) = (x-a)(b-x)$ entonces $x_1, \ldots, x_{N-1}$ son los ceros de p'_N donde p_N es el polinomio ortogonal de grado N respecto al peso 1.*

Proof. Sea $r(x)$ un polinomio cualquiera de grado $N-2$ vamos a probar que

$$\int_a^b p'_N(x)r(x)(x-a)(b-x)dx = 0,$$

con lo que habremos terminado. Si integramos por partes, tenemos

$$\int_a^b p'_N(x)r(x)(x-a)(b-x)dx = 0 = p_N(x)r(x)(b-x)(x-a)\mid_a^b - \int_a^b p_N(x)(r(x)(x-a)(b-x))'dx.$$

Ahora el primer término es cero dado que evaluamos en a y b y el segundo es cero puesto que $(r(x)(x-a)(b-x))'$ tiene grado $N-1$ y p_N es ortogonal a los polinomios de grado hasta $N-1$ respecto a peso 1. $\square$

Cuadratura de Radau. De forma análoga a la cuadratura de Lobatto se puede probar que existe una única regla de cuadratura con grado de precisión $2N$ de la forma

$$\alpha_0 f(a) + \alpha_1 f(x_1) + \ldots + \alpha_N f(x_N).$$

En este caso, a diferencia de la cuadratura de Lobatto, fijamos solo el nodo a y nos quedan libres los nodos $x_1, \ldots, x_N$ y los $N+1$ pesos lo que nos da $2N+1$ parámetros libres que nos permiten determinar una única regla con grado de exactitud $2N$.

References

[1] Jesús María Sanz-Serna. *Diez Lecciones de Cálculo Numérico*, volume 26 of *Secretariado de Publicaciones e Intercambio Científico. Universidad de Valladolid*. Universidad de Valladolid, 1998.