



UNIVERSIDAD DE GRANADA

Máster Universitario en Física y Matemáticas

EL TÍTULO DEL TRABAJO
FIN DE MÁSTER

Trabajo Fin de Máster presentado por
Nombre Apellido1 Apellido2

Curso 2016/17

UNIVERSIDAD DE GRANADA

Máster Universitario en Física y Matemáticas

EL TÍTULO DEL TRABAJO
FIN DE MÁSTER

Trabajo Fin de Máster presentado por
Nombre Apellido1 Apellido2

Curso 2016/17

Tutor: Nombre Apellido1 Apellido2
Departamento: Matemática Aplicada
Área de Conocimiento: Matemática Aplicada

(Página de agradecimientos si los hay)
Thank you.

Índice

1. Derivación e integración numérica	1
1.1. Introducción	1
1.2. Fórmulas de tipo interpolatorio. Exactitud	2
1.3. Derivación numérica. Error	3
1.4. Integración numérica. Error	6
1.4.1. Fórmulas simples	6
1.4.2. Fórmulas compuestas	8
1.5. Integración Romberg	9
1.6. Fórmulas de cuadratura gaussiana	10
1.7. Práctica de laboratorio	12
1.8. Comentarios bibliográficos	12
Bibliografía	15

Capítulo 1

Derivación e integración numérica

La necesidad de derivar o integrar numéricamente una función f puede justificarse por varios motivos. En el mejor de los casos, puede ocurrir que conozcamos la expresión explícita de la función derivada o de la primitiva, pero la expresión puede ser tan complicada que es necesario recurrir a aproximaciones para su evaluación, que incluso puede provocar errores de igual o mayor magnitud que los cometidos en la propia derivación o integración numérica.

Un segundo motivo que justifica la inclusión de este tema podría ser la dificultad de derivar una función si ésta tiene una expresión complicada o difícil de derivar, o incluso, como ya saben los alumnos, existen funciones que, aún siendo integrables, carecen de primitivas expresables en términos de funciones elementales.

Finalmente, en muchos casos desconocemos la expresión explícita de la función que se necesita derivar o integrar, y sólo se conocen los valores de la función en un conjunto finito de puntos x_0, x_1, \dots, x_n .

1.1. Introducción

La derivación y la integración numérica son problemas muy similares en su planteamiento. Ambas representan la aproximación de un funcional lineal \mathcal{L} definido sobre un espacio de funciones \mathcal{F} por una combinación lineal finita \mathcal{L}_n de otros funcionales lineales más simples L_i

$$\mathcal{L}_n = \sum_{i=0}^n a_i L_i.$$

Dada una función $f \in \mathcal{F}$, una fórmula de derivación o integración numérica viene dada por la expresión

$$\mathcal{L}(f) \approx \mathcal{L}_n(f) = \sum_{i=0}^n a_i L_i(f). \quad (1.1.1)$$

Definiremos el *error* de la fórmula anterior para la función f como

$$R(f) = \mathcal{L}(f) - \mathcal{L}_n(f).$$

Así, diremos que la fórmula (1.1.1) es *exacta* para una función ϕ si

$$R(\phi) = 0,$$

y diremos que es exacta en un subespacio de funciones $V \subseteq \mathcal{F}$ si es exacta para toda función de V . Si una fórmula es exacta en $V = \Pi_n$ se suele decir que su *orden de exactitud* o su *grado de exactitud* es n .

La forma más simple de una fórmula (1.1.1) es usar datos lagrangianos $L_i(f) = f(x_i)$, con $x_i \neq x_j, i \neq j$, y así

$$\mathcal{L}(f) \approx \mathcal{L}_n(f) = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i). \quad (1.1.2)$$

Si $\mathcal{L}(f) = f^{(k)}(c)$, $k \geq 1$, tenemos fórmulas de *derivación numérica*

$$f^{(k)}(c) \approx \mathcal{L}_n(f) = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i), \quad (1.1.3)$$

mientras que si $\mathcal{L}(f) = \int_a^b f(x)dx$,

$$\int_a^b f(x)dx \approx \mathcal{L}_n(f) = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i), \quad (1.1.4)$$

obtenemos fórmulas de *integración numérica*.

1.2. Fórmulas de tipo interpolatorio. Exactitud

El procedimiento más sencillo en este tipo de aproximación se basa en la interpolación. Normalmente el funcional \mathcal{L} presenta dificultades para aplicarlo a una función arbitraria de cierto espacio \mathcal{F} de funciones, como sucede, por ejemplo, al intentar integrar $f \in \mathcal{C}[a, b]$, pero por el contrario es fácil de aplicar a las funciones de un subespacio V de dimensión finita de \mathcal{F} . Entonces el procedimiento consiste en sustituir f por su función interpoladora $p(x)$ en V y a continuación tomar

$$\mathcal{L}(f) \approx \mathcal{L}_n(f) = \mathcal{L}(p).$$

En tal caso se dice que la fórmula es *de tipo interpolatorio*. En este caso, por la linealidad del operador, se verifica

$$R(f) = \mathcal{L}(f) - \mathcal{L}_n(f) = \mathcal{L}(f) - \mathcal{L}(p) = \mathcal{L}(f - p) = \mathcal{L}(E(x)),$$

donde p es la función interpoladora de f , y

$$E(x) = f(x) - p(x) = f[x_0, \dots, x_n, x] \prod_{i=0}^n (x - x_i),$$

es el error de interpolación. La interpolación más utilizada es la *interpolación polinomial* en la que $V = \Pi_n$ con datos lagrangianos $L_i(f) = f(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, n$. En este caso, podemos demostrar el siguiente resultado, que es de gran aplicación tanto en la construcción de fórmulas de tipo interpolatorio como en el estudio del error de las mismas:

“Son equivalentes:

1. la fórmula (1.1.2) es de tipo interpolatorio,
2. la fórmula es exacta en Π_n , es decir, $R(p) = 0 \quad \forall p \in \Pi_n$.
3. los coeficientes o pesos de la fórmula se pueden obtener

$$a_i = \mathcal{L}(\ell_i(x)), \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

donde $\{\ell_i(x), i = 0, 1, \dots, n\}$ son las funciones básicas de la fórmula de interpolación de Lagrange.”

Este resultado proporciona tres formas distintas de construir fórmulas de tipo interpolatorio. La primera consiste en hallar el polinomio de interpolación y aplicarle el funcional \mathcal{L} , la segunda, llamada el *método de los coeficientes indeterminados* impone exactitud de la fórmula para una base de V , y la tercera forma consiste en calcular los coeficientes a_i aplicando el funcional \mathcal{L} a los $\ell_i(x)$ de la base de Lagrange.

1.3. Derivación numérica. Error

Como consecuencia del teorema anterior, si queremos obtener una fórmula (1.1.3) de tipo interpolatorio para aproximar $\mathcal{L}(f) = f^{(k)}(c)$, $k \geq 1$, podemos seguir tres procedimientos:

1. hallar el polinomio de interpolación $p(x)$ de $f(x)$ en los datos dados, y a continuación aproximar mediante $f^{(k)}(c) \approx p^{(k)}(c)$,

2. imponer a (1.1.3) exactitud en el espacio Π_n , lo que equivale a resolver el sistema

$$\sum_{i=0}^n a_i x_i^j = \begin{cases} 0, & 0 \leq j \leq k-1, \\ \frac{j!}{(j-k)!} c^{j-k}, & k \leq j \leq n, \end{cases}$$

cuya matriz de coeficientes lleva asociado el determinante de Vandermonde, que es no nulo cuando los nodos x_i son distintos entre sí,

3. hallar los ℓ_i de Lagrange, y tomar $a_i = \ell_i^{(k)}(c)$.

Por último, existe un procedimiento más para obtener (1.1.3) basado en el desarrollo de Taylor. Para ello supongamos que f es de clase \mathcal{C}^{m+1} con $m \geq n$, y denotemos por $h_i = x_i - c$, $i = 0, \dots, n$. Entonces

$$\begin{aligned} f(x_i) &= f(c + h_i) \\ &= f(c) + h_i f'(c) + \dots + \frac{h_i^m}{m!} f^{(m)}(c) + \frac{h_i^{m+1}}{(m+1)!} f^{(m+1)}(\xi_i), \end{aligned} \quad (1.3.1)$$

con $c < \xi_i < c + h_i$, $i = 0, 1, \dots, n$. Multiplicando las igualdades (1.3.1) por a_0, \dots, a_n respectivamente, y sumando, se obtiene

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^n a_i f(x_i) &= f(c) \sum_{i=0}^n a_i + f'(c) \sum_{i=0}^n a_i h_i + \dots \\ &\quad + \frac{f^{(m)}(c)}{m!} \sum_{i=0}^n a_i h_i^m + \frac{1}{(m+1)!} \sum_{i=0}^n a_i h_i^{m+1} f^{(m+1)}(\xi_i). \end{aligned}$$

Si imponemos las condiciones

$$\sum_{i=0}^n a_i h_i^j = k! \delta_{jk}, \quad j = 0, 1, \dots, n,$$

obtenemos un sistema de ecuaciones que hace que la fórmula (1.1.3) sea exacta en Π_n . Además, este sistema es compatible determinado, ya que los h_i son todos distintos al serlo los x_i , y la matriz de coeficientes lleva asociado de nuevo el determinante de Vandermonde.

Cuando los puntos x_i son equidistantes, la expresión de las fórmulas es más simple pues en tal caso pueden usarse las fórmulas de interpolación de Newton progresiva o regresiva para obtener $p(x)$ en función de las diferencias finitas.

Deduciremos las fórmulas habituales de derivación numérica utilizando alternativamente todos los métodos descritos anteriormente. Clasificaremos las fórmulas según el número de datos lagrangianos utilizados: uno, dos, tres nodos, y su posición relativa atendiendo al punto en el cual se desea aproximar la derivada.

Error en derivación numérica

En este caso, el error se calculará en la forma

$$R(f) = \mathcal{L}(E(x)) = \left. \frac{d^k}{dx^k} E(x) \right|_{x=c} = \left. \frac{d^k}{dx^k} (f[x_0, \dots, x_n, x] \pi(x)) \right|_{x=c}$$

donde $\pi(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$. Si $k = 1$ y f es derivable, se obtiene

$$R(f) = (f[x_0, \dots, x_n, x, x] \pi(x) + f[x_0, \dots, x_n, x] \pi'(x)) \Big|_{x=c}$$

y si f es de clase \mathcal{C}^{n+2} , podemos escribir

$$R(f) = \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \pi(c) + \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!} \pi'(c),$$

donde ξ, η son puntos intermedios, de tal forma que si $c = x_j$ para algún j , entonces $\pi(c) = 0$, y

$$R(f) = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!} \pi'(c) = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!} \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^n (c - x_i).$$

De forma análoga, si f es de clase \mathcal{C}^{n+k+1} , la expresión del error de la derivada k -ésima viene dada por la expresión

$$R(f) = \sum_{i=0}^k \frac{k!}{(k-i)!(n+i+1)!} f^{(n+i+1)}(\eta_i) \pi^{(k-i)}(c)$$

donde los η_i pertenecen a cualquier intervalo que contenga a x_0, \dots, x_n , y al punto c .

Se puede dar una cota para $R(f)$ si se conocen cotas para cada una de las derivadas de f que aparecen en la expresión de $R(f)$. Una forma de rebajar la cota del error es disminuir el número de sumandos. Ya hemos visto que si $\pi(c) = 0$ se anula un sumando de la expresión del error para cualquier derivada.

Un caso particularmente sencillo es cuando se usan *fórmulas centrales*, que son fórmulas de tipo interpolatorio polinomial que aproximan la derivada en un punto $c = x_0$, usando como conjunto de nodos uno de los siguientes

$$\{x_{-r}, \dots, x_{-1}, x_1, \dots, x_r\}, \quad \{x_{-r}, \dots, x_{-1}, x_0, x_1, \dots, x_r\},$$

donde los x_i son equidistantes. Utilizando diferencias centrales, se demuestra de forma sencilla que si se aproxima la derivada primera con ambos conjuntos, se obtiene el mismo orden de convergencia. Sin embargo, hay ocasiones

en las que no pueden usarse fórmulas centrales, como por ejemplo, si se desea estimar la derivada en uno de los extremos del intervalo.

Un problema esencial de la derivación numérica es el mal condicionamiento de las fórmulas. Por una parte, de la expresión explícita del error de las fórmulas observamos que teóricamente converge hacia cero cuando h tiende a cero. Sin embargo, puesto que la expresión de la fórmula contiene una potencia de h en el denominador, los errores de redondeo crecen indefinidamente cuando h tiende a cero.

1.4. Integración numérica. Error

Abordaremos en esta sección el cálculo de la integral definida de una función real mediante la expresión

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx I_n(f) = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i). \quad (1.4.1)$$

Una fórmula del tipo anterior se denomina fórmula de *cuadratura numérica* o de *integración numérica*. Las fórmulas básicas que se utilizan en la práctica son las de tipo interpolatorio o composición de éstas.

1.4.1. Fórmulas simples

Las fórmulas sencillas de integración numérica con uno, dos, tres nodos, rectángulo, punto medio, trapecio y Simpson, se deducirán utilizando la equivalencia entre el carácter interpolatorio y la exactitud: hallando $p(x)$, el polinomio de interpolación en x_0, x_1, \dots, x_n , y aproximando mediante

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx,$$

imponiendo exactitud en el espacio Π_n , lo que equivale a resolver el siguiente sistema:

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

o hallando los polinomios básicos $\ell_i(x)$ de Lagrange, y tomando

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

Como ya hemos visto, el error asociado a las fórmulas de integración numérica de tipo interpolatorio es

$$R(f) = \int_a^b E(x)dx = \int_a^b f[x_0, \dots, x_n, x] \pi(x)dx,$$

donde $\pi(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$. Si el polinomio $\pi(x)$ no cambia de signo en $[a, b]$ y f' es continua, aplicando el teorema del valor medio para el cálculo integral, se tiene

$$R(f) = f[x_0, \dots, x_n, \xi] \int_a^b \pi(x) dx, \quad \text{con } \xi \in (a, b),$$

y si además $f \in \mathcal{C}^{n+1}[a, b]$,

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

Estas herramientas nos servirán para calcular el error en cada una de las fórmulas deducidas más arriba. De este modo, aunque las fórmulas del rectángulo derecha e izquierda y la del punto medio tienen sólo un dato, y son exactas en Π_0 , la fórmula del punto medio posee *más exactitud de la esperada*, al igual que la fórmula de Simpson, que, aun teniendo tres datos, es exacta en Π_3 .

Fórmulas de Newton–Cotes

Las *fórmulas de Newton–Cotes* utilizan como nodos puntos equidistantes del intervalo $[a, b]$. Concretamente, si n es un número natural, se define la partición

$$x_i = a + i h, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

donde $h = (b - a)/n$.

Pueden ser *cerradas*, que son las que tienen por nodos x_0, x_1, \dots, x_n , o *abiertas* que tienen como nodos x_1, \dots, x_{n-1} .

Estas fórmulas se pueden obtener siguiendo cualquiera de los procedimientos descritos anteriormente en las fórmulas de tipo interpolatorio.

Entre las fórmulas de Newton–Cotes cerradas más simples se encuentran la del *trapecio*, con $n = 1$ (dos puntos), y la de *Simpson* para $n = 2$ (tres puntos), muy utilizadas en la práctica en sus formas compuestas. Para $n = 3$, deduciremos la fórmula de los 3/8 de Newton así como su error.

La fórmula de Newton–Cotes abierta más sencilla es la del *del punto medio*, $n = 2$, obtenida anteriormente. También deduciremos la fórmula abierta para $n = 3$ y su error.

Las fórmulas de Newton–Cotes no son estables y no garantizan la convergencia. Como probó Runge con su famoso ejemplo, los polinomios de interpolación en nodos equidistantes no tienen porqué converger hacia la función. Este mismo ejemplo servirá para mostrar este inconveniente de las fórmulas de Newton–Cotes.

1.4.2. Fórmulas compuestas

Las expresiones explícitas del error para cada una de las fórmulas *simples* deducidas anteriormente nos hace ver que no es posible conseguir fórmulas que hagan converger el error hacia cero. Una alternativa sería aumentar el orden de convergencia pero para ello es necesario utilizar un número de nodos cada vez más elevado y, aún así, no tenemos garantizada la convergencia. Una fórmula que utilice muchos nodos tiene, además, el inconveniente de que el cálculo de los nodos y de los coeficientes puede ser muy costoso. Una forma de evitar estas dificultades es utilizar *fórmulas compuestas*.

Una fórmula compuesta se obtiene al aplicar alguna de las fórmulas *simples* obtenidas anteriormente a una partición del intervalo $[a, b]$. En efecto, sea $N \geq 1$ un número natural fijo, definimos $h = (b - a)/N$, y los subintervalos

$$[a_i, a_{i+1}], \quad i = 0, 1, \dots, N-1,$$

donde $a_i = a + i h$, $0 \leq i \leq N$. De este modo,

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{N-1} \int_{a_i}^{a_{i+1}} f(x) dx,$$

y el error se obtendrá como suma de los errores cometidos en cada uno de los subintervalos

$$R(f) = \sum_{i=0}^{N-1} R_i(f),$$

donde $R_i(f)$ denota el error cometido en el subintervalo $[a_i, a_{i+1}]$.

Así, por ejemplo, deduciremos la *fórmula del trapecio compuesta* que es

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

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

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

Análogamente, la *fórmula de Simpson compuesta* viene dada por

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(a_i) + 4 \sum_{i=0}^{N-1} f(a_i + h/2) \right],$$

y el error cometido, supuesta f de clase \mathcal{C}^4 , es

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

Demostraremos que si se utiliza una fórmula de Newton–Cotes compuesta que en cada subintervalo use $n \geq 1$ nodos, el error viene dado por la expresión

$$R(f) = \begin{cases} \frac{b-a}{n!} \frac{M_n}{n^{n+1}} h^n f^{(n)}(\xi), & a < \xi < b, \text{ n par,} \\ \frac{b-a}{(n+1)!} \frac{K_n}{n^{n+2}} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi), & a < \xi < b, \text{ n impar,} \end{cases}$$

donde M_n y K_n son constantes. Obviamente, el error $R(f)$ en las fórmulas compuestas asociadas a las fórmulas de Newton–Cotes tiende hacia a cero cuando $h \rightarrow 0$.

1.5. Integración Romberg

La integración Romberg es un proceso de extrapolación que puede aplicarse a la fórmula del trapecio compuesta y que permite obtener mejores aproximaciones a la integral definida de una función dada. En esta sección denotamos por

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

la integral exacta de la función f , y

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

la fórmula del trapecio compuesta, donde $N \geq 1$, $h = (b - a)/N$.

La integración Romberg se basa en la

Teorema 1 (Fórmula de Euler–McLaurin). *Si para algún $n \geq 1$, $f \in \mathcal{C}^{2n+1}[a, b]$ entonces*

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

donde los coeficientes tienen la expresión explícita

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

y B_{2k} denota el número de Bernouilli.

A partir de la fórmula de Euler–McLaurin conocemos el desarrollo asintótico del error para la fórmula del trapecio compuesta, lo que permite mejorar este resultado tomando

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

y eliminando el término en g_1 , esto es,

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

con lo que obtenemos una aproximación de la integral $I(f)$ con un error del orden de $\mathcal{O}(h^4)$. Podemos repetir de nuevo este proceso para eliminar el término en h^4 , y así sucesivamente. Para $m = 0, 1, \dots$, y $1 \leq k \leq m$, definimos

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

Podemos disponer los cálculos en una sencilla tabla de valores

$$\begin{array}{ccccccc} R(0, 0) & & & & & & \\ & \searrow & & & & & \\ R(1, 0) & \longrightarrow & R(1, 1) & & & & \\ & \searrow & & \searrow & & & \\ R(2, 0) & \longrightarrow & R(2, 1) & \longrightarrow & R(2, 2) & & \\ & \searrow & & \searrow & & \searrow & \\ R(3, 0) & \longrightarrow & R(3, 1) & \longrightarrow & R(3, 2) & \longrightarrow & R(3, 3) \\ & \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots \end{array}$$

El siguiente resultado asegura la convergencia de la integración Romberg:

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

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

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

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

1.6. Fórmulas de cuadratura gaussiana

Ya se ha visto en las secciones anteriores que las fórmulas de tipo interpolatorio con $n+1$ nodos tienen, al menos, grado de exactitud n , aunque algunas fórmulas, por ejemplo, las de Newton–Cotes con número impar de nodos, superan este grado de exactitud. Nos planteamos en esta sección si eligiendo adecuadamente los nodos se puede obtenerse más exactitud, e incluso cuál es el máximo grado de exactitud que se puede obtener para un número de nodos fijo. En este sentido, demostraremos el siguiente

Teorema 3. Sea $\omega(x)$ una función peso. Consideremos la fórmula de integración numérica

$$I(f) = \int_a^b f(x) \omega(x) dx \approx a_0 f(x_0) + a_1 f(x_1) + \dots + a_n f(x_n), \quad (1.6.1)$$

y definamos $\pi(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$. Entonces

- (i) la fórmula (1.6.1) tiene orden de exactitud $n + q$, $q \geq 1$, si y sólo si es de tipo interpolatorio, y los nodos x_j cumplen

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

- (ii) (1.6.1) no puede tener orden de exactitud mayor o igual a $2n + 2$.

- (iii) Existen $n + 1$ puntos distintos $x_j \in (a, b)$, $j = 0, \dots, n$, tales que (1.6.1) tiene orden de exactitud $2n + 1$.

A las fórmulas de integración numérica que tienen orden de exactitud máximo se las denomina *fórmulas de cuadratura gaussianas* o *fórmulas de Gauss*, mientras que a las fórmulas de tipo interpolatorio que tienen orden de exactitud $n + q$ con $2 \leq q < n$ se les llama de *tipo Gauss*.

Utilizando el resultado anterior, si (1.6.1) es una fórmula de Gauss, entonces tiene por nodos las raíces del polinomio ortogonal $P_{n+1}(x)$ asociado 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 con funciones peso concretas, bien conocidas en la literatura. Por ejemplo, si $[a, b] = [-1, 1]$, podemos citar

- si $\omega(x) = 1$, se denomina *fórmula de Gauss–Legendre*,
- si $\omega(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$, se denomina *de Gauss–Chebyshev*,
- en general, si $\omega(x) = (1 - x)^\alpha (1 + x)^\beta$, $\alpha, \beta > -1$, se llama *de Gauss–Jacobi*.

Un resultado fundamental que muestra el error de las fórmulas gaussianas es el siguiente:

“Si f es de clase C^{n+2} en $[a, b]$ y (1.6.1) es una fórmula gaussiana, entonces el error correspondiente puede expresarse como

$$R(f) = \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_a^b \pi^2(x) \omega(x) dx.”$$

Las fórmulas gaussianas poseen propiedades muy interesantes: los coeficientes de las fórmulas a_i son todos positivos, lo que implica la estabilidad de estas fórmulas. Además, se da la convergencia de las fórmulas de cuadratura gaussianas para toda función continua en $[a, b]$ al valor de la integral cuando $n \rightarrow \infty$.

Frente a propiedades de estabilidad, convergencia, y orden elevado de exactitud, las fórmulas gaussianas también presentan inconvenientes. Para deducir las fórmulas gaussianas es necesario hallar los nodos, y para ello hay que obtener el polinomio ortogonal, calcular sus raíces, que suelen ser números irracionales, y después hay que calcular los coeficientes, lo que obliga a cometer errores de redondeo desde la misma fórmula. Por otro lado, 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 son prácticas para esquemas automáticos.

1.7. Práctica de laboratorio

En las *prácticas de laboratorio* propondremos a los alumnos la deducción y aplicación de algoritmos de *integración adaptativa* basados en diversas fórmulas de integración numérica.

Estudiaremos los llamados *esquemas automáticos*, recientemente desarrollados, que son programas que, partiendo de los límites de integración, el integrando y el error admisible, calculan una aproximación de la integral. También es interesante estudiar las rutinas para integración numérica basadas en cuadraturas gaussianas *QUADPACK*

<http://www.netlib.org/quadpack/>

Escritas originalmente en FORTRAN, han sido implementadas también en diferentes lenguajes de alto nivel (C, Python, ...).

Alternativamente, podría ser interesante considerar las rutinas para integración numérica de *ALGLIB*

<http://www.alglib.net>

Existen versiones de estas rutinas en diferentes lenguajes de alto nivel (C++, C#, Pascal, VBA).

1.8. Comentarios bibliográficos

Las fórmulas de derivación numérica de tipo interpolatorio, o las basadas en desarrollos de Taylor junto con el correspondiente análisis del error se estudian en profundidad en Atkinson [1], Gautschi [3], Stewart [6] y Ralston [5].

La cuadratura o integración numérica es una de las materias estudiada desde más antiguo, y es básica en el Análisis Numérico, lo que hace que sea tratada en muchas obras de la bibliografía de este Proyecto.

Una referencia fundamental para integración numérica es el texto de W. Gautschi [3], en el que podemos encontrar un buen tratamiento de las fórmulas de cuadratura simples, de las fórmulas gaussianas, de los algoritmos de cálculo de los coeficientes y los nodos, y de la integración Romberg. Otros textos complementarios son los de Ralston [5], Kincaid y Cheney [4], Burden y Faires [2], Stewart [6] o Stoer y Bulirsch [7].

Bibliografía

- [1] K. E. Atkinson, *An introduction to Numerical Analysis*, 2nd ed., Wiley, New York, 1989.
- [2] L. R. Burden, D. J. Faires, *Análisis Numérico*, Séptima Edición, Thomson Learning, México, 2003.
- [3] W. Gautschi, *Numerical analysis*, 2nd ed., Birkhäuser–Science Springer, New York Dordrecht Heidelberg London 2012.
- [4] D. Kincaid, W. Cheney, *Análisis Numérico. Las matemáticas del cálculo científico*, Addison–Wesley Iberoamericana, Wilmington, 1994.
- [5] A. Ralston, *Introducción al Análisis Numérico*, Limusa–Wiley, México, 1970.
- [6] G. W. Stewart, *Afternotes on Numerical Analysis*, SIAM, Philadelphia, 1996.
- [7] J. Stoer, R. Burlirsch, *Introduction to numerical analysis*, 3rd. ed., Springer, New York, 2002.