1 Motivació

Donada una funció real f integrable i fitada en un interval fitat $[a, b]$, ens proposem calcular el valor numèric de

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

La *integració numèrica* consisteix a donar fórmules aproximades o algorismes per al càlcul d'aquesta integral $I(f)$.

Hi ha molts motius per emprar la integració numèrica: pot ser que l'integrand $f(x)$ només sigui conegut a determinats punts, per exemple obtinguts per mostreig; també, pot ser que es conegui $f(x)$ però que no se'n pugui obtenir una primitiva per aplicar la regla de Barrow, per exemple en casos com $f(x) = e^{-x^2}$ o $f(x) = (\sin x)/x$; inclús pot passar que existeixi la primitiva però sigui tan costosa d'avaluar que valgui més la pena, si ens conformem a conèixer $I(f)$ amb una determinada precisió, de fer servir un mètode aproximat.

Els mètodes que abordarem en aquesta exposició (fórmules de Newton-Cotes i d'integració gaussiana) es basen en aproximar f per un polinomi interpolador $p(x)$ en unes determinades abscisses, i calcular $I(p)$ de forma exacta.

2 Integració amb abscisses donades

2.1 Fonaments de la integració interpolatòria

Siguin $n + 1$ abscisses $a \leq x_0 < x_1 < \ldots < x_n \leq b$ del segment $[a, b]$, i considerem el polinomi $p_n(x)$ de grau menor o igual que n que interpola f en aquestes abscisses, això és, $p_n(x_k) = f(x_k)$, $k = 0, \ldots, n$ (sabem que aquest polinomi existeix i és únic). Llavors aproximem $I(f)$ per $I(p_n)$:

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

Si expressem $p_n(x)$ mitjançant la fórmula d'interpolació de Lagrange:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k L_k(x), \quad \text{on } y_k = f(x_k) \text{ i } L_k(x) = \prod_{i \neq k} \frac{x - x_i}{x_k - x_i},$$

trobem la fórmula d'integració numèrica

$$\int_a^b f(x)\, dx \simeq \sum_{k=0}^{n} y_k W_k, \quad \text{on } W_k = \int_a^b L_k(x)\, dx. \tag{1}$$

Aquesta fórmula rep el nom de *fórmula d'integració interpolatòria de $n+1$ abscisses*. Els coeficients W_k s'anomenen *pesos* de la fórmula d'integració i depenen únicament de a, b i de les abscisses x_k, però no pas de f.

Com el polinomi interpolador és únic, la fórmula (1) és exacta si $f(x)$ és un polinomi de grau més petit o igual que n (ja que, en tal cas, $f(x) = p_n(x)$), la qual cosa ens proporciona una manera de calcular els W_k sense haver de calcular les integrals de $L_k(x)$: s'imposa que (1) sigui exacta per als monomis $1, x, x^2, \ldots, x^n$ i es resol el sistema lineal resultant (*mètode dels coeficients indeterminats*).

Un cas particularment important de les fórmules d'integració interpolatòria el trobem en prendre les $n+1$ abscisses equidistants en $[a,b]$:

$$x_k = a + kh, \quad k = 0, \ldots, n, \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

Tenint en compte això i fent el canvi de variable $x = a + th$ per a les integrals W_k, la fórmula (1) es converteix en

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq h \sum_{k=0}^{n} y_k \alpha_k, \quad \text{on } \alpha_k = \int_0^n \prod_{i \neq k} \frac{t-i}{k-i}\,dt,$$

anomenada *fórmula de Newton-Cotes de $n+1$ abscisses*. Observem que, amb aquesta modificació, els pesos α_k no depenen ni de $[a,b]$ ni de f, només del grau n.

Estudiem ara dos casos particulars de la fórmula de Newton-Cotes, que a la pràctica s'empren molt sovint: són els casos $n = 1$ (fórmula del trapezi) i $n = 2$ (fórmula de Simpson).

2.2 Fórmula del trapezi

Considerem la fórmula de Newton-Cotes amb $n = 1$, això és, interpolem f en les dues abscisses a i b. A fi de simplificar els càlculs, considerarem que l'interval d'integració és $[-1,1]$ en comptes de $[a,b]$, i posteriorment farem el canvi necessari per traslladar-lo. Així doncs, seguint la idea que hem esbossat abans, ens proposem trobar els pesos W_0, W_1 per tal que la fórmula d'integració numèrica

$$\int_{-1}^{1} g(t)\,dt \simeq W_0 g(-1) + W_1 g(1)$$

sigui exacta per a polinomis de grau menor o igual que 1. Imposem-ho, doncs, per a $g(t) = 1$ i $g(t) = t$:

$$g(t) = 1 \Rightarrow 2 = \int_{-1}^{1} 1\, dt = W_0 g(-1) + W_1 g(1) = W_0 + W_1,$$
$$g(t) = t \Rightarrow 0 = \int_{-1}^{1} t\, dt = W_0 g(-1) + W_1 g(1) = -W_0 + W_1,$$

d'on deduïm $W_0 = W_1 = 1$ i per tant la fórmula cercada és $\int_{-1}^{1} g(t)\, dt \simeq g(-1) + g(1)$. Per traslladar-la a l'interval $[a, b]$ fem el canvi de variable

$$x = \frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2} \;\Rightarrow\; dx = \frac{b-a}{2} dt,$$

i escrivim $g(t) = f(x)$, $h = b - a$. La fórmula queda, llavors,

$$\int_a^b f(x)\, dx \simeq \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)) = \frac{h}{2}(f(a) + f(b)).$$

Calculem ara l'error comès en aplicar aquesta fórmula.

Teorema. *Sigui $f(x)$ una funció de classe $\mathcal{C}^2$ fitada en $[a, b]$, i sigui $K = \sup_{x\in[a,b]} |f''(x)|$. Si anomenem $h = b - a$ i $E_T(h)$ l'error comès en aplicar la fórmula del trapezi, tenim la següent fita de l'error:*

$$|E_T(h)| \leq \frac{K}{12} h^3.$$

Demostració. Sigui $t \in [0, h]$; llavors

$$E_T(t) = \int_a^{a+t} f(x)\, dx - \frac{t}{2}(f(a) + f(a + t)).$$

Observem que $E_T(0) = 0$. Si derivem tenim

$$E_T'(t) = f(a + t) - \frac{1}{2}(f(a) + f(a + t)) - \frac{t}{2} f'(a + t) = \frac{1}{2}(f(a + t) - f(a)) - \frac{t}{2} f'(a + t).$$

Altre cop tenim $E_T'(0) = 0$. Tornem a derivar:

$$E_T''(t) = \frac{1}{2} f'(a + t) - \frac{1}{2} f'(a + t) - \frac{t}{2} f''(a + t) = -\frac{t}{2} f''(a + t).$$

Per tant, $|E_T''(t)| \leq Kt/2$ i llavors podem integrar dos cops aplicant la regla de Barrow:

$$|E_T'(t)| = |E_T'(t) - E_T'(0)| = \left|\int_0^t E_T''(s)\, ds\right| \leq \int_0^t |E_T''(s)|\, ds \leq \frac{K}{2}\int_0^t s\, ds = \frac{K}{4} t^2,$$
$$|E_T(t)| = |E_T(t) - E_T(0)| = \left|\int_0^t E_T'(s)\, ds\right| \leq \int_0^t |E_T'(s)|\, ds \leq \frac{K}{4}\int_0^t s^2\, ds = \frac{K}{12} t^3,$$

i, prenent $t = h$, obtenim la fita de l'enunciat. $\square$

2.3 Fórmula de Simpson

Fem el mateix, ara amb $n = 2$, això és, interpolem f en les abscisses a, b i el punt mig $(a+b)/2$. Volem trobar els pesos W_0, W_1, W_2 per tal que la fórmula d'integració numèrica

$$\int_{-1}^{1} g(t)\,dt \simeq W_0 g(-1) + W_1 g(0) + W_2 g(1)$$

sigui exacta per a polinomis de grau menor o igual que 2. Imposem-ho, doncs, per a $g(t) = 1, t, t^2$:

$$\begin{aligned}
g(t) = 1 \Rightarrow 2 &= \int_{-1}^{1} 1\,dt = W_0 g(-1) + W_1 g(0) + W_2 g(1) = W_0 + W_1 + W_2, \\
g(t) = t \Rightarrow 0 &= \int_{-1}^{1} t\,dt = W_0 g(-1) + W_1 g(0) + W_2 g(1) = -W_0 + W_2, \\
g(t) = t^2 \Rightarrow \frac{2}{3} &= \int_{-1}^{1} t^2\,dt = W_0 g(-1) + W_1 g(0) + W_2 g(1) = W_0 + W_2,
\end{aligned}$$

d'on deduïm $W_0 = W_2 = 1/3$, $W_1 = 4/3$ i per tant la fórmula cercada és

$$\int_{-1}^{1} g(t)\,dt \simeq \frac{1}{3}(g(-1) + 4g(0) + g(1)).$$

Per traslladar-la a l'interval $[a, b]$ fem el mateix canvi de variable que abans i obtenim

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right) = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right),$$

(recordem que ara $h = (b-a)/2$) que també podem escriure com

$$\int_{c-h}^{c+h} f(x)\,dx \simeq \frac{h}{3}(f(c-h) + 4f(c) + f(c+h)),$$

essent $c = (a+b)/2$. Com abans, calculem l'error que cometem amb aquesta fórmula:

Teorema. *Sigui $f(x)$ una funció de classe $\mathcal{C}^4$ fitada en $[a, b]$, i sigui $K = \sup_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|$. Si anomenem $h = (b-a)/2$ i $E_S(h)$ l'error comès en aplicar la fórmula de Simpson, tenim la següent fita de l'error:*

$$|E_S(h)| \leq \frac{K}{90} h^5.$$

Demostració. Sigui $t \in [0, h]$; llavors

$$E_S(t) = \int_{c-t}^{c+t} f(x)\,dx - \frac{t}{3}(f(c-t) + 4f(c) + f(c+t)).$$

Derivem tres vegades:

$$
\begin{aligned}
E_S'(t) &= f(c-t) + f(c+t) - \frac{1}{3}(f(c-t) + 4f(c) + f(c+t)) - \frac{t}{3}(-f'(c-t) + f'(c+t)) = \\
&= \frac{2}{3}(f(c-t) - 2f(c) + f(c+t)) + \frac{t}{3}(f'(c-t) - f'(c+t)). \\
E_S''(t) &= \frac{2}{3}(-f'(c-t) + f'(c+t)) + \frac{1}{3}(f'(c-t) - f'(c+t)) + \frac{t}{3}(-f''(c-t) - f''(c+t)) = \\
&= -\frac{1}{3}(f'(c-t) - f'(c+t)) - \frac{t}{3}(f''(c-t) + f''(c+t)). \\
E_S^{(3)}(t) &= \frac{1}{3}(f''(c-t) + f''(c+t)) - \frac{1}{3}(f''(c-t) + f''(c+t)) - \frac{t}{3}(-f^{(3)}(c-t) + f^{(3)}(c+t)) = \\
&= -\frac{t}{3}(f^{(3)}(c+t) - f^{(3)}(c-t)).
\end{aligned}
$$

Pel teorema del valor mitjà de Lagrange, sabem que existeix un $\xi \in (c-t, c+t)$ tal que $f^{(3)}(c+t) - f^{(3)}(c-t) = 2tf^{(4)}(\xi)$, de manera que tenim la fita $|E_S^{(3)}(t)| \leq 2Kt^2/3$ i llavors, integrant tres cops i tenint en compte que $E_S(0) = E_S'(0) = E_S''(0) = 0$,

$$
\begin{aligned}
|E_S''(t)| = |E_S''(t) - E_S''(0)| &= \left| \int_0^t E_S^{(3)}(s)\, ds \right| \leq \int_0^t |E_S^{(3)}(s)|\, ds \leq \frac{2K}{3} \int_0^t s^2\, ds = \frac{2K}{9} t^3, \\
|E_S'(t)| = |E_S'(t) - E_S'(0)| &= \left| \int_0^t E_S''(s)\, ds \right| \leq \int_0^t |E_S''(s)|\, ds \leq \frac{2K}{9} \int_0^t s^3\, ds = \frac{K}{18} t^4, \\
|E_S(t)| = |E_S(t) - E_S(0)| &= \left| \int_0^t E_S'(s)\, ds \right| \leq \int_0^t |E_S'(s)|\, ds \leq \frac{K}{18} \int_0^t s^4\, ds = \frac{K}{90} t^5,
\end{aligned}
$$

i, prenent $t = h$, obtenim la fita de l'enunciat. □

3 Regles compostes d'integració numèrica

Les fórmules d'integració numèrica no s'apliquen normalment sobre tot l'interval $[a, b]$, sinó sobre subintervals de $[a, b]$, donant lloc així a les *regles compostes d'integració numèrica*.

Si dividim $[a, b]$ en N parts iguals i en cada una d'elles apliquem la fórmula del trapezi, obtenim la *regla dels trapezis*:

$$
\int_a^b f(x)\, dx \simeq \frac{h}{2}(f(a) + 2f(a+h) + 2f(a+2h) + \ldots + 2f(b-h) + f(b)),
$$

on ara $h = (b-a)/N$. L'error total comès serà la suma dels errors en cada un dels N

subintervals:

$$|E_T(h)| = \sum_{k=1}^{N} \frac{K}{12} h^3 = N \frac{K}{12} \left(\frac{b-a}{N} \right)^3 = \frac{(b-a)K}{12} h^2.$$

De forma similar, si dividim $[a, b]$ en $2N$ subintervals iguals i apliquem la fórmula de Simpson en cada interval de longitud $(b-a)/N = 2h$, obtenim la *regla de Simpson*:

$$\int_a^b f(x)\, dx \simeq \frac{h}{3}(f(a)+4f(a+h)+2f(a+2h)+4f(a+3h)+\ldots+2f(b-2h)+4f(b-h)+f(b)),$$

i l'error total comès és

$$|E_S(h)| = \sum_{k=1}^{N} \frac{K}{90} h^5 = N \frac{K}{90} \left(\frac{b-a}{2N} \right)^5 = \frac{(b-a)K}{180} h^4.$$

Exemple. Sabent que

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \arctan 1 - \arctan 0 = \frac{\pi}{4},$$

trobem una aproximació numèrica de π aplicant la regla de Simpson per aproximar la integral, dividint $[0, 1]$ en $2N = 4$ parts iguals. En aquest cas, $h = 1/4$, i la derivada quarta de $f(x) = (1 + x^2)^{-1}$ és $f^{(4)}(x) = 24(1 + x^2)^{-5}(5x^4 - 10x^2 + 1)$, el valor absolut de la qual podem fitar per $K = 96$ en $[0, 1]$ si fitem cada factor per separat. Llavors,

$$\frac{\pi}{4} \simeq \frac{1}{12} \left(f(0) + 4f\left(\frac{1}{4}\right) + 2f\left(\frac{1}{2}\right) + 4f\left(\frac{3}{4}\right) + f(1) \right),$$

amb la qual cosa obtenim l'aproximació $\pi \simeq 3.141568$. Una fita de l'error comès és

$$4|E_S(h)| \leq 4 \frac{96}{180} \left(\frac{1}{4} \right)^4 \simeq 8.3 \cdot 10^{-3},$$

força més pessimista que l'error real comès (aprox. $2.4 \cdot 10^{-5}$).

4 Integració gaussiana

Les fórmules d'integració interpolatòria de $n + 1$ abscisses $x_0, \ldots, x_n$, obtingues integrant el polinomi interpolador en aquestes abscisses, són exactes per als polinomis de grau més petit o igual que n; això passa per a qualsevol tria feta de les abscisses. Veurem ara que una tria adequada ens proporcionarà fórmules de $n + 1$ abscisses exactes per a polinomis de grau més petit o igual que $2n + 1$, que rebran el nom de *fórmules gaussianes*.

4.1 Fórmules gaussianes

Concretament, veurem que si triem les $n+1$ abscisses $x_0, \ldots, x_n$ com a zeros d'un polinomi $\psi_{n+1}(x)$ de grau $n+1$, d'una família de polinomis ortogonals sobre l'interval d'integració, obtindrem sempre fórmules d'integració exactes per als polinomis de grau més petit o igual que $2n+1$.

Així, sigui $w : [a,b] \longrightarrow \mathbb{R}$ una funció pes positiva i contínua i sigui $\psi_{n+1}(x) = A_{n+1}x^{n+1} + \ldots$ el polinomi ortogonal de grau $n+1$, amb coeficient principal A_{n+1}, associat al producte escalar

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

Primer de tot, demostrem un resultat necessari sobre la distribució de les arrels de $\psi_{n+1}(x)$.

Teorema. *El polinomi ortogonal $\psi_{n+1}(x)$ té $n+1$ zeros simples en l'interval (a,b).*

Demostració. Si $\psi_{n+1}(x)$ només canviés de signe en i abscisses $\alpha_1, \ldots, \alpha_i$ de $[a,b]$, amb $i \leq n$, aleshores el polinomi

$$q_i(x)\psi_{n+1}(x) = (x-\alpha_1)\ldots(x-\alpha_i)\psi_{n+1}(x)$$

no canviaria de signe en tot (a,b) i, per tant, la integral

$$\int_a^b w(x)q_i(x)\psi_{n+1}(x)\,dx = (q_i(x), \psi_{n+1}(x))$$

seria no nul·la, en contradicció amb el fet que $\psi_{n+1}(x)$ és ortogonal a qualsevol polinomi de grau més petit o igual que n. $\square$

Considerem ara la següent fórmula d'integració numèrica de $n+1$ abscisses, avaluada sobre els zeros x_k de $\psi_{n+1}(x)$:

$$\int_a^b w(x)f(x)\,dx \simeq \sum_{k=0}^{n} W_k f(x_k). \tag{2}$$

Triant els pesos W_k com sempre, de manera que aquesta fórmula sigui exacta per a polinomis de grau més petit o igual que n, comprovarem ara que també ho és per a polinomis de grau menor o igual que $2n+1$. Sigui, doncs, $p_{2n+1}(x)$ un polinomi de grau més petit o igual que $2n+1$ i siguin $q_n(x)$ i $r_n(x)$ els polinomis de grau més petit o igual que n que són el quocient i el residu, respectivament, de la divisió entera de $p_{2n+1}(x)$ per $\psi_{n+1}(x)$:

$$p_{2n+1}(x) = q_n(x)\psi_{n+1}(x) + r_n(x).$$

Tenint en compte que $\psi_{n+1}(x)$ és ortogonal a $q_n(x)$ i que (2) és exacta per a $r_n(x)$, podem escriure

$$\int_a^b w(x)p_{2n+1}(x)\,dx = \int_a^b w(x)q_n(x)\psi_{n+1}(x)\,dx + \int_a^b w(x)r_n(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} W_k r_n(x_k),$$

ara bé, com x_k són els zeros de $\psi_{n+1}(x)$, tenim que $r_n(x_k) = p_{2n+1}(x_k)$ i aleshores

$$\int_a^b w(x)p_{2n+1}(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} W_k p_{2n+1}(x_k),$$

la qual cosa ens confirma que (2) és exacta per a $p_{2n+1}(x)$.

4.2 Error de les fórmules gaussianes

Per a funcions de classe $\mathcal{C}^{2n+2}$ en $[a,b]$ podem donar una expressió per a l'error de les fórmules gaussianes. Per això, considerem el polinomi interpolador d'Hermite $p_{2n+1}(x)$ a f en les abscisses x_k, $k = 0,\ldots,n$ (de grau més petit o igual que $2n+1$); d'una banda, tenim que la fórmula gaussiana és exacta per a aquest polinomi i, d'altra banda, disposem d'una fórmula d'error d'interpolació per a tot $x \in [a,b]$:

$$f(x) - p_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\big((x-x_0)\ldots(x-x_n)\big)^2$$

per a algun $\xi \in [a,b]$. Tenint en compte que $(x-x_0)\ldots(x-x_n) = \psi_{n+1}(x)/A_{n+1}$, podem multiplicar aquesta expressió per $w(x)$ i integrar entre $[a,b]$ per obtenir l'error de la fórmula gaussiana:

$$\int_a^b w(x)f(x)\,dx - \sum_{k=0}^{n} W_k f(x_k) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\frac{1}{A_{n+1}^2}\int_a^b w(x)\psi_{n+1}^2(x)\,dx.$$

Cal notar que podem calcular el factor

$$\frac{1}{A_{n+1}^2}\int_a^b w(x)\psi_{n+1}^2(x)\,dx$$

aplicant la fórmula gaussiana al polinomi $p(x) = x^{2n+2}$, perquè aleshores l'altre factor és la unitat:

$$\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} = 1.$$