



TEMA 2

Derivación e integración numérica.

Revisión 24/ene/2024

1. Introducción

La derivada $f'(a)$ de una función en un punto es un valor límite, si existe, de un cociente incremental. Una vía usual para conseguir $f'(a)$ consiste en obtener la expresión de la función derivada $f'(x)$ mediante las bien conocidas *reglas de derivación* y después evaluarla en el punto a .

Para calcular el valor de la integral definida $\int_a^b f(x) dx$ de una función en un intervalo se suele utilizar la *regla de Barrow*, consistente en hallar en primer lugar la expresión de una *primitiva* de f , esto es, una función cuya derivada sea f , y después evaluarla en los extremos del intervalo. La integral será la diferencia de ambos resultados.

Estos dos problemas son de gran importancia práctica, pero no siempre se pueden resolver en la forma tradicional descrita. Existen múltiples razones para buscar vías alternativas de cálculo de $f'(a)$ o de $\int_a^b f(x) dx$. Se citan algunas.

- No se conoce la expresión analítica de $f(x)$, sino tan solo unos cuantos datos y propiedades. En suma, puede ser que se sepa por el contexto del problema que $f(x)$ existe y es derivable o integrable, se conozca su dominio, y se conozca su valor u otros datos en ciertos puntos, o incluso sea posible evaluarla donde se desee, pero a modo de “caja negra”, sin posibilidad de tener la fórmula que la define.
- Aún cuando se conozca la expresión de $f(x)$, si sólo se desea calcular $f'(a)$ o $\int_a^b f(x) dx$ puede ser un esfuerzo desproporcionado obtener la función derivada o la primitiva para simplemente evaluarla en uno o dos puntos nada más. Piénsese en lo que supone derivar una función cuya expresión es complicada, conteniendo raíces, fracciones y productos, todos ellos elementos que crecen en complejidad al aplicar reglas de derivación. O también el esfuerzo que, en general, supone hallar la integral indefinida, esto es, la primitiva de una función. Además, el problema de la integración analítica es inverso al de la derivación y no siempre es viable. Existen muchas funciones (ej. e^{x^2}) perfectamente integrables, pero cuya primitiva no es expresable en términos analíticos. Dicho en otras palabras, fallan todas las técnicas clásicas para la obtención de primitiva. En la vida real, en la investigación, en la ingeniería, en la industria, en el laboratorio, es lo que suele pasar.

En este tema se abordan ambos problemas de forma unificada como un solo problema, dado que tanto $f'(a)$ como $\int_a^b f(x) dx$ son, como veremos, *funcionales o formas lineales*. El objetivo es calcular una aproximación numérica lo más precisa posible, utilizando para ello los datos o información disponibles acerca de f , usualmente una tabla de valores sueltos, aunque no necesariamente.

Definición 1 (*Funcional o forma lineal*)

Sea \mathbb{F} un espacio de funciones reales de variable real $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Un funcional o forma lineal L sobre \mathbb{F} es una aplicación $L : \mathbb{F} \rightarrow \mathbb{R}$ verificando

$$L(\alpha f + \beta g) = \alpha L(f) + \beta L(g) \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R} \quad \forall f, g \in \mathbb{F}.$$

Ejemplos de formas lineales (Compruébense todas)

- Algunas de uso común pueden ser

$$L_1(f) = \int_0^1 f(x) dx$$

$$L_2(f) = f(7)$$

$$L_3(f) = f'(-2)$$

- En las integrales puede insertarse una *función peso* no negativa, que se puede anular en un conjunto de puntos finito o a lo sumo de medida nula dentro del intervalo de integración

$$L_4(f) = \int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1+x^2}} dx$$

$$L_5(f) = \int_{-2}^2 |x| f(x) dx$$

- Pero también pueden darse formas lineales poco usuales

$$L_6(f) = 3f'''(0)$$

$$L_7(f) = \int_1^3 (f(x^2) + 2f''(x)) dx$$

$$L_8(f) = f(4) - 2f'(4) + 3f''(2) + \pi \int_{-1}^1 f(x) dx$$

Ejemplos de funcionales que NO son formas lineales. Los funcionales de esta lista no son formas lineales. Compruébese.

$$L_1(f) = \int_0^1 f^2(x) dx;$$

$$L_2(f) = \sqrt{f(7)};$$

$$L_3(f) = f(2)f'(-2);$$

$$L_4(f) = \int_1^3 (f(x^2) + 2f''(x))^2 dx;$$

$$L_5(f) = f(4) - 2f'(4) + 3f''(2) + \pi \int_{-1}^1 f(x) dx + 2.$$

Tal como se ha dicho anteriormente, el problema es el de obtener un valor aproximado de una forma lineal de f que llamaremos *objetivo* (su derivada en un punto o su integral definida en un intervalo) a partir de los datos disponibles, que también son formas lineales (típicamente valor de f en puntos). Conviene formalizar este aspecto.

Definición 2 (*Fórmula numérica*)

Sea $L : \mathbb{F} \rightarrow \mathbb{R}$ una forma lineal real (objetivo) definida sobre \mathbb{F} . Dadas las formas lineales $L_i : \mathbb{F} \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 0, \dots, n$, una fórmula numérica para aproximar el valor $L(f)$ es

$$L(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i L_i(f) + R(f), \quad \alpha_i \in \mathbb{R}, \quad f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \tag{1}$$

donde $R(f)$ representa el término de error de la fórmula. También se puede representar omitiendo el término de error como

$$L(f) \approx \sum_{i=0}^n \alpha_i L_i(f), \quad \alpha_i \in \mathbb{R}, \quad f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}.$$

Los coeficientes α_i se denominan pesos de la fórmula.

Fórmula numérica			
$L(f)$	$=$	$\sum_{i=0}^n$	$\alpha_i \quad L_i(f) + R(f)$
objetivo		pesos	datos error

1.1. Casos particulares

- Para calcular aproximadamente la primera derivada de una función en un punto:

$$f'(a) \approx \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$$

en cuyo caso tendríamos $L(f) = f'(a)$ y $L_i(f) = f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$. A los puntos x_i se les denomina *nodos* de la fórmula. Un ejemplo: calcular $f'(2)$ conociendo $f(0)$, $f(1)$, $f(2)$ y $f(3)$.

- Para calcular aproximadamente la integral definida en un intervalo:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$$

donde ahora sería $L(f) = \int_a^b f(x) dx$ y $L_i(f) = f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$. Un ejemplo: calcular aproximadamente $\int_0^2 e^{x^2} dx$ evaluando la función integrando en $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$.

■ Pero también pueden darse otros casos:

- Para la derivada segunda

$$f''(a) \approx \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i),$$

- Para la integral con datos tipo Hermite clásico

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n (\alpha_i f(x_i) + \beta_i f'(x_i)),$$

- Un caso (poco usual) donde el objetivo es una combinación

$$\int_a^b f(x) dx + 3f(c) \approx \sum_{i=0}^n (\alpha_i f(x_i) + \beta_i f''(x_i)),$$

- Y otro caso, aún más inusual pero igualmente factible, con un auténtico *cóctel* de datos

$$f'''(5) \approx \alpha_0 f(-1) + \alpha_1 f'(5) + \alpha_2 \int_1^4 f(x) dx + \alpha_3 f''(0).$$

La vía más empleada, y matemáticamente tratable, de resolver el problema de derivación e integración numérica es por medio de una función p que coincida con f en los datos disponibles, en la hipótesis de que p será una buena aproximación de f , y de este modo la derivada o integral de p también lo será del correspondiente funcional de f . Así, desde el momento en que se menciona que p coincida con f en ciertos datos estamos hablando de *interpolación*. Conviene recordar el problema, ya visto en Métodos Numéricos I.

Sea $V \subseteq \mathbb{F}$ un subespacio de dimensión finita $\dim V = n + 1$. Sean $L_i : \mathbb{F} \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 0, 1, \dots, n$ formas lineales conocidas. Lo más típico es que las formas lineales L_i correspondan a datos de tipo lagrangiano, $L_i(f) = f(x_i)$, aunque también es frecuente una derivada, $L_i(f) = f'(x_i)$ (datos de tipo Hermite).

Definición 3 (*Problema general de interpolación*)

Dadas las formas lineales $L_i : \mathbb{F} \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 0, \dots, n$ y dada $f \in \mathbb{F}$, encontrar el interpolante $p \in V$ que verifique $L_i(p) = L_i(f)$, $i = 0, \dots, n$. En caso de existir solución p , el error de interpolación es la función $E(x) = f(x) - p(x)$.

Se recomienda repasar el tema de interpolación de la asignatura Métodos Numéricos I, en particular las fórmulas de Lagrange y Newton y el estudio del error de interpolación.

Seguidamente se formula la teoría para fórmulas de derivación e integración numérica obtenidas por la citada vía de interpolación.

1.2. Fórmulas numéricas de tipo interpolatorio

Definición 4 (*Tipo interpolatorio*)

Diremos que la fórmula (1) es de tipo interpolatorio si $\sum_{i=0}^n \alpha_i L_i(f) = L(p)$, es decir, $L(f) = L(p) + R(f)$ donde p es el interpolante de f para los datos $L_i(f)$. Como consecuencia se tendrá $R(f) = L(E)$. Si además $V = \mathbb{P}_n$, diremos que la fórmula es de tipo interpolatorio clásico.

Usando la fórmula de Lagrange para el interpolante, los pesos escalares α_i pueden obtenerse como $\alpha_i = L(\ell_i)$, $i = 0, \dots, n$, donde ℓ_i es el i -ésimo elemento de la base de Lagrange, con la propiedad

$$L_j(\ell_i) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } j = i \\ 0 & \text{si } j \neq i \end{cases}$$

1.3. Exactitud y precisión de fórmulas numéricas

Definición 5 (*Exactitud*)

Diremos que la fórmula (1) es exacta para $f \in \mathbb{F}$ cuando $R(f) = 0$. En espacios de polinomios, diremos que tiene grado m de exactitud si y solo si es exacta para $\{1, x, \dots, x^m\}$ y $R(x^{m+1}) \neq 0$.

Observación. Ser exacta en una base $\{1, x, \dots, x^m\}$ de \mathbb{P}_m equivale, por linealidad, a serlo en todo el espacio \mathbb{P}_m .

Teorema 1 (*Caracterización*)

La fórmula (1) es de tipo interpolatorio clásico \Leftrightarrow tiene grado de exactitud al menos n , es decir, es exacta en \mathbb{P}_n .

Demostración.

\Rightarrow Si $f \in \mathbb{P}_n$ entonces su interpolante es ella misma, $f \equiv p$, luego $L(f) = L(p)$ y por tanto $R(f) = 0$ lo que significa que (1) es exacta en \mathbb{P}_n .

\Leftarrow Sea p el interpolante de f en \mathbb{P}_n . Entonces $p(x_i) = f(x_i)$, es decir, $L_i(p) = L_i(f)$ $i = 0, \dots, n$. Si la fórmula (1) es exacta en \mathbb{P}_n lo será para p y por tanto $L(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i L_i(f) +$

$$R(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i L_i(p) + R(f) = L(p) + R(f).$$

□

2. Derivación numérica

Un problema clásico es el de obtener una fórmula de derivación numérica de tipo interpolatorio clásico para $L(f) = f'(a)$, que será de la forma

$$f'(a) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) + R(f) \quad (2)$$

o, para derivadas de orden superior,

$$f^{(k)}(a) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) + R(f). \quad (3)$$

Métodos de obtención de los coeficientes

1. Derivando los polinomios fundamentales de Lagrange: si $\ell_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$ son los polinomios de Lagrange para los nodos dados x_0, x_1, \dots, x_n , entonces $\alpha_i = \ell'_i(a)$, $i = 0, \dots, n$.

Ejemplo: para $f'(0) = \alpha_0 f(0) + \alpha_1 f(2) + R(f)$ los polinomios de Lagrange para los nodos $x_0 = 0$, $x_1 = 1$ son

$$\ell_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = 1 - \frac{x}{2}, \quad \ell_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x}{2},$$

luego $\alpha_0 = \ell'_0(0) = -\frac{1}{2}$ y $\alpha_1 = \ell'_1(0) = \frac{1}{2}$ y la fórmula es

$$f'(0) \approx \frac{f(2) - f(0)}{2}.$$

2. Imponiendo exactitud para $\{1, x, \dots, x^n\}$: los coeficientes α_i son la solución del sistema de ecuaciones lineales $(n+1) \times (n+1)$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ na^{n-1} \end{pmatrix}$$

cuya matriz de coeficientes es de Vandermonde, y por tanto la solución existe y es única \Leftrightarrow los nodos usados son distintos entre sí.

3. Combinando desarrollos de Taylor de f en cada nodo alrededor de a :

$$\begin{array}{l}
\alpha_0 \times [f(x_0) = f(a) + f'(a)h_0 + \cdots + f^{(k)}(a)\frac{h_0^k}{k!} + \cdots + f^{(m)}(\mu_0)\frac{h_0^m}{m!}] \\
\alpha_1 \times [f(x_1) = f(a) + f'(a)h_1 + \cdots + f^{(k)}(a)\frac{h_1^k}{k!} + \cdots + f^{(m)}(\mu_1)\frac{h_1^m}{m!}] \\
\vdots \\
\alpha_i \times [f(x_i) = f(a) + f'(a)h_i + \cdots + f^{(k)}(a)\frac{h_i^k}{k!} + \cdots + f^{(m)}(\mu_i)\frac{h_i^m}{m!}] \\
\vdots \\
\alpha_n \times [f(x_n) = f(a) + f'(a)h_n + \cdots + f^{(k)}(a)\frac{h_n^k}{k!} + \cdots + f^{(m)}(\mu_n)\frac{h_n^m}{m!}] \\
\hline
\sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) = 0 + 0 + \cdots + f^{(k)}(a) + \cdots - R(f)
\end{array}$$

donde $h_i = x_i - a$ y $m > n$. Para conseguir los coeficientes de la fórmula (2) o (3) se plantea la suma $\sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$ y se impone que en dicha suma se anulen todos los términos del miembro derecho excepto el de la derivada objetivo y el del error, formando un sistema $(n+1) \times (n+1)$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ h_0 & h_1 & \cdots & h_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_0^k & h_1^k & \cdots & h_n^k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_0^n & h_1^n & \cdots & h_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ k! \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

2.1. Error en una fórmula de derivación de tipo interpolatorio clásico

Si $p(x)$ es el interpolante de $f(x)$ en $\{x_0, \dots, x_n\}$ entonces por la fórmula de Newton para el polinomio de interpolación se tiene

$$E(x) = f(x) - p(x) = f[x_0, x_1, \dots, x_n, x]\Pi(x)$$

donde $f[\dots]$ representa la diferencia dividida de f y $\Pi(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$. Si f es suficientemente derivable, se puede obtener una expresión del error de (2) como

$$R(f) = E'(a) = \frac{f^{(n+2)}(\mu_1)}{(n+2)!}\Pi(a) + \frac{f^{(n+1)}(\mu_2)}{(n+1)!}\Pi'(a)$$

con $\min\{x_0, \dots, x_n, a\} \leq \mu_i \leq \max\{x_0, \dots, x_n, a\}$, $i = 1, 2$. Esto se debe a que la derivada de $f[x_0, x_1, \dots, x_n, x]$ es $f[x_0, x_1, \dots, x, x]$ y a que una diferencia dividida de f con $m+1$ nodos equivale a $\frac{f^{(m)}(\mu)}{m!}$.

En frecuentes ocasiones esta expresión se puede simplificar. Por ejemplo si a es uno de los nodos, entonces desaparece el primero de los dos sumandos. En caso contrario, si la distribución de nodos es simétrica respecto de a , entonces el polinomio $\Pi(x)$ es de grado par y simétrico respecto

de a , por lo que desaparece el segundo de los sumandos (¿por qué?), con lo que la fórmula gana un grado de exactitud adicional.

Ejercicio: ¿Por qué no se pueden dar ambas circunstancias a la vez, haciendo que $R(f) = 0$?
porque los nodos son todos \neq entre sí.

Ejercicio: No es necesario que los nodos se distribuyan simétricamente alrededor de a para ganar un grado extra de exactitud. Busque un caso de (2) en el que desaparezca el segundo sumando sin que los nodos sean simétricos respecto de a .

2.2. Algunas fórmulas habituales

- Fórmula general con dos nodos

$$f'(a) \approx f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = -\frac{1}{x_1 - x_0}f(x_0) + \frac{1}{x_1 - x_0}f(x_1)$$

con error $R(f) = \frac{f'''(\mu_1)}{3!}(a - x_0)(a - x_1) + \frac{f''(\mu_2)}{2!}(2a - x_0 - x_1)$ (Dedúzcase).

- Fórmula de diferencia progresiva $(a, a + h)$ (exacta en \mathbb{P}_1)

$$f'(a) = \frac{f(a + h) - f(a)}{h} - \frac{f''(\mu)}{2}h$$

- Fórmula de diferencia regresiva $(a, a - h)$ (exacta en \mathbb{P}_1)

$$f'(a) = \frac{f(a) - f(a - h)}{h} + \frac{f''(\mu)}{2}h$$

- Fórmula de diferencia centrada $(a - h, a + h)$ (¡exacta en \mathbb{P}_2 !)

$$f'(a) = \frac{f(a + h) - f(a - h)}{2h} - \frac{f'''(\mu)}{6}h^2 \quad (4)$$

- Fórmula centrada con tres nodos $(a - h, a, a + h)$ (¡la misma de antes!)

$$f'(a) = \frac{f(a + h) - f(a - h)}{2h} - \frac{f'''(\mu)}{6}h^2 \quad (5)$$

- Para $f''(a)$ con tres nodos $(a - h, a, a + h)$ (¡exacta en \mathbb{P}_3 !)

$$f''(a) = \frac{f(a - h) - 2f(a) + f(a + h)}{h^2} - \frac{f^{iv}(\mu)}{12}h^2$$

Ejercicio: Comprobar todo.

Se observan grados de exactitud extra en los casos de nodos simétricos.

Teorema 2 (*Limitación del grado de exactitud*)

Ninguna fórmula (3) puede ser exacta en \mathbb{P}_{n+k+1} .

Demostración. Si lo fuera, lo sería para $\Pi(x), x\Pi(x), \dots, x^k\Pi(x)$. De aquí se deduce que $\Pi^{(k)}(a) = \Pi^{(k-1)}(a) = \dots = \Pi(a) = 0$, por lo que a tendría que ser raíz múltiple de $\Pi(x)$. \square

Como consecuencia, una fórmula (3) sólo puede aumentar k grados adicionales de exactitud, y en particular una fórmula (2) sólo puede aumentar un grado de exactitud.

2.3. Error total en la derivación numérica

Si bien teóricamente $R(f) \rightarrow 0$ cuando $h \rightarrow 0$ en las fórmulas anteriores, en la práctica no sucede así. Por ejemplo, en la fórmula centrada (4), supongamos que por efecto del redondeo se comete en cada evaluación de $f(x)$ un error acotado en valor absoluto por una cierta constante ε . En otras palabras, en lugar de trabajar con valores exactos $f(x)$ se trabaja con valores calculados $f_c(x)$ de forma que $|f(x) - f_c(x)| \leq \varepsilon$. Así,

$$f_c(a + h) = f(a + h) + \delta_h; \quad f_c(a - h) = f(a - h) + \delta_{-h} \text{ con } |\delta_h|, |\delta_{-h}| \leq \varepsilon.$$

Entonces, al evaluar la fórmula (4) y suponiendo $f'''(x) \leq M$, tendremos

$$\left| f'(a) - \frac{f_c(a + h) - f_c(a - h)}{2h} \right| \leq \left| \frac{f'''(\mu)}{6} h^2 \right| + \frac{2\varepsilon}{2h} \leq \frac{M}{6} h^2 + \frac{\varepsilon}{h},$$

con lo que el término de error podría aumentar significativamente cuando $h \rightarrow 0$ por causa del segundo sumando $\frac{\varepsilon}{h}$.

La Figura 1 ilustra esto con una gráfica de la función cota de error $g(x) = \frac{M}{6}h^2 + \frac{\varepsilon}{h}$. El valor mínimo se alcanza en $h^* = \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{M}}$ y vale $g(h^*) = \frac{1}{2}\sqrt[3]{9\varepsilon^2 M}$.

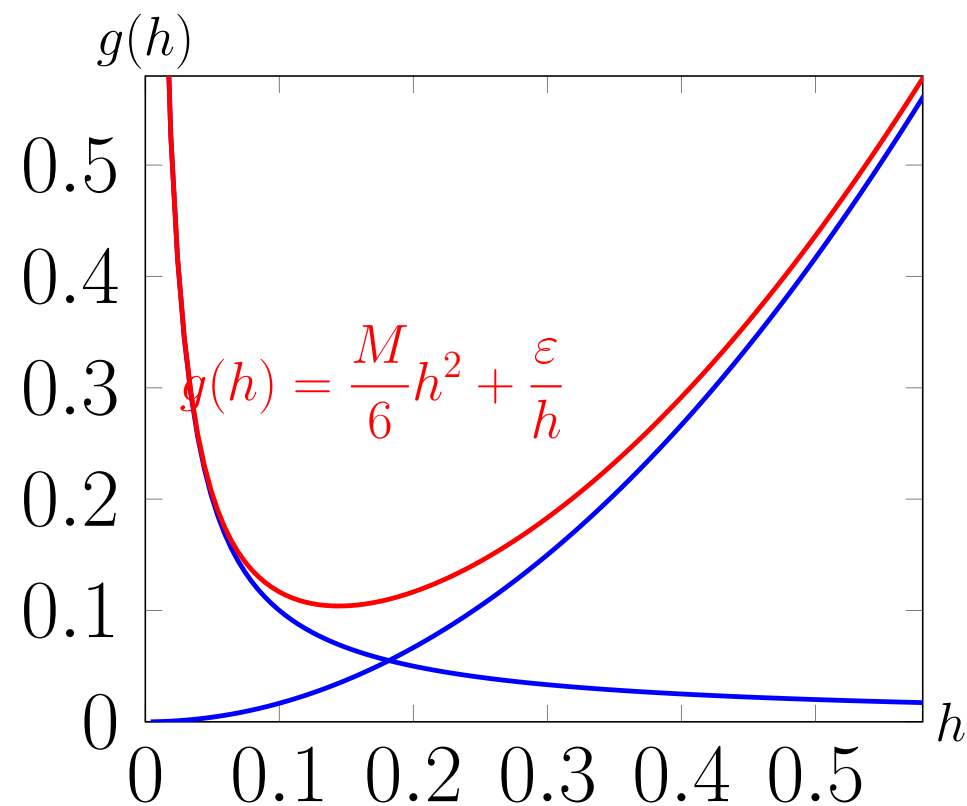


Figura 1: Variación de la cota de error respecto de h , siendo $M = 10$, $\varepsilon = 0.01$. El mínimo se alcanza en $h^* = 0.1442$, por lo que no conviene tomar valores más pequeños.

De lo anterior podría parecernos que si vamos computando aproximaciones de esta derivada con valores cada vez más pequeños de h , el error se irá hacia ∞ . Sin embargo no va a ser así, porque este es un caso en el que entra también en juego el error de cancelación que se produce cuando se restan dos cantidades casi idénticas con precisión limitada, y aquí el numerador $f(a+h) - f(a-h)$ produce una cancelación que lleva a convertirlo en cero antes de aplicar la división por h . Con lo cual a partir de ese momento el error cometido con la fórmula es igual al valor de la derivada que se desea aproximar, $R(f) = f'(a)$, sin que tienda a infinito.

3. Fórmulas de integración numérica o de cuadratura

Las de tipo interpolatorio son de la forma

$$L(f) = \int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) + R(f) \quad (6)$$

o bien de la forma más general

$$L(f) = \int_a^b \omega(x) f(x) dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) + R(f) \quad (7)$$

donde $\omega(x)$ es una *función peso*¹ no negativa, integrable, y tal que el conjunto de puntos de $[a, b]$ donde se anula es de medida nula. La fórmula sin peso (6) puede considerarse como caso particular de (7) con $\omega(x) = 1$.

¹Una función peso es un artilugio matemático que se utiliza en sumas, integrales o promedios para dar mayor importancia (peso) a unos elementos frente a otros en el resultado final. El resultado es una suma, integral o media *ponderada*. Se suelen usar en estadística y análisis, y tanto en dominios discretos como continuos.

Evidentemente, además de datos lagrangianos (valores de la función en nodos) también pueden usarse datos tipo Hermite (valor y derivada en nodos) tal como se usan en interpolación, y entonces las fórmulas anteriores se expresarían añadiendo datos del tipo $f'(x_i)$ en algunos o todos los nodos, e incluso derivadas de orden superior. Por sencillez nos centraremos en datos lagrangianos.

De forma análoga a las fórmulas de derivación, los pesos α_i pueden obtenerse en las fórmulas de integración de tipo interpolatorio por varias vías. Se describen a continuación tres: integrando los polinomios de Lagrange, obligando exactitud, e integrando el interpolante.

- **Integrando los polinomios fundamentales de Lagrange**

$$\alpha_i = \int_a^b \ell_i(x) dx \quad \text{o bien} \quad \alpha_i = \int_a^b \omega(x) \ell_i(x) dx$$

Ejemplo. Veamos un ejemplo para la fórmula $\int_{-1}^1 f(x) dx = \alpha_0 f(-1) + \alpha_1 f(0) + \alpha_2 f(1) + R(f)$. Los polinomios de Lagrange asociados a los nodos $\{-1, 0, 1\}$ son

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= \int_{-1}^1 \ell_0(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{(x-0)(x-1)}{(-1-0)(-1-1)} dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (x^2 - x) dx = \frac{1}{3} \\ \alpha_1 &= \int_{-1}^1 \ell_1(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{(x+1)(x-1)}{(0+1)(0-1)} dx = - \int_{-1}^1 (x^2 - 1) dx = \frac{4}{3} \\ \alpha_2 &= \int_{-1}^1 \ell_2(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{(x+1)(x-0)}{(1+1)(1-0)} dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (x^2 + x) dx = \frac{1}{3}\end{aligned}$$

y la fórmula resulta ser $\int_{-1}^1 f(x) dx = \frac{1}{3}(f(-1) + 4f(0) + f(1)) + R(f)$.

Probemos la fórmula con varias funciones distintas.

$f(x)$	$\int_{-1}^1 f(x) dx$ exacto	aproximado
e^x	2.350402387287603	2.362053756543496
x^2	0.6666666666666667	0.6666666666666667
x^4	0.4	0.6666666666666667
$\cos x$	1.682941969615793	1.693534870578760
$\log(5+x)$	3.205379370888768	3.205268493361449
$(x^2+1)^{-1}$	1.570796326794897	1.6666666666666667

- **Obligando exactitud** en $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$.

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b-a \\ \frac{b^2-a^2}{2} \\ \vdots \\ \frac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1} \end{pmatrix} \quad \text{o bien} \quad \begin{pmatrix} \int_a^b \omega(x) dx \\ \int_a^b \omega(x)x dx \\ \vdots \\ \int_a^b \omega(x)x^n dx \end{pmatrix}$$

cuya matriz de coeficientes es de Vandermonde, y por tanto la solución existe y es única \Leftrightarrow los nodos usados son distintos entre sí.

Ejemplo. Para la misma fórmula anterior.

- Exacta en 1: hacemos $f(x) \equiv 1$ y se tiene

$$\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 = \int_{-1}^1 1 \, dx = 2$$

- Exacta en x : hacemos $f(x) = x$ y se tiene

$$-\alpha_0 + \alpha_2 = \int_{-1}^1 x \, dx = 0$$

- Exacta en x^2 : hacemos $f(x) = x^2$ y se tiene

$$\alpha_0 + \alpha_2 = \int_{-1}^1 x^2 \, dx = \frac{2}{3}$$

Y la solución del sistema abreviado

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 2 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \frac{2}{3} \end{array} \right) \text{ es } \begin{cases} \alpha_0 = \frac{1}{3} \\ \alpha_1 = \frac{4}{3} \\ \alpha_2 = \frac{1}{3} \end{cases}$$

como cabía esperar.

- **Integrando el interpolante.** Si p es el interpolante de f entonces $p(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$. Al calcular $\int_a^b p(x) dx$ y reordenar el resultado, sale una combinación lineal de $p(-1)$, $p(0)$ y $p(1)$ cuyos coeficientes son los pesos de la fórmula.

Ejemplo. En el ejemplo anterior, el polinomio de interpolación puede obtenerse de la fórmula de Newton mediante la tabla de diferencias divididas

$$\begin{array}{c|cc} -1 & f(-1) & \\ 0 & f(0) & f(0) - f(-1) \\ 1 & f(1) & f(1) - f(0) \end{array} \quad \frac{1}{2}(f(1) - 2f(0) + f(-1))$$

de la que se obtiene

$$p(x) = f(-1) + (f(0) - f(-1))(x + 1) + \frac{1}{2}(f(1) - 2f(0) + f(-1))x(x + 1)$$

e integrando el interpolante resulta

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 p(x) dx &= 2f(-1) + 2(f(0) - f(-1)) + \frac{1}{3}(f(1) - 2f(0) + f(-1)) \\ &= \frac{1}{3}f(-1) + \frac{4}{3}f(0) + \frac{1}{3}f(1) \end{aligned}$$

como cabía esperar.

3.1. Error en las fórmulas de integración

En toda fórmula de tipo interpolatorio el error será $R(f) = L(f) - L(p) = L(E)$ siendo p el interpolante y $E = f - p$ el error de interpolación. Usando la expresión del error de la fórmula de Newton se tiene

$$R(f) = \int_a^b \omega(x) f[x_0, \dots, x_n, x] \Pi(x) dx \quad \text{siendo} \quad \Pi(x) = (x - x_0) \cdots (x - x_n).$$

Para facilitar una más práctica expresión del error se usa el

Teorema 3 (del valor medio integral generalizado)

Si $f(x)$ es continua en $[a, b]$ y $g(x)$ es integrable y no cambia de signo en $[a, b]$, entonces existe $\mu \in [a, b]$ tal que

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

De este modo podríamos obtener

$$\begin{aligned}
 R(f) &= \int_a^b \omega(x) f[x_0, \dots, x_n, x] \Pi(x) dx \\
 &= f[x_0, \dots, x_n, \mu] \int_a^b \omega(x) \Pi(x) dx \\
 &= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_a^b \omega(x) \Pi(x) dx
 \end{aligned}$$

a condición de que f sea suficientemente derivable y $\Pi(x)$ no cambie de signo en $[a, b]$. Pero lo segundo no tiene por qué ocurrir. Más bien al contrario, los nodos x_i suelen estar dentro del intervalo $[a, b]$. Por ejemplo, si $n = 2$ y $\{x_0, x_1, x_2\} = \{a, x_1, b\}$ con $a < x_1 < b$, entonces $\Pi(x) = (x - a)(x - x_1)(x - b)$ cambia de signo en x_1 y no podemos aplicar el teorema del valor medio integral para sacar $f[a, x_1, b, x]$ fuera del integrando. Ahora bien, teniendo en cuenta por las propiedades de las diferencias divididas que

$$f[a, x_1, x_1, b, x] = \frac{f[a, x_1, b, x] - f[a, x_1, x_1, b]}{x - x_1}$$

se podría escribir

$$f[a, x_1, b, x] = f[a, x_1, x_1, b] + f[a, x_1, x_1, b, x](x - x_1)$$

con lo que

$$R(f) = \cdots = f[a, x_1, x_1, b] \int_a^b \omega(x) \Pi(x) dx + \int_a^b \omega(x) f[a, x_1, x_1, b, x] (x - x_1) \Pi(x) dx$$

en cuyo segundo sumando ya sí se puede aplicar el teorema puesto que $(x - x_1)\Pi(x)$ no cambia de signo en $[a, b]$, y cuyo primer sumando suele ser fácil de obtener, e incluso puede ser cero en el caso $x_1 = \frac{a+b}{2}$.

En general, para cada $x_i \in]a, b[$ en donde $\Pi(x)$ cambia de signo, podemos partir de

$$f[\dots, x_i, x_i, \dots, x] = \frac{f[\dots, x_i, \dots, x] - f[\dots, x_i, x_i, \dots]}{x - x_i},$$

para poner

$$f[\dots, x_i, \dots, x] = f[\dots, x_i, x_i, \dots] + f[\dots, x_i, x_i, \dots, x](x - x_i)$$

y por tanto

$$\begin{aligned} L(f[\dots, x_i, \dots, x]\Pi) &= f[\dots, x_i, x_i, \dots]L(\Pi) \\ &+ L(f[\dots, x_i, x_i, \dots, x](x - x_i)\Pi) \end{aligned}$$

en donde se ha eliminado un cambio de signo.

Ejemplo. Veamos el cálculo del error para la fórmula $\int_{-1}^1 f(x) dx = \frac{1}{3}(f(-1) + 4f(0) + f(1)) + R(f)$ que ha servido de ejemplo anteriormente. De la fórmula de Newton para el polinomio de interpolación se tiene que el error de interpolación es $f[-1, 0, 1, x](x+1)(x-0)(x-1)$, luego el error de la fórmula de integración será

$$R(f) = \int_{-1}^1 f[-1, 0, 1, x](x+1)(x-0)(x-1) dx$$

en el que no se puede aplicar directamente el teorema del valor medio integral porque el factor $(x-0)$ provoca un cambio de signo en $\Pi(x) = (x+1)(x-0)(x-1)$ en el intervalo $[-1, 1]$. No hay otro remedio que desarrollar la diferencia dividida

$$f[-1, 0, 0, 1, x] = \frac{f[-1, 0, 1, x] - f[-1, 0, 0, 1]}{x - 0}$$

para poner

$$f[-1, 0, 1, x] = f[-1, 0, 0, 1] + f[-1, 0, 0, 1, x](x-0)$$

y sustituyendo se tiene

$$\begin{aligned}
R(f) &= \int_{-1}^1 f[-1, 0, 0, 1](x+1)(x-0)(x-1) dx \\
&+ \int_{-1}^1 f[-1, 0, 0, 1, x](x+1)(x-0)^2(x-1) dx \\
&= f[-1, 0, 0, 1] \int_{-1}^1 (x+1)(x-0)(x-1) dx \\
&+ f[-1, 0, 0, 1, \mu] \int_{-1}^1 (x+1)(x-0)^2(x-1) dx \\
&= 0 + \frac{f^{iv}(\xi)}{4!} \left(-\frac{4}{15} \right) = -\frac{f^{iv}(\xi)}{90}.
\end{aligned}$$

Con esto, la versión final de la fórmula es

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \frac{1}{3}f(-1) + \frac{4}{3}f(0) + \frac{1}{3}f(1) - \frac{f^{iv}(\xi)}{90}. \quad (8)$$

Nota. En los casos en que hay dos nodos o más en el interior del intervalo de integración, el cálculo del error se suele complicar, resultando una expresión que involucra derivadas de varios órdenes. En algunos casos particulares existen otras técnicas para la obtención de una expresión más cómoda del error.

Obtener una fórmula del tipo $\int_{-1}^1 f(x) (1-x^2) dx = d_0 f(-1) + d_1 f(0) + d_2 f(1) + R(f)$

Sea $x_0 = -1, x_1 = 0, x_2 = 1$ $w(x) = 1-x^2$

1) Polinomios de Lagrange:

$$l_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} = \frac{(x-0)(x-1)}{(-1-0)(-1-1)} = \frac{x^2-x}{2}$$

$$l_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} = \frac{(x+1)(x-1)}{(0+1)(0-1)} = -x^2+1$$

$$l_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} = \frac{(x+1)(x-0)}{(1+1)(1-0)} = \frac{x^2+x}{2}$$

$$d_0 = \int_{-1}^1 l_0(x) w(x) dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (x^2-x)(1-x^2) dx = \frac{2}{15}$$

$$d_1 = \int_{-1}^1 l_1(x) w(x) dx = \int_{-1}^1 (-x^2+1)(1-x^2) dx = \int_{-1}^1 (1-x^2)^2 dx = \frac{16}{15}$$

$$d_2 = \int_{-1}^1 l_2(x) w(x) dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (x^2+x)(1-x^2) dx = \frac{2}{15}$$

2) Imponiendo exactitud:

$$\left. \begin{aligned} \int_{-1}^1 1 \cdot w(x) dx &= \frac{4}{3} = d_0 \cdot 1 + d_1 \cdot 1 + d_2 \cdot 1 = d_0 + d_1 + d_2 \\ \int_{-1}^1 x w(x) dx &= 0 = d_0(-1) + d_1 \cdot 0 + d_2 \cdot 1 = -d_0 + d_2 \\ \int_{-1}^1 x^2 w(x) dx &= \frac{4}{15} = d_0(-1)^2 + d_1 \cdot 0^2 + d_2 \cdot 1^2 = d_0 + d_2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4/3 \\ 0 \\ 4/15 \end{pmatrix} \Rightarrow d_0 = \frac{2}{15} \quad d_1 = \frac{16}{15} \quad d_2 = \frac{2}{15}$$

3) Integrando interpolante:

$$\begin{array}{c|cc} -1 & f(-1) & \\ 0 & f(0) & \frac{f(0)-f(-1)}{0+1} \\ 1 & f(1) & \frac{f(1)-f(0)}{1-0} \end{array} \quad \frac{f(1)-f(0)-f(0)+f(-1)}{1+1} = \frac{f(-1)-2f(0)+f(1)}{2}$$

El interpolante será de la forma

$$p(x) = f(-1) + (f(0) - f(-1))(x+1) + \frac{f(-1) - 2f(0) + f(1)}{2} x(x+1)$$

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 p(x) w(x) dx &= f(-1) \int_{-1}^1 (1-x^2) dx + (f(0) - f(-1)) \int_{-1}^1 (1-x^2)(x+1) dx + \\ &\frac{f(-1) - 2f(0) + f(1)}{2} \int_{-1}^1 (1-x^2) x(x+1) dx = \frac{4}{3} f(-1) + \frac{4}{3} (f(0) - f(-1)) + \frac{2}{15} (f(-1) - 2f(0) + f(1)) \\ &= \frac{2}{15} f(-1) + \frac{16}{15} f(0) + \frac{2}{15} f(1) \end{aligned}$$

Calculamos error:

$$R(f) = \int_{-1}^1 f(x_0, x_1, x_2, x) w(x) \pi(x) dx$$

$$\pi(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) = x(x+1)(x-1) = x^3 - x$$

$$w(x) \pi(x) = (1-x^2)(x^3 - x) = x^3 - x - x^5 + x^3 = -x^5 + 2x^3 - x$$

veamos que $x=0$ supone cambio de signo.

$$\text{Sabemos } f[x_0, x_1, x_2, x] = \frac{f[x_0, x_1, x_2, x] - f[x_0, x_1, x_2, x_1]}{x - x_1} \Leftrightarrow$$

$$f[x_0, x_1, x_2, x] = f[x_0, x_1, x_2, x_1] + (x - x_1) f[x_0, x_1, x_2, x] \Leftrightarrow$$

$$f[-1, 0, 1, x] = f[-1, 0, 0, 1] + x f[-1, 0, 0, 1, x]$$

Por tanto,

$$R(f) = f[-1, 0, 0, 1] \int_{-1}^1 w(x) \pi(x) dx + \int_{-1}^1 x \pi(x) w(x) f[-1, 0, 0, 1, x] dx =$$

$$0 + f[-1, 0, 0, 1, \mu] \int_{-1}^1 -x^6 + 2x^4 - x^2 dx = \frac{-16}{105} \frac{f^{(5)}(\xi)}{5!} = \frac{-2}{315} f^{(5)}(\xi), \quad \xi \in [-1, 1]$$

$$\text{Así, } \int_{-1}^1 f(x) w(x) dx = \frac{2}{15} f(-1) + \frac{16}{15} f(0) + \frac{2}{15} f(1) - \frac{2}{315} f^{(5)}(\xi), \quad \xi \in [-1, 1]$$

3.2. Fórmulas simples usuales

En lo que sigue se supondrá f suficientemente derivable y $\xi \in [a, b]$.

Fórmula de	$\int_a^b f(x) dx \approx$	$R(f)$	Exacta
Rectángulo izquierda	$(b - a)f(a)$	$\frac{(b-a)^2}{2} f'(\xi)$	\mathbb{P}_0
Rectángulo derecha	$(b - a)f(b)$	$-\frac{(b-a)^2}{2} f'(\xi)$	\mathbb{P}_0
Punto medio	$(b - a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$	$\frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi)$	\mathbb{P}_1 (*)
Trapezio	$\frac{b-a}{2} (f(a) + f(b))$	$-\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)$	\mathbb{P}_1
Simpson ²	$\frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$	$-\frac{(b-a)^5}{2880} f^{iv}(\xi)$	\mathbb{P}_3 (*)

* Obsérvese que el grado real de exactitud de la fórmula es superior al que le corresponde por ser de tipo interpolatorio.

²Thomas Simpson (1710-1761), matemático inglés autodidacta. Se dice que el método de Newton es suyo y no de Newton.

Ejercicio: Deducirlas todas, con su término de error. En dos de ellas hay que desdoblar la diferencia dividida.

Solución.

- **Fórmula del rectángulo izquierda:** $\int_a^b f(x) dx = \alpha_0 f(a) + R(f)$. Exacta en $\mathbb{P}_0 \Rightarrow$ exacta en $f \equiv 1 \Rightarrow \alpha_0 = b - a$. El error es

$$R(f) = \int_a^b f[a, x](x - a) dx = f[a, \mu] \int_a^b (x - a) dx = f'(\xi) \frac{(b - a)^2}{2}$$

luego la fórmula del rectángulo izquierda queda como

$$\int_a^b f(x) dx = (b - a)f(a) + \frac{(b - a)^2}{2} f'(\xi).$$

- **Punto medio:** $\int_a^b f(x) dx = \alpha_0 f(m) + R(f)$ con $m = \frac{a+b}{2}$. Exacta en $\mathbb{P}_0 \Rightarrow \alpha_0 = b - a$.

El error es $R(f) = \int_a^b f[m, x](x - m) dx$ donde el cambio de signo en m obliga a desdoblar:
 $f[m, x] = f[m, m] + f[m, m, x](x - m)$ y así

$$\begin{aligned} R(f) &= \int_a^b f[m, m](x - m) dx + \int_a^b f[m, m, x](x - m)^2 dx \\ &= 0 + f[m, m, \mu] \int_a^b (x - m)^2 dx \\ &= \frac{f''(\xi)}{2} \frac{(b - a)^3}{12} \end{aligned}$$

luego la fórmula del punto medio queda como

$$\int_a^b f(x) dx = (b - a)f(m) + \frac{(b - a)^3}{24} f''(\xi).$$

- **Trapezio:** $\int_a^b f(x) dx = \alpha_0 f(a) + \alpha_1 f(b) + R(f)$. Exacta en 1, $x \Rightarrow \alpha_0 + \alpha_1 = b - a$,
 $\alpha_0 a + \alpha_1 b = \frac{1}{2}(b^2 - a^2)$. El sistema

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ a & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b - a \\ \frac{b^2 - a^2}{2} \end{pmatrix} \text{ tiene la solución } \begin{cases} \alpha_0 = \frac{b-a}{2} \\ \alpha_1 = \frac{b-a}{2} \end{cases}$$

El error es $R(f) = \int_a^b f[a, b, x](x - a)(x - b) dx = -\frac{f''(\xi)(b - a)^3}{2 \cdot 6}$ luego la fórmula del trapecio queda como

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b - a}{2}(f(a) + f(b)) - \frac{(b - a)^3}{12} f''(\xi).$$

- **Simpson:** $\int_a^b f(x) dx = \alpha_0 f(a) + \alpha_1 f(m) + \alpha_2 f(b) + R(f)$ con $m = \frac{a+b}{2}$. Exacta en $1, x, x^2$. El sistema

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ a & m & b \\ a^2 & m^2 & b^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b-a \\ \frac{b^2-a^2}{2} \\ \frac{b^3-a^3}{3} \end{pmatrix} \quad \text{tiene la solución} \quad \begin{cases} \alpha_0 = \frac{1}{6}(b-a) \\ \alpha_1 = \frac{4}{6}(b-a) \\ \alpha_2 = \frac{1}{6}(b-a) \end{cases}$$

pero es muy laborioso de resolver de forma manual debido a la presencia de variables a y b en las expresiones. Se puede simplificar haciendo un cambio temporal de variable

$$x = a + (b-a)\frac{t+1}{2}, \quad dx = \frac{b-a}{2}dt, \quad x \in [a, b] \text{ si } t \in [-1, 1]$$

o recíprocamente

$$t = 2\frac{x-a}{b-a} - 1, \quad dt = \frac{2}{b-a}dx, \quad t \in [-1, 1] \text{ si } x \in [a, b].$$

Este cambio de variable transforma los puntos $a, m, b \in [a, b]$ en $-1, 0, 1 \in [-1, 1]$ respectivamente, y nos permite escribir

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

y si definimos

$$g(t) = \frac{b-a}{2} f\left(a + (b-a)\frac{t+1}{2}\right)$$

entonces la equivalencia queda como

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{-1}^1 g(t) dt$$

y, mira por dónde, podemos aplicar la fórmula de cuadratura (8) que anteriormente sirvió de ejemplo

$$\int_{-1}^1 g(t) dt = \frac{1}{3}g(-1) + \frac{4}{3}g(0) + \frac{1}{3}g(1) - \frac{g^{iv}(\xi)}{90}$$

y deshacer el cambio

$$\dots = \frac{1}{3}\frac{b-a}{2}f(a) + \frac{4}{3}\frac{b-a}{2}f(m) + \frac{1}{3}f(b) - \frac{b-a}{2}\frac{f^{iv}(\eta)}{90} \left(\frac{b-a}{2}\right)^4$$

para finalmente obtener la fórmula de Simpson

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(m) + f(b)) - \frac{(b-a)^5}{2880}f^{iv}(\eta).$$

3.3. Fórmulas de Newton-Cotes

Se trata de fórmulas basadas en una distribución equiespaciada de nodos en un intervalo de integración. Siendo $h = \frac{b-a}{n}$, las fórmulas de Newton-Cotes³ son

■ **Cerradas:** $\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n a_i f(a + ih) + R(f),$ *a, b están incluidos*

■ **Abiertas:** $\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^{n-1} a_i f(a + ih) + R(f).$ *a, b no están incluidos*

Así, trapecio y Simpson son las dos primeras fórmulas de Newton-Cotes cerradas y punto medio es la primera abierta. Otras fórmulas⁴:

- Cerrada con 4 nodos ($n = 3$, exacta en \mathbb{P}_3)

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) - \frac{3h^5}{80}f^{iv}(\xi)$$

³Roger Cotes (1682 – 1716), matemático inglés que trabajó estrechamente con Isaac Newton.

⁴La expresión del error en fórmulas que usan dos o más nodos interiores a $[a, b]$ no es fácil de obtener. Véase el libro de Isaacson y Keller “Analysis of Numerical Methods”, Dover, New York, 1994.

- Cerrada con 5 nodos ($n = 4$, exacta en \mathbb{P}_5)

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{90}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4) - \frac{8h^7}{945}f^{(vi)}(\xi)$$

- Abierta con 2 nodos ($n = 3$, exacta en \mathbb{P}_1)

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2}(f_1 + f_2) + \frac{3h^3}{4}f''(\xi)$$

Comportamiento asintótico de las fórmulas de Newton-Cotes. Al ir aumentando el número de nodos de la distribución, es decir, cuando $n \rightarrow \infty$, el término de error $R(f)$ podría no tender a cero. Un ejemplo clásico (Hildebrand 1956): $\int_{-4}^4 \frac{dx}{1+x^2}$. Comportamientos como éste desaconsejan el uso de fórmulas de Newton-Cotes con un elevado número de nodos. En su lugar es mucho más conveniente emplear fórmulas compuestas, que no sufren este efecto y además requieren menos esfuerzo para su diseño.

3.4. Fórmulas compuestas

Para evitar el diseño de fórmulas con muchos nodos y su posible mal comportamiento asintótico, se divide el intervalo de integración y se aplica en cada subintervalo una fórmula simple, usualmente del mismo tipo. Sea $\{a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b\}$ una partición⁵ del intervalo $[a, b]$, no necesariamente uniforme aunque lo usual es que lo sea. Entonces

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx = \sum_{i=1}^n F_i + \sum_{i=1}^n R_i(f)$$

donde F_i es una fórmula simple⁶ aplicada en el subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$ y $R_i(f)$ su correspondiente término de error.

Ejemplo. La fórmula compuesta asociada a la del rectángulo derecha para una partición uniforme con $h = x_i - x_{i-1} \forall i$ es

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx = \sum_{i=1}^n h f(x_i) - \sum_{i=1}^n \frac{h^2}{2} f'(\mu_i).$$

⁵Se usa aquí la notación x_i para indicar los nodos de la partición y n para el número de subintervalos en que se divide el intervalo $[a, b]$. No se deben confundir con los nodos de cada una de las fórmulas simples que se usen en los subintervalos, ni con su orden, relacionado con su grado de exactitud.

⁶A partir de ahora se usa el término *fórmula simple* en contraposición a *fórmula compuesta*. Todas las fórmulas vistas anteriormente son simples.

3.5. Error en las fórmulas compuestas

Por lo general para una partición uniforme de $[a, b]$ se tiene $R_i(f) = C f^{(k)}(\mu_i)$ con C constante y $\mu_i \in [x_{i-1}, x_i]$. En tal caso se puede escribir, si f es de clase k ,

$$R(f) = \sum_{i=1}^n R_i(f) = C \sum_{i=1}^n f^{(k)}(\mu_i) = Cn \sum_{i=1}^n \frac{f^{(k)}(\mu_i)}{n} = Cn f^{(k)}(\xi)$$

con $\xi \in [a, b]$, puesto que el último sumatorio es un valor medio alcanzable por $f^{(k)}$, en virtud del teorema del valor medio para una función continua.

Ejemplo. Para la fórmula compuesta del rectángulo derecha

$$R(f) = - \sum_{i=1}^n \frac{h^2}{2} f'(\mu_i) = - \frac{nh^2}{2} \sum_{i=1}^n \frac{f'(\mu_i)}{n} = - \frac{(b-a)h}{2} f'(\xi).$$

3.6. Fórmulas compuestas usuales

Consideremos una partición uniforme con $h = \frac{b-a}{n}$ y abreviemos la notación con $x_i = a + ih$, $f_i = f(x_i)$, admitiendo valores fraccionarios de i donde se aplique, esto es, $x_{i+\frac{1}{2}} = a + (i + \frac{1}{2})h = x_i + \frac{h}{2}$, $f_{i+\frac{1}{2}} = f(x_{i+\frac{1}{2}})$.

F. compuesta	$\int_a^b f(x) dx \approx$	$R(f)$
Rect. izda.	$h \sum_{i=0}^{n-1} f_i$	$\frac{(b-a)h}{2} f'(\xi)$
Rect. dcha.	$h \sum_{i=1}^n f_i$	$-\frac{(b-a)h}{2} f'(\xi)$
Pto. medio	$h \sum_{i=1}^n f_{i-\frac{1}{2}}$	$\frac{(b-a)h^2}{24} f''(\xi)$
Trapezio	$\frac{h}{2} \left(f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f_i + f(b) \right)$	$-\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi)$
Simpson	$\frac{h}{6} \left(f(a) + 4 \sum_{i=1}^n f_{i-\frac{1}{2}} + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f_i + f(b) \right)$	$-\frac{(b-a)h^4}{2880} f^{iv}(\xi)$
Simpson ⁷	$\frac{h}{3} \left(f(a) + 4 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} f_{2i-1} + 2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}-1} f_{2i} + f(b) \right)$	$-\frac{(b-a)h^4}{180} f^{iv}(\xi)$

Ejercicio: Deducir todas, con su error.

⁷Notación alternativa más popular, siendo n par.

Respecto de la segunda versión de la fórmula compuesta de Simpson, en realidad es la misma pero con un cambio de notación para hacerla más legible de cara a los no expertos. Dado que en la primera versión compuesta se usan los nodos $\{x_0, x_{\frac{1}{2}}, x_1, x_{\frac{3}{2}}, \dots, x_{n-\frac{1}{2}}, x_n\}$ con $h = \frac{b-a}{n} = x_i - x_{i-1}$, entonces es más cómodo denominarlos como $\{\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_{\tilde{n}}\}$ con $\tilde{n} = 2n$ y $\tilde{h} = \frac{b-a}{\tilde{n}}$. De este modo $\tilde{x}_0 = x_0$, $\tilde{x}_1 = x_{\frac{1}{2}}$, $\tilde{x}_2 = x_1$ y, en general, $\tilde{x}_i = x_{\frac{i}{2}}$ $i = 0, \dots, \tilde{n}$. Una vez hecha la conversión, se quitan todas las tildes (ya no hacen falta) y se asume que n es par. Esta es la versión más extendida de la fórmula compuesta de Simpson:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n) - \frac{(b-a)h^4}{180} f^{iv}(\xi)$$

4. Integración Romberg

Es un algoritmo de integración basado en la *extrapolación de Richardson*. Notemos por T_n la fórmula del trapecio compuesta para una división de $[a, b]$ en n intervalos. Se puede demostrar (Kincaid & Cheney 1994) que

$$\int_a^b f(x) dx = \underbrace{T_n}_{\substack{\text{Fórmula del Trapecio de} \\ n+1 \text{ nodos equiespaciados}}} + a_1 h^2 + a_2 h^4 + \cdots + a_m h^{2m} + \cdots \quad (9)$$

y por tanto, duplicando la densidad de nodos en el mismo intervalo,

$$\int_a^b f(x) dx = T_{2n} + a_1 \frac{h^2}{2^2} + a_2 \frac{h^4}{2^4} + \cdots + a_m \frac{h^{2m}}{2^{2m}} + \cdots \quad (10)$$

por lo que, combinando ambas expresiones adecuadamente, en particular multiplicando (10) por $\frac{4}{3}$ y (9) por $-\frac{1}{3}$ y sumando, se puede eliminar el término en h^2 :

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{4T_{2n} - T_n}{3} + b_2 h^4 + \cdots + b_m h^{2m} + \cdots \quad (11)$$

lo que implica un aumento del orden del término de error de 2 a 4 en la fórmula $\frac{4T_{2n} - T_n}{3}$. Esta misma idea puede aplicarse recursivamente a las nuevas fórmulas así diseñadas, para aumentar el orden de 4 a 6, de 6 a 8, etc.

La integración Romberg consiste en construir la tabla

$$\begin{array}{cccc} R(0, 0) & & & \\ R(1, 0) & R(1, 1) & & \\ R(2, 0) & R(2, 1) & R(2, 2) & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ R(N, 0) & R(N, 1) & \dots & \dots R(N, N) \end{array}$$

donde

$$\begin{aligned} R(j, 0) &= T_{2^j} \\ R(j, k) &= \frac{4^k R(j, k-1) - R(j-1, k-1)}{4^k - 1}, \quad j = 0, 1, \dots, N, \quad k = 1, \dots, j \end{aligned}$$

El interés práctico de la integración Romberg viene justificado por el siguiente

Teorema 4

Si $f \in \mathcal{C}[a, b]$ entonces $\lim_{N \rightarrow \infty} R(N, k) = \int_a^b f(x) dx \quad \forall k$.

La sucesión de aproximaciones que se suele tomar es la de la diagonal de la tabla $\{R(N, N)\}_{N=0}^{\infty}$ junto con un criterio de parada basado en que la diferencia absoluta entre los dos últimos términos sea menor que una tolerancia prefijada.

Ejemplo. Para calcular $\int_{-5}^5 \frac{1}{x^2 + 1} dx$.

N	$R(N, 0)$	$R(N, 1)$	$R(N, 2)$	$R(N, 3)$		
0	0.38461538					
1	5.19230769	6.79487179				
2	3.28580902	2.65030946	2.37400531			
3	2.78448937	2.61738282	2.61518771	2.61901600		
4	2.74611162	2.73331903	2.74104812	2.74304590	...	
5	2.74656094	2.74671072	2.74760350	2.74770755	...	
6	2.74674135	2.74680149	2.74680754	2.74679491	...	
7	2.74678649	2.74680153	2.74680153	2.74680144	...	
...						
N		$R(N, 4)$	$R(N, 5)$	$R(N, 6)$	$R(N, 7)$	
4	...	2.74353229				
5	...	2.74772583	2.74772993			
6	...	2.74679133	2.74679041	2.74679018		
7	...	2.74680146	2.74680147	2.74680148	2.74680148	

La construcción de la tabla de Romberg es menos laboriosa de lo que aparenta. Cada término se construye fácilmente a partir de dos términos de la columna a su izquierda. Para la primera columna no hay que calcular cada término separadamente como una fórmula del trapecio. En realidad

$$T_{2n} = \frac{1}{2} \left(T_n + h \sum_{i=0}^{n-1} f_{i+\frac{1}{2}} \right)$$

con lo cual la mitad de los valores de f vienen de la fórmula anterior, y sólo hay que añadir los valores en los nuevos nodos, intermedios entre los anteriores.

```
#####
#### integracion Romberg ####
#####

clear all; clc; more off;
function y = f(x) y = 1./(x.^2+1); endfunction
a = -5; b = 5; tol = 1e-4;
%
printf("N");
for k=0:5 printf("    R(N,%d)  ",k); endfor
printf("\n");
N = 1; n = 1; h = b-a;
R(1,1) = h/2*(f(a)+f(b));
eval = 2;
printf("%d %10.8f\n",0,R(1,1));
do
    x = linspace(a+h/2,b-h/2,n);
    R(N+1,1) = 1/2*(R(N,1)+h*sum(f(x)));
    N++; n = 2*n; h = h/2;
    printf("%d %10.8f",N-1,R(N,1));
    for k=2:N
        coef = 4^(k-1);
        R(N,k) = (coef*R(N,k-1)-R(N-1,k-1))/(coef-1);
        printf(" %10.8f",R(N,k));
    endfor
    printf("\n");
until abs(R(N-1,N-1)-R(N,N)) < tol;
```

Cuadro 1: Código Octave empleado para el ejemplo de cuadratura Romberg.

5. Integración adaptativa

Las fórmulas compuestas requieren el uso de nodos uniformemente espaciados. Para muchas situaciones esto no es un inconveniente, pero podría ser inapropiado cuando se trata de integrar una función en un intervalo que contiene regiones con variaciones funcionales grandes y regiones con variaciones funcionales pequeñas. Véase un ejemplo en la Figura 2. En tales casos sería más conveniente un tamaño de paso más pequeño en las zonas “rugosas” que en las zonas suaves, para de este modo repartir uniformemente el error de aproximación.

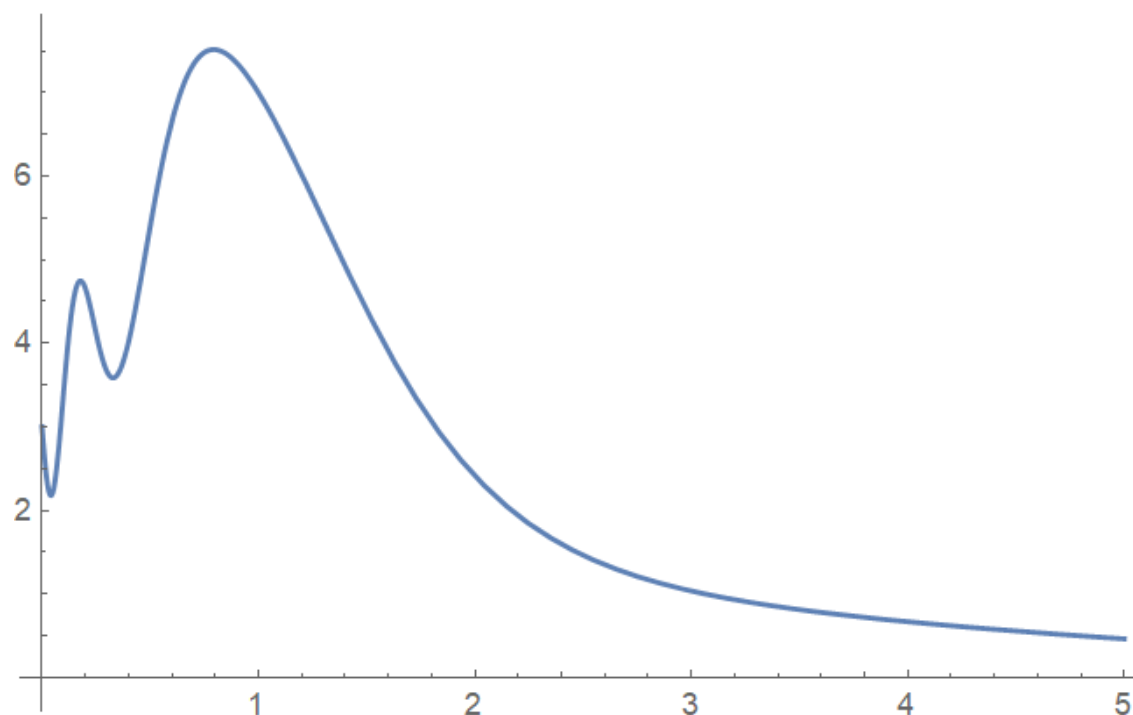


Figura 2: Gráfica de la función $f(x) = \frac{8}{x^2-2x+2} + \sin\left(\frac{3\pi}{x+0.5}\right) - 1$.

Una técnica apropiada es aquella que puede detectar de alguna forma la cantidad de variación funcional, la “rugosidad”, y adapte el tamaño del paso a los requerimientos cambiantes del problema. La *integración adaptativa* es un procedimiento que distribuye las evaluaciones del integrando con mayor densidad en las zonas que presentan más dificultad, ahorrando esfuerzo y tiempo de computación en otras zonas donde f se comporta de modo suave y el error es más bajo. En tal sentido el proceso adapta la estrategia de evaluaciones de f para obtener máxima precisión con mínimo esfuerzo. El método adaptativo que se discute a continuación está basado en la fórmula de Simpson, pero la técnica se puede modificar para usar otras fórmulas simples.

Sea $h = \frac{b-a}{2}$, $m = \frac{a+b}{2}$ y $S(a, b) = \frac{h}{3} (f(a) + 4f(m) + f(b))$. Entonces la fórmula de Simpson simple se puede escribir como

$$\int_a^b f(x) dx = S(a, b) - \frac{h^5}{90} f^{iv}(\mu).$$

Ahora, aplicando la misma regla a los intervalos $[a, m]$ y $[m, b]$ y sumando se tiene

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_a^m f(x) dx + \int_m^b f(x) dx \\ &= S(a, m) + S(m, b) - \frac{1}{32} \frac{h^5}{90} f^{iv}(\tilde{\mu}_1) - \frac{1}{32} \frac{h^5}{90} f^{iv}(\tilde{\mu}_2) \\ &= S(a, m) + S(m, b) - \frac{1}{16} \frac{h^5}{90} f^{iv}(\tilde{\mu}) \end{aligned}$$

donde μ es intermedio entre $\tilde{\mu}_1$ y $\tilde{\mu}_2$. Ahora, si se asume la hipótesis de que $f^{iv}(\mu) \approx f^{iv}(\tilde{\mu})$, es fácil deducir que

$$\frac{h^5}{90} f^{iv}(\mu) \approx \frac{16}{15} (S(a, b) - S(a, m) - S(m, b))$$

con lo que podemos conseguir una estimación computable del error en la forma

$$\left| \int_a^b f(x) dx - S(a, m) - S(m, b) \right| \approx \frac{1}{15} |S(a, b) - S(a, m) - S(m, b)|.$$

Por tanto, si fuera $|S(a, b) - S(a, m) - S(m, b)| < 15\varepsilon$, entonces sería (aproximadamente)

$$\left| \int_a^b f(x) dx - S(a, m) - S(m, b) \right| \tilde{<} \varepsilon$$

donde la tilde en $\tilde{<}$ indica que la desigualdad, aunque no esté rigurosamente garantizada, será tanto más fiable cuanto más ajustada sea la aproximación $f^{iv}(\mu) \approx f^{iv}(\tilde{\mu})$.

Algoritmo de integración adaptativa

- Si $|S(a, b) - S(a, m) - S(m, b)| < 15\varepsilon$ (o mejor $< 10\varepsilon$ para mayor seguridad), se acepta que $\int_a^b f(x) dx \approx S(a, m) + S(m, b)$ con error $< \varepsilon$;
- en caso contrario se aplica el algoritmo en $[a, m]$ y $[m, b]$ con error $\frac{\varepsilon}{2}$ en cada uno de los dos subintervalos.

Ejemplo. Se ha aplicado el algoritmo de cuadratura adaptativa para calcular $\int_0^3 \left(\sqrt{x} + \cos \left(\frac{5}{x^2+0.2} \right) \right) dx$ con una cota de error de 10^{-3} . La Figura 3 muestra los resultados. En la zona derecha del intervalo la función es bastante suave y no requiere gran densidad de evaluaciones, mientras que hacia la izquierda sucede lo contrario.

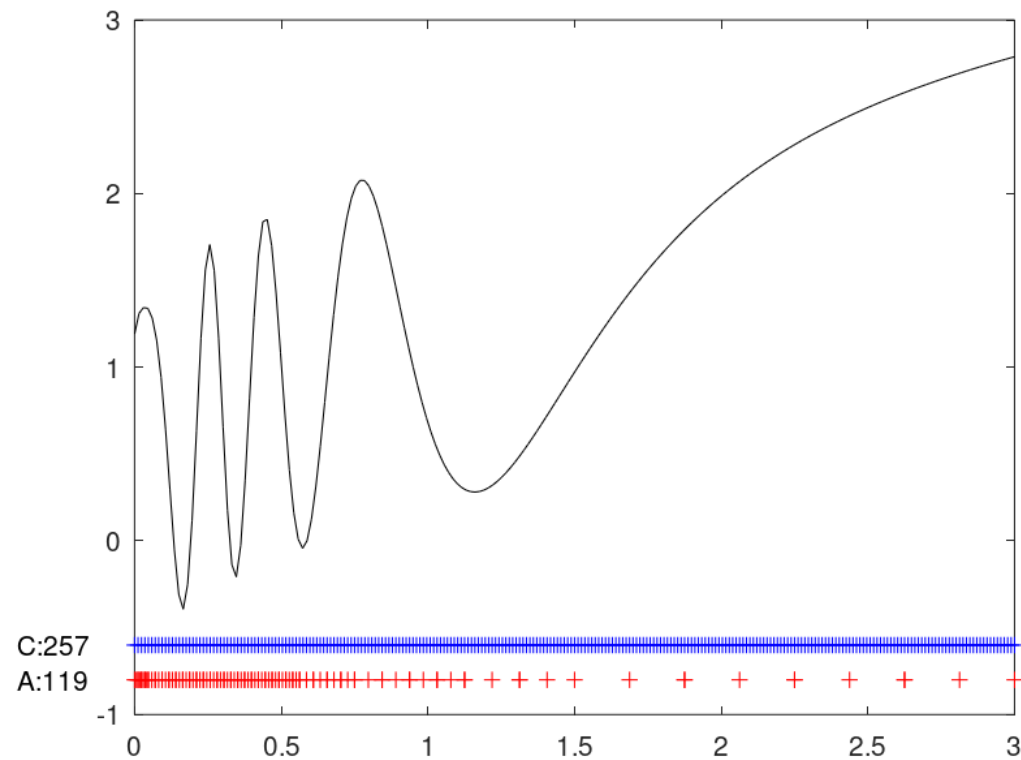


Figura 3: El cálculo de $\int_0^3 \left(\sqrt{x} + \cos \left(\frac{5}{x^2+0.2} \right) \right) dx$ con error $< 10^{-3}$ requirió 119 evaluaciones del integrando (en rojo) con el algoritmo de integración adaptativa, y 257 evaluaciones (en azul) con la fórmula compuesta de Simpson.

```
#####
#### integracion adaptativa Simpson ####
#####

clear all; clc; more off;
function y = f(x)
    y = sqrt(x)+cos(5./(x.^2+0.2))+0.2;
endfunction
a = 0; b = 3; tol = 1e-3;
function y = S(a,b)
    m = (a+b)/2; y = (b-a)/6*(f(a)+4*f(m)+f(b));
    global x n; x = [x m]; n++; % amplio la lista
endfunction
function y = intAdaptSimpson(a,b,e)
    m = (a+b)/2; s2 = S(a,m) + S(m,b);
    if abs(S(a,b) - s2) < 10*e y = s2; else
        y = intAdaptSimpson(a,m,e/2) + intAdaptSimpson(m,b,e/2);
    endif
endfunction
function y = SimpsonCompuesta(a,b,n)
    h = (b-a)/n; % n debe ser par
    xi = linspace(a+h,b-h,n/2); % los impares (x4)
    xp = linspace(a+2*h,b-2*h,n/2-1); % los pares (x2)
    y = h/3*(f(a)+4*sum(f(xi))+2*sum(f(xp))+f(b));
endfunction
%
global x n=2; % para acceder dentro de la funcion S
q = quad(@f,a,b,[1e-12 0]); % valor exacto para referencia
hf = figure(1); % para guardarla en archivo
x = linspace(a,b,200); plot(x,f(x),'k'); hold on;
```

Aproximar el valor de $\int_0^1 \sqrt{1-x} dx$ con error $< \epsilon = 10^{-3}$

Por fórmula de Simpson, $\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) - \frac{f^{(4)}(\xi)}{90} h^5$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{S(a,b)}$

$$S(0,1) = 0'6380711$$

$$S(0,0'5) = 0'430934$$

$$S(0'5,1) = 0'2255922$$

$$|S(0,1) - S(0,0'5) - S(0'5,1)| = 0'0184551 \neq 10\epsilon = 10^{-2} \quad \text{Por tanto, debemos seguir}$$

$$\int_0^1 \sqrt{1-x} dx = \int_0^{0'5} f(x) dx + \int_{0'5}^1 f(x) dx$$

$$S(0,0'25) = 0'23365$$

$$S(0'25,0'5) = 0'197308$$

$$|S(0,0'5) - S(0,0'25) - S(0'25,0'5)| = 24 \cdot 10^{-5} < \frac{10\epsilon}{2} = \frac{10^{-2}}{2} \quad \checkmark$$

$$\int_0^{0'5} f(x) dx \approx S(0,0'25) + S(0'25,0'5)$$

Dividimos por 2 porque tomamos la mitad del intervalo

$$S(0'5,0'75) = 0'152358$$

$$S(0'75,1) = 0'079758$$

$$S(0'5,1) =$$

$$|S(0'5,1) - S(0'5,0'75) - S(0'75,1)| = 0'065238 \neq \frac{10^{-2}}{2}$$

Habría que dividir otra vez cada trozo en 2.

$$S(0'5,0'625) = 0'082609$$

$$S(0'625,0'75) = 0'06976$$

$$|S(0'5,0'75) - S(0'5,0'625) - S(0'625,0'75)| = 11 \cdot 10^{-5} < \frac{10^{-2}}{4}$$

$$\int_0^1 \sqrt{1-x} dx = \int_0^{0'25} f(x) dx + \int_{0'25}^{0'5} f(x) dx + \int_{0'5}^{0'75} f(x) dx + \int_{0'75}^1 f(x) dx$$

\rightarrow Falta este

$$S(0,0'25) + S(0'25,0'5) + S(0'5,0'625) + S(0'625,0'75)$$

6. Cuadratura gaussiana

Se ha observado que 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 (6) o (7) con grado de exactitud superior a $2n + 1$.
2. Una fórmula (6) o (7) tiene grado de exactitud $n + q$, $q \geq 1$, si y solo si $L(x^j \Pi(x)) = 0$, $j = 0, \dots, q - 1$ y $L(x^q \Pi(x)) \neq 0$.

Demostración (sugerencia).

1. Si (6) tuviera grado de exactitud $2n + 2$ o superior, sería exacta para $f(x) = \Pi^2(x)$.
2. Los polinomios $\{1, x, x^2, \dots, x^n, \Pi(x), x\Pi(x), \dots, x^{q-1}\Pi(x)\}$ forman una base de \mathbb{P}_{n+q} .

□

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 , $i = 0, \dots, n$ para los cuales (6) tiene grado de exactitud máxima $2n + 1$. Además, todos ellos son reales y están en $]a, b[$.

Demostración. Escribiendo $\Pi(x)$ en la forma $\Pi(x) = x^{n+1} + c_1x^n + \dots + c_{n+1}$, al imponer $L(x^j\Pi(x)) = 0$, $j = 0, \dots, n$ se obtiene el sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{pmatrix} L(x^n) & L(x^{n-1}) & \dots & L(1) \\ L(x^{n+1}) & L(x^n) & \dots & L(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L(x^{2n}) & L(x^{2n-1}) & \dots & L(x^n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -L(x^{n+1}) \\ -L(x^{n+2}) \\ \vdots \\ -L(x^{2n+1}) \end{pmatrix} \quad (12)$$

el cual, si no fuera unisolvente, tendría que admitir una solución no trivial al sistema homogéneo, es decir, una combinación lineal nula de columnas

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

o bien, de forma abreviada,

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

y ahora combinando estas igualdades con los mismos coeficientes pero en orden inverso se tendría el absurdo

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

Por otro lado, sean $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_s$ las raíces 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 $L(q\Pi) \neq 0$. Sin embargo, si fuese $s < n + 1$ entonces se tendría $\text{gr}(q \cdot \Pi) \leq 2n + 1 \Rightarrow L(q \cdot \Pi) = 0$. \square

En la práctica nunca se resuelve el sistema no lineal dado en el teorema 5 por ser tarea laboriosa, sino más bien el sistema lineal (12) que nos proporcionará los coeficientes del desarrollo canónico de $\Pi(x)$, y entonces los nodos x_i se obtienen como las raíces de $\Pi(x) = 0$ (tarea que en general tampoco es trivial).

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): $R(f) \rightarrow 0$ cuando $n \rightarrow \infty$.

Y 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. Vamos a calcular la fórmula gaussiana con dos nodos

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

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

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \Pi(x) dx &= 0 = \frac{2}{3} + 2c \\ \int_{-1}^1 x \Pi(x) dx &= 0 = \frac{2}{3}b \end{aligned}$$

de donde tenemos que $b = 0$ y $c = -\frac{1}{3}$. Por tanto $\Pi(x) = x^2 - \frac{1}{3}$ y los nodos de la fórmula son sus raíces $x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$, $x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$. A partir de aquí se calculan los pesos $\alpha_0 = \alpha_1 = 1$ por cualquiera de las vías posibles, y el término de error será

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

con lo cual, 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.

Aproximar $\int_0^1 w(x) f(x) dx \hat{=} d_0 f(x_0) + d_1 f(x_1)$, $w(x) = x$

Calcular d_0, d_1, x_0, x_1 para tener máxima precisión, dar error y estimar para $f(x) = e^{x^3}$

$$\Pi(x) = (x - x_0)(x - x_1) = x^2 + c_1 x + c_2$$

$$\left. \begin{aligned} \int_0^1 x \Pi(x) dx &= \int_0^1 x^3 + c_1 x^2 + c_2 x dx = \frac{1}{4} + \frac{c_1}{3} + \frac{c_2}{2} = 0 \\ \int_0^1 \Pi(x) dx &= \int_0^1 x^2 + c_1 x + c_2 dx = \frac{1}{3} + \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{1} = 0 \end{aligned} \right\}$$

$$c_1 = -\frac{6}{5}, c_2 = \frac{3}{10} \Rightarrow$$

$$\Pi(x) = x^2 - \frac{6}{5}x + \frac{3}{10} = 0 \Rightarrow x = \left\{ \begin{aligned} \frac{6 + \sqrt{6}}{10} &= x_1 \\ \frac{6 - \sqrt{6}}{10} &= x_0 \end{aligned} \right.$$

- Imponemos exactitud en \mathbb{P}_1 :

$$\left. \begin{aligned} 1 &\rightarrow \frac{1}{2} = d_0 + d_1 \\ x &\rightarrow \frac{1}{3} = d_0 \frac{6 - \sqrt{6}}{10} + d_1 \frac{6 + \sqrt{6}}{10} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{aligned} d_0 &= 0.181958 \\ d_1 &= 0.318041 \end{aligned}$$

- calculamos error:

$$R(f) = \frac{1}{4!} f^{(4)}(\xi) \int_0^1 x \Pi(x)^2 dx = \frac{f^{(4)}(\xi)}{14400}, \xi \in [0, 1]$$

$$\text{Por tanto, } \int_0^1 x f(x) dx = d_0 f\left(\frac{6 - \sqrt{6}}{10}\right) + d_1 f\left(\frac{6 + \sqrt{6}}{10}\right) + \frac{f^{(4)}(\xi)}{14400}, \xi \in [0, 1]$$

Si $f(x) = e^{x^3}$,

$$\int_0^1 x e^{x^3} dx = d_0 f\left(\frac{6 - \sqrt{6}}{10}\right) + d_1 f\left(\frac{6 + \sqrt{6}}{10}\right) \approx 0.1771677$$

Aunque la fórmula es exacta, se genera cierto error por el truncamiento de d_0, d_1 .

6.1. Fórmulas gaussianas y polinomios ortogonales

Del teorema 5 se deduce que el polinomio $\Pi(x)$ ha de ser ortogonal a todo el espacio \mathbb{P}_{q-1} respecto del producto escalar

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

Así, también se puede obtener $\Pi(x)$ usando la ley de recurrencia a tres términos de los polinomios ortogonales de grados sucesivos,

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

donde

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

que se deduce del procedimiento de ortogonalización de Gram-Schmidt para la construcción de bases ortogonales.

6.1.1. Fórmulas gaussianas clásicas

Fórmula	$[a, b]$	$\omega(x)$	Recurrencia
Gauss-Legendre	$[-1, 1]$	1	$P_0 = 1, P_1 = x,$ $P_{n+1} = \frac{2n+1}{n+1}xP_n - \frac{n}{n+1}P_{n-1}$
Gauss-Chebyshev	$[-1, 1]$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	$T_0 = 1, T_1 = x,$ $T_{n+1} = 2xT_n(x) - T_{n-1}$

Ejemplo de fórmula de Gauss-Legendre:

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

Ejemplo de fórmula de Gauss-Chebyshev:

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

Ejercicio: Comprobar todo.