Tema 2: Derivación e integración numérica
Segunda parte: integración numérica

Métodos Numéricos II

Departamento de Matemática Aplicada
Universidad de Granada

Curso 2024/25

1. Cuadratura gaussiana
   - Fórmulas gaussianas y polinomios ortogonales
     - Fórmulas gaussianas clásicas

6. Cuadratura gaussiana

Las fórmulas de integración de tipo interpolatorio son de la forma

$$L(f) = \int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i) + R(f) \tag{1}$$

o bien de la forma más general

$$L(f) = \int_a^b f(x)\omega(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i) + R(f) \tag{2}$$

donde $\omega(x)$ es una función peso.

En lo que sigue llamamos $\Pi(x) = (x - x_0)\cdots(x - x_n)$

Cuadratura gaussiana

Algunas fórmulas simples ofrecen un grado de exactitud superior al que les corresponde por ser de tipo interpolatorio clásico. Por ejemplo:

- La fórmula del punto medio es exacta en $\mathbb{P}_1$ cuando por su dimensión le habría correspondido en $\mathbb{P}_0$.
- La fórmula de Simpson lo es en $\mathbb{P}_3$ cuando su grado por tener tres nodos sería 2.

La posible ganancia de grados de exactitud extra para las fórmulas de cuadratura reside en la disposición de sus nodos.

Ya se discutió antes la limitación del máximo grado de exactitud para fórmulas de derivación. En esta sección se discute lo mismo para fórmulas de integración numérica y se da un procedimiento para obtenerlas.

Las fórmulas gaussianas son fórmulas simples con grado máximo de exactitud, que se consigue con una adecuada distribución (no uniforme) de sus nodos.

Teorema 5 (Limitación y caracterización del grado de exactitud)

1. No existe una fórmula (1) o (2) con grado de exactitud superior a $2n+1$.
2. Una fórmula (1) o (2) tiene grado de exactitud $n+q$, $q \geq 1$, si y solo si $L(x^j\Pi(x)) = 0$, $j = 0, \ldots, q-1$ y $L(x^q\Pi(x)) \neq 0$.

Demostración:

1. Si (1) tuviera grado de exactitud $2n+2$ o superior, sería exacta para $f(x) = \Pi^2(x)$. Teniendo en cuenta que $\Pi(x_i) = 0$ para $i = 0, \ldots, n$:

$$\int_a^b \Pi^2(x)\, dx = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i \Pi^2(x_i) = 0$$

   lo que es absurdo (pues $\Pi^2(x) \geq 0$ en $[a,b]$ y no es el polinomio nulo).
2. Los polinomios $\{1, x, x^2, \ldots, x^n, \Pi(x), x\Pi(x), \ldots, x^{q-1}\Pi(x)\}$ forman una base de $\mathbb{P}_{n+q}$.

Observación: Con este teorema ya queda eliminada la posibilidad de grado $2n + 2$ de exactitud. La siguiente cuestión es si el grado inmediatamente inferior $2n + 1$ es alcanzable. La respuesta es positiva.

Teorema 6 (Existencia de fórmula gaussiana)

Existen $n+1$ únicos nodos x_i, $i=0,\ldots,n$ para los cuales (1) tiene grado de exactitud máxima $2n+1$. Además, todos ellos son reales y están en $]a,b[$.

Demostración:

Escribimos $\Pi(x)$ de la forma $\Pi(x) = x^{n+1} + c_1 x^n + \cdots + c_{n+1}$ (recordemos que $\Pi(x) = (x-x_0)\cdots(x-x_n)$).

Al imponer $L(x^j\Pi(x)) = 0$, $j=0,\ldots,n$,

$$L(x^j\Pi(x)) = L(x^j x^{n+1}) + c_1 L(x^j x^n) + \cdots + c_{n+1} L(x^j) = 0, \quad j=0,\ldots,n$$

despejando: $c_1 L(x^j x^n) + \cdots + c_{n+1} L(x^j) = -L(x^j x^{n+1}), \quad j=0,\ldots,n$

y se obtiene el sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{pmatrix} L(x^n) & L(x^{n-1}) & \cdots & L(1) \\ L(x^{n+1}) & L(x^n) & \cdots & L(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L(x^{2n}) & L(x^{2n-1}) & \cdots & L(x^n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -L(x^{n+1}) \\ -L(x^{n+2}) \\ \vdots \\ -L(x^{2n+1}) \end{pmatrix}$$

(cont. demostración:)

Si este sistema no tiene solución única, el sistema homogéneo asociado tendría que admitir una solución no trivial, es decir,
$\exists \begin{pmatrix} b_0 & b_1 & \cdots & b_n \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$ tal que:

$$\begin{pmatrix} L(x^n) & L(x^{n-1}) & \cdots & L(1) \\ L(x^{n+1}) & L(x^n) & \cdots & L(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L(x^{2n}) & L(x^{2n-1}) & \cdots & L(x^n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Nos fijamos en la fila i-ésima, para $i = 0, 1, \ldots, n$:

$$\begin{pmatrix} L(x^{n+i}) & L(x^{n+i-1}) & \cdots & L(x^{n+i-j}) & \cdots & L(x^i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = 0$$

De forma abreviada,

$$\sum_{j=0}^{n} b_j L(x^{n+i-j}) = L\left(x^i \sum_{j=0}^{n} b_j x^{n-j} \right) = 0 \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

(cont. demostración:)
Combinando estas igualdades con los mismos coeficientes pero en orden inverso se tiene

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{n} b_{n-i}\, \underbrace{L\left(x^i \sum_{j=0}^{n} b_j x^{n-j}\right)}_{=0} &= L\left(\sum_{i=0}^{n} b_{n-i} x^i \sum_{j=0}^{n} b_j x^{n-j}\right) \\ &= L\left(\left(\sum_{j=0}^{n} b_j x^j\right)^2\right) = 0.\end{aligned}$$

lo que es absurdo. Se demuestra entonces que existen $n+1$ únicos nodos para los que la fórmula tiene exactitud máxima $2n+1$.

(cont. demostración:)

Veamos ahora que los nodos son reales y están en $]a, b[$.

Sean $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_s$ las raíces reales de Π de multiplicidad impar dentro de $]a, b[$ y sea $q(x) = \prod_{i=1}^{s}(x - \alpha_i)$.

En principio caben todas las posibilidades, desde que no haya ninguna ($s = 0$) hasta que todas las raíces de $\Pi(x)$ sean del tipo descrito ($s = n + 1$) y entonces sería $q(x) \equiv \Pi(x)$.

En todo caso, $\Pi(x)$ presentará un cambio de signo en $[a, b]$ para cada una de ellas y, por tanto, el polinomio $q(x)\Pi(x)$ **no cambia de signo** en ningún punto de $[a, b]$ aunque se pueda anular en algunos.

En consecuencia se tiene que $L(q\Pi) \neq 0$.

Si fuese $s < n + 1$ entonces se tendría

$$\mathrm{gr}(q \cdot \Pi) \leq 2n + 1 \Rightarrow L(q \cdot \Pi) = 0.$$

Por tanto tiene que ser $s = n + 1$ y como consecuencia $q(x) \equiv \Pi(x)$.

En la práctica

En la práctica se toma el desarrollo canónico de $\Pi(x) = x^{n+1} + c_1 x^n + \cdots + c_{n+1}$.

Se plantea el sistema lineal

$$\left.\begin{array}{ll} L(\Pi(x)) & = 0 \\ L(x\Pi(x)) & = 0 \\ \vdots & \\ L(x^n\Pi(x)) & = 0 \end{array}\right\}$$

que nos proporcionará los coeficientes de dicho desarrollo.

Los nodos x_i se obtienen como las raíces de $\Pi(x)$ (tarea que en general tampoco es trivial).

Ventajas y desventajas de las fórmulas gaussianas

Entre las ventajas que ofrecen las fórmulas gaussianas se encuentran las siguientes:

- Grado máximo de exactitud.
- Expresión del término de error sencilla:

$$R(f) = \frac{1}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi) L(\Pi^2),$$

  la cual se puede deducir del error del polinomio de interpolación de Hermite clásico.
- Convergencia (que no tenían las fórmulas de Newton-Cotes): $R(f) \to 0$ cuando $n \to \infty$.

Ventajas y desventajas de las fórmulas gaussianas

Entre las desventajas, cabe citar:

- Su dificultad de obtención, al tener que buscar las raíces de un polinomio.
- Irregularidad de la distribución de nodos.
- Irregularidad en las fórmulas compuestas que se deducen de ellas.

Ejemplo 1

Vamos a calcular la fórmula gaussiana con dos nodos

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \alpha_0 f(x_0) + \alpha_1 f(x_1) + R(f).$$

Llamamos $\Pi(x) = (x - x_0)(x - x_1) = x^2 + bx + c$ y se tiene que cumplir

$$\left.\begin{array}{llll} \displaystyle\int_{-1}^{1} \Pi(x)\,dx = 0 & \rightarrow & \frac{2}{3} + 2c & = 0 \\ \displaystyle\int_{-1}^{1} x\Pi(x)\,dx = 0 & \rightarrow & \frac{2}{3}b & = 0 \end{array}\right\} \Rightarrow b = 0,\ c = -\frac{1}{3}$$

Por tanto

$$\Pi(x) = x^2 - \frac{1}{3}$$

y los nodos de la fórmula son sus raíces $x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$, $x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$.

Ejemplo 1

Tenemos entonces

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \alpha_0 f\Big(-\frac{1}{\sqrt{3}}\Big) + \alpha_1 f\Big(\frac{1}{\sqrt{3}}\Big) + R(f).$$

A partir de aquí se calculan los pesos α_0 y α_1 por cualquiera de las vías posibles. Por ejemplo, usando exactitud en $\{1, x\}$:

$$\left.\begin{array}{llll} \displaystyle\int_{-1}^{1} 1\,dx = \alpha_0 + \alpha_1 & \to & \alpha_0 + \alpha_1 & = 2 \\ \displaystyle\int_{-1}^{1} x\,dx = \alpha_0\Big(-\frac{1}{\sqrt{3}}\Big) + \alpha_1\Big(\frac{1}{\sqrt{3}}\Big) & \to & -\dfrac{\alpha_0}{\sqrt{3}} + \dfrac{\alpha_1}{\sqrt{3}} & = 0 \end{array}\right\}$$

obtenemos $\alpha_0 = \alpha_1 = 1$. El término de error será

$$R(f) = \frac{1}{4!} f^{iv}(\xi) \int_{-1}^{1} \Pi^2(x)\,dx = \frac{1}{24} f^{iv}(\xi) \frac{8}{45} = \frac{1}{135} f^{iv}(\xi)$$

Ejemplo 1

La versión final de la fórmula gaussiana es

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + \frac{1}{135} f^{iv}(\xi)$$

que es exacta de grado 3, es decir, con 2 grados extra de exactitud.

Fórmulas gaussianas

Ejercicio

Se quiere aproximar

$$\int_0^1 x\, f(x)\, dx \simeq \alpha_0 f(x_0) + \alpha_1 f(x_1)$$

- Determina α_0, α_1, x_0 y x_1 para que la fórmula anterior (con función peso $w(x) = x$) tenga precisión máxima.
- Da una expresión del error.
- Utiliza la fórmula para estimar $\int_0^1 x\, e^{x^3}\, dx$

Fórmulas gaussianas y polinomios ortogonales

Según el Teorema 5, el polinomio $\Pi(x)$ debe cumplir

$$L(x^j \Pi(x)) = 0, \quad j = 0, \ldots, n$$

Si definimos el producto escalar:

$$\langle f, g \rangle = L(fg) = \int_a^b f(x) g(x) \omega(x)\, dx, \quad f, g \in \mathcal{C}[a, b].$$

entonces $\Pi(x)$ es ortogonal a todos los polinomios del espacio $\mathbb{P}_n$.

Nos interesa entonces calcular una base de polinomios ortogonales que se puede hacer mediante el procedimiento de ortogonalización de Gram-Schmidt.

Fórmulas gaussianas y polinomios ortogonales

Supongamos que $\{p_n\}$ es una sucesión de polinomios ortogonales respecto al producto escalar anterior, es decir, el polinomio $p_n(x)$ tiene grado n y es ortogonal a todos los polinomios de grado menor o igual que $n-1$.

Se puede demostrar que estos polinomios verifican una ley de recurrencia a tres términos,

$$\alpha_n p_{n+1}(x) = (x-\beta_n)p_n(x) - \gamma_n p_{n-1}(x)$$

donde

$$\alpha_n = \frac{\langle x p_n, p_{n+1}\rangle}{\langle p_{n+1}, p_{n+1}\rangle},\ \beta_n = \frac{\langle x p_n, p_n\rangle}{\langle p_n, p_n\rangle},\ \gamma_n = \frac{\langle x p_n, p_{n-1}\rangle}{\langle p_{n-1}, p_{n-1}\rangle},$$

Demostración de la relación de recurrencia

Como $x\,p_n(x)$ es un polinomio de grado $n+1$, entonces:

$$x\,p_n(x) = a_0 p_0(x) + a_1 p_1(x) + \cdots + a_{n+1} p_{n+1}(x)$$

Si multiplicamos escalarmente por otro polinomio $p_j(x)$ y usamos la linealidad del producto escalar:

$$\langle x\,p_n, p_j\rangle = a_0\langle p_0, p_j\rangle + a_1\langle p_1, p_j\rangle + \cdots + a_{n+1}\langle p_{n+1}, p_j\rangle = a_j\langle p_j, p_j\rangle$$

de donde se deduce que $a_j = \dfrac{\langle x\,p_n, p_j\rangle}{\langle p_j, p_j\rangle}$. Además,

$$\langle x\,p_n, p_j\rangle = \langle p_n, x\,p_j\rangle = 0 \qquad \text{si } j+1 < n$$

Por tanto:

$$x\,p_n(x) = a_{n+1}\,p_{n+1}(x) + a_n\,p_n(x) + a_{n-1}\,p_{n-1}(x)$$

Demostración de la relación de recurrencia

Si llamamos

$$\alpha_n = a_{n+1} = \frac{\langle x\, p_n, p_{n+1}\rangle}{\langle p_{n+1}, p_{n+1}\rangle}, \quad \beta_n = a_n = \frac{\langle x\, p_n, p_{n+1}\rangle}{\langle p_n, p_n\rangle},$$

$$\gamma_n = a_{n-1} = \frac{\langle x\, p_n, p_{n+1}\rangle}{\langle p_{n-1}, p_{n-1}\rangle}$$

obtenemos

$$x\, p_n(x) = \alpha_n\, p_{n+1}(x) + \beta_n\, p_n(x) + \gamma_n\, p_{n-1}(x)$$

y despejando:

$$\alpha_n\, p_{n+1}(x) = (x - \beta_n)\, p_n(x) - \gamma_n\, p_{n-1}(x)$$

Fórmulas de Gauss-Legendre

- Intervalo $[-1, 1]$.
- Peso $w(x) = 1$
- Los polinomios de Legendre son ortogonales respecto al producto escalar:

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^{1} f(x)g(x)\, dx$$

- Recurrencia de los polinomios de Legendre

$$P_0(x) = 1,\ P_1(x) = x,$$

$$P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} x P_n(x) - \frac{n}{n+1} P_{n-1}(x)$$

Fórmulas de Gauss-Legendre

Ejemplo de fórmula de Gauss-Legendre:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + \frac{1}{135} f^{iv}(\xi).$$

Si queremos una fórmula con 2 nodos necesitamos calcular $P_2(x)$ y lo hacemos a partir de la recurrencia:
Para $n = 1$, tenemos:

$$P_2(x) = \frac{3}{2} x P_1(x) - \frac{1}{2} P_0(x) = \frac{3}{2} x^2 - \frac{1}{2}$$

(se ha usado que $P_0(x) = 1,\ P_1(x) = x$).
Las raíces de $P_2(x)$ son $-\frac{\sqrt{3}}{3}$ y $\frac{\sqrt{3}}{3}$ que serán los nodos de la fórmula.
Los pesos se calculan igual que en el ejemplo 1.

Fórmulas de Gauss-Chebyshev

- Intervalo $[-1, 1]$.
- Peso $w(x) = \dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
- Los polinomios de Chebyshev son ortogonales respecto al producto escalar:

$$\langle f, g\rangle = \int_{-1}^{1} f(x)g(x)\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\,dx$$

- Recurrencia de los polinomios de Chebyshev

$$T_0(x) = 1,\ T_1(x) = x,$$

$$T_{n+1}(x) = 2\,x\,T_n(x) - T_{n-1}(x)$$

- Con el cambio de variable $x = \cos\theta$, se puede probar que $T_n(\cos\theta) = \cos(n\theta)$.

Fórmulas de Gauss-Chebyshev

Ejemplo de fórmula de Gauss-Chebyshev:

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,dx = \frac{\pi}{3}\left(f\left(\cos\frac{\pi}{6}\right) + f\left(\cos\frac{3\pi}{6}\right) + f\left(\cos\frac{5\pi}{6}\right)\right) + \frac{\pi}{2^5 6!} f^{vi}(\xi).$$