Clase 15 - Integración numérica (3)

Reglas gaussianas

Las fórmulas de cuadratura consideradas hasta ahora, simples y compuestas, se construyen usando valores funcionales en puntos conocidos. Es decir, todas tienen la forma

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i), \tag{1}$$

y son exactas para polinomios de grado $\leq n$. En esta fórmula **los nodos** $x_0, x_1, \ldots, x_n$ **son conocidos a priori** y los coeficientes $a_0, a_1, \ldots, a_n$ se determinan unívocamente de manera que (1) sea una igualdad, para ciertos polinomios.

Por ejemplo, si usáramos la regla simple del Trapecio, cuyos nodos son los extremos del intervalo:

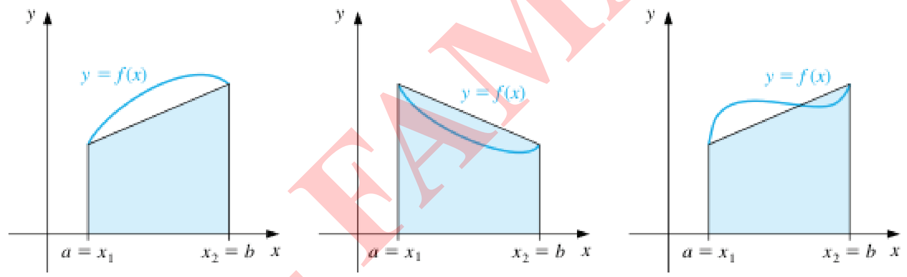

Figura 1: Regla del Trapecio (simple)

En cambio, si se pudieran elegir adecuadamente los dos nodos se podría mejorar la precisión:

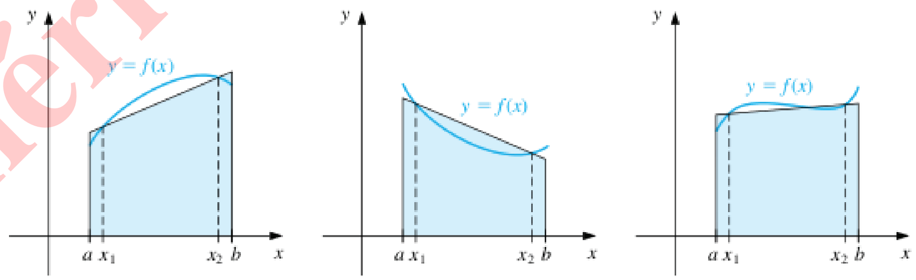

Figura 2: Regla con dos nodos

Recordemos que:

Regla	n	Número de puntos $(n+1)$	Precisión
Rectángulo	0	1	0
Punto medio	0	1	1
Trapecio	1	2	1
Simpson	2	3	3

Es decir que para $(n+1)$ puntos, la precisión de cada regla de cuadratura es $(n+1)$ o n.

Las reglas gaussianas permiten seleccionar convenientemente los nodos, además de los coeficientes, de manera óptima en el sentido que la regla de integración sea exacta para polinomios del grado más alto posible (precisión). Es decir que se deberán determinar los $(n+1)$

A. Numérico - FAMAF 2022

nodos $x_0,\ldots,x_n$ y los $(n+1)$ coeficientes $a_0,\ldots,a_n$ de manera que la regla de cuadratura con funciones de peso

$$\int_a^b w(x)f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i), \tag{2}$$

sea exacta para polinomios de grado $\leq 2n+1$.

Antes de estudiar el caso general, veamos el siguiente ejemplo.

Ejemplo: tomando la función de peso $w(x)=1$, determinar los nodos x_0 y x_1 y los coeficientes a_0 y a_1 tal que la regla de cuadratura

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx a_0 f(x_0) + a_1 f(x_1), \tag{3}$$

sea exacta para polinomios p de grado $\leq 2\cdot 1+1=3$.

- Si $grado(p)=0$, basta considerar $p(x)\equiv 1$, entonces

$$2 = \int_{-1}^{1} 1\,dx = a_0 + a_1. \tag{4}$$

- Si $grado(p)=1$, basta considerar $p(x)=x$, entonces

$$0 = \int_{-1}^{1} x\,dx = a_0x_0 + a_1x_1. \tag{5}$$

- Si $grado(p)=2$, basta considerar $p(x)=x^2$, entonces

$$\frac{2}{3} = \int_{-1}^{1} x^2\,dx = a_0x_0^2 + a_1x_1^2. \tag{6}$$

- Si $grado(p)=3$, basta considerar $p(x)=x^3$, entonces

$$0 = \int_{-1}^{1} x^3\,dx = a_0x_0^3 + a_1x_1^3. \tag{7}$$

Si $a_0=a_1=0$, por (4) se tiene un absurdo, por lo tanto no pueden ser simultáneamente cero.

Supongamos ahora uno de los dos coeficientes es cero y el otro no, por ejemplo que $a_0=0$ y $a_1\neq 0$. Luego por (4) se deduce que $a_1=2$, y por (5) se tiene que $x_1=0$, y por (6) se llega a un absurdo. Análogamente si suponemos que $a_0\neq 0$ y $a_1=0$. Por lo tanto ambos coeficientes deben ser distintos de cero.

De la ecuación (5), si $x_0=0$, y como $a_1\neq 0$, resulta que $x_1=0$ y por (6) se llega a un absurdo. Por lo tanto x_0 no puede ser 0 y por un razonamiento análogo x_1 tampoco es 0.

Luego a_0,a_1,x_0 y x_1 son distintos de 0.

De (5) y (7) se tiene que

$$\frac{a_0x_0^3}{a_0x_0} = \frac{-a_1x_1^3}{-a_1x_1},$$

de donde se deduce que $x_0^2=x_1^2$ y por lo tanto $|x_0|=|x_1|$. Ahora se tienen dos casos.

A. Numérico - FAMAF 2022

Si $x_0 = x_1$, por (4) y (5) se obtendría que $x_0 = 0$ y por lo tanto es absurdo. Por lo tanto, $x_0 = -x_1$.

Usando (6) se sabe que $(a_0 + a_1)x_0^2 = 2/3$, y entonces $x_0^2 = 1/3$ y de aquí se tiene que $x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}$ y $x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$.

Por último, usando (4) y (5) se obtiene que $a_0 = a_1 = 1$.

Recordemos que dados $n+1$ nodos distintos $x_0, x_1, \ldots, x_n$, con valores asociados $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_n)$ entonces existe un único polinomio interpolante p de grado menor o igual que n tal que $p(x_i) = f(x_i)$ para $i = 0, \ldots, n$. En particular, si f es un polinomio de grado m, con m menor igual que n, entonces el polinomio interpolante coincide con el polinomio f. (Recordar la fórmula del error del polinomio interpolante).

El teorema siguiente, debido a Gauss, indica como deben elegirse los $(n+1)$ nodos de manera de obtener una fórmula de cuadratura que sea exacta para polinomios de hasta grado $2n+1$. El resultado será enunciado y probado para una función de peso w general, pero puede ser aplicado al caso simple donde $w(x) \equiv 1$.

Teorema 1. *Sea w una función de peso positiva definida en $[a,b]$ y q un polinomio no nulo de grado exactamente $(n+1)$ que es ortogonal a todo polinomio p de grado $\leq n$ (con respecto a w), es decir,*

$$\int_a^b q(x)p(x)w(x)\,dx = 0. \tag{8}$$

Si $x_0, x_1, \ldots, x_n$ son las $(n+1)$ raíces de q, entonces la fórmula

$$\int_a^b f(x)w(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) \tag{9}$$

con $a_i = \int_a^b w(x) \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\,dx$, será exacta para todo polinomio f de grado $\leq 2n+1$.

Demostración. Veamos primero que la fórmula de cuadratura es exacta para polinomios de grado $\leq n$.

Sea f un polinomio de grado $\leq n$, entonces f es el único polinomio que interpola los $n+1$ nodos $x_0, x_1, \ldots, x_n$, y por lo tanto f se puede reescribir como $f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$.

Luego

$$\int_a^b f(x)w(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b w(x) \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\,dx = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i).$$

Por lo tanto la regla de cuadratura es exacta para polinomios de grado $\leq n$.

Ahora supongamos que f es un polinomio tal que $n+1 \leq grado(f) \leq 2n+1$. Dividimos f por el polinomio q y, por el algoritmo de la división de polinomios, se sabe que existen polinomios p (cociente) y r (resto) tal que

$$f(x) = p(x)q(x) + r(x), \tag{10}$$

A. Numérico - FAMAF 2022

con $grado(p) \leq n$ (pues $grado(f) \leq 2n+1$) y $grado(r) \leq n$ o $r(x) \equiv 0$.

Luego,

$$\int_a^b q(x)p(x)w(x)\,dx = 0, \tag{11}$$

por hipótesis, pues el grado de q es $n+1$.

Además, como x_i es una raíz de $q(x)$ para $i = 0, \ldots, n$, se tiene que

$$f(x_i) = p(x_i)q(x_i) + r(x_i) = r(x_i), \quad \text{para } i = 0, \ldots, n. \tag{12}$$

Luego como $grado(r) \leq n$, entonces

$$\int_a^b r(x)w(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} a_i r(x_i). \tag{13}$$

Finalmente, por (10), (11), (12) y (13), se tiene que

$$\int_a^b f(x)w(x)\,dx = \int_a^b (p(x)q(x) + r(x))w(x)\,dx = \int_a^b r(x)w(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} a_i r(x_i) = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i),$$

que es lo que se quería probar. □

El teorema anterior afirma que las raíces de los polinomios ortogonales son los nodos más convenientes para tener más precisión en las reglas gaussianas. El siguiente resultado resume algunas propiedades importantes de estos puntos. La demostración puede consultarse en los libros de la Bibliografía.

Teorema 2. *Sean w una función de peso en $[a,b]$ y $\{\phi_0, \ldots, \phi_n\}$ un conjunto polinomios tales que $grado(\phi_k) = k$ y son w-ortogonales en $[a,b]$ en el sentido que*

$$\int_a^b \phi_i(x)\phi_j(x)w(x)\,dx = 0, \quad \text{si } i \neq j.$$

Si $x_0, \ldots, x_{k-1}$ son las k raíces de ϕ_k entonces tales raíces son reales, simples y pertenecen al intervalo abierto (a,b).

Observación: si la función de peso que se utiliza en el intervalo $[-1,1]$ es $w(x) \equiv 1$ se obtienen los polinomios de Legendre:

$$P_0(x) \equiv 1, \qquad P_1(x) = x, \qquad P_2(x) = x^2 - \frac{1}{3},$$
$$P_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x, \qquad P_4(x) = x^4 - \frac{6}{7}x^2 + \frac{3}{35}.$$

Para estos polinomios se conocen sus raíces así como los coeficientes a_i de las fórmulas de cuadratura:

A. Numérico - FAMAF 2022

grado del polinomio	raíces (x_i)	coeficientes (a_i)
2	-0.5773502692	1.0000000000
	0.5773502692	1.0000000000
3	-0.7745966692	0.555555556
	0.0000000000	0.888888889
	0.7745966692	0.555555556
4	-0.8611363116	0.3478548451
	-0.3399810436	0.6521451549
	0.3399810436	0.6521451549
	0.8611363116	0.3478548451

La siguiente observación muestra como es posible utilizar las reglas gaussianas en diferentes intervalos.

Observación: supongamos que se conoce una fórmula de integración numérica

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i),$$

para valores determinados de los coeficientes a_i, para $i = 0,\ldots,n$, que dependen de los nodos $x_0,\ldots,x_n \in [-1,1]$ y se desea obtener una fórmula de integración numérica para

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

Esto se puede hacer muy fácilmente haciendo el cambio de variables $t : [a,b] \longrightarrow [-1,1]$, dado por $t = \alpha x + \beta$, donde los coeficientes α y β se determinan fácilmente resolviendo el sistema lineal

$$\begin{cases} \alpha a + \beta &= -1 \\ \alpha b + \beta &= 1 \end{cases}$$

y por lo tanto $t = \dfrac{2}{b-a}x - \dfrac{a+b}{b-a}$. Entonces $x = \dfrac{b-a}{2}t + \dfrac{a+b}{2}$ y $\dfrac{dx}{dt} = \dfrac{b-a}{2}$, es decir, $dx = \dfrac{b-a}{2}dt$. Luego,

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}\right)\frac{b-a}{2}\,dt = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}\right)dt.$$

Ejemplo: se desea estimar el valor de la integral

$$\int_1^{1.5} e^{-x^2}\,dx$$

usando las reglas gaussianas con la función de peso $w(x) \equiv 1$ y usando polinomios de grado 2 y 3. Se sabe que esa integral es aproximadamente ≈ 0.1093643. Notar que si el grado es m, entonces el índice de los nodos de la regla de cuadratura es $n = m-1$, pues los subíndices comienzan desde 0. Por lo tanto para grados $m = 2$ y 3 se tienen $n = 1$ y 2 y la precisión $(2n+1)$ será 3 y 5, respectivamente.

Haciendo el cambio de variables, resulta

$$y = 4x - 5, \qquad x = \frac{1}{4}y + \frac{5}{4}.$$

A. Numérico - FAMAF 2022

Luego,
$$\int_1^{1.5} e^{-x^2}\,dx = \frac{1}{4}\int_{-1}^{1} e^{-(y+5)^2/16}\,dy.$$

Si el grado es $m=2$, es decir ($n=1$) con los puntos x_0 y x_1, entonces

$$\int_1^{1.5} e^{-x^2}\,dx \approx 0.1094003$$

Si el grado es $m=3$, es decir ($n=2$) con los puntos x_0, x_1 y x_2, entonces

$$\int_1^{1.5} e^{-x^2}\,dx \approx 0.1093642$$

A. Numérico - FAMAF 2022