

Traballo Fin de Grao

# Cuadratura de alta precisión

Juan Couselo Silveira

2024/2025

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA



GRAO DE MATEMÁTICAS

Traballo Fin de Grao

# Cuadratura de alta precisión

Juan Couso Silveira

Xullo, 2025

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA



# Traballo proposto

|  |
|--|
| <b>Área de Coñecemento: Matemática aplicada</b>  |
| <b>Título: Cuadratura de alta precisión</b>  |
| <b>Breve descripción do contido</b>  |
| Estudiaranse fórmulas de cuadratura (ou integración numérica) de alta precisión. Os temas a tratar son: <ol style="list-style-type: none"><li>1. Cuadratura gaussiana</li><li>2. Método de Romberg</li><li>3. Fórmulas de Newton-Cotes compostas con correccións extremas derivadas da fórmula de Euler-Maclaurin e das fórmulas de Uspensky</li></ol> |
| <b>Recomendacións</b>  |
|  |
| <b>Outras observacións</b>   |
|  |



# Índice

|  |             |
|--|-------------|
| <b>Resumo</b>  | <b>VIII</b> |
| <b>Introdución</b>   | <b>XI</b>   |
| <b>1. Preliminares</b>   | <b>1</b>    |
| 1.1. Fórmula de cuadratura . . . . .   | 1           |
| 1.2. Fórmulas de tipo interpolatorio polinómico . . . . .  | 2           |
| <b>2. Fórmulas de Gauss</b>  | <b>5</b>    |
| 2.1. Polinomios ortogonais . . . . .   | 6           |
| 2.2. Fórmulas de Gauss . . . . .   | 9           |
| 2.3. Fórmulas de Gauss en $(-1, 1)$ . . . . .  | 16          |
| 2.3.1. Programación da fórmula de Gauss no intervalo $(-1, 1)$ . . . . .                               | 20          |
| 2.4. Fórmulas de Gauss en $(a, b)$ . . . . .   | 22          |
| 2.4.1. Programación da fórmula de Gauss no intervalo $(a, b)$ . . . . .                                | 26          |
| <b>3. Método de Romberg</b>  | <b>29</b>   |
| 3.1. Extrapolación de Richardson . . . . .   | 29          |
| 3.1.1. Obtención dunha aproximación de orde $n$ : Descripción da extrapolación de Richardson . . . . . | 30          |
| 3.1.2. Implementación da extrapolación de Richardson . . . . .   | 32          |
| 3.2. Polinomios e números de Bernoulli . . . . .   | 33          |

---

|  |           |
|--|-----------|
| 3.3. Fórmula de Euler-Maclaurin . . . . .  | 35        |
| 3.4. Método de Romberg . . . . .   | 38        |
| 3.5. Programación do método de Romberg . . . . .                                 | 39        |
| <b>4. Algunhas fórmulas de Newton-Cotes compostas con correccións extremas</b>   | <b>43</b> |
| 4.1. Correccións extremas na regra do trapecio composta . . . . .                | 43        |
| 4.1.1. Implementación das correccións extremas para a regra do trapecio composta | 45        |
| 4.2. Correccións extremas na regra de Simpson composta . . . . .                 | 46        |
| 4.2.1. Regra de Simpson . . . . .  | 47        |
| 4.2.2. Correccións extremas . . . . .  | 49        |
| 4.2.3. Programación das correccións extremas para a regra de Simpson composta    | 51        |
| <b>A. Programación dos métodos de cuadratura</b>                                 | <b>53</b> |
| <b>Bibliografía</b>  | <b>67</b> |



---

## Resumo

Neste traballo abordamos o estudo de métodos numéricos para o cálculo aproximado da integral definida a través de fórmulas de cuadratura, técnicas fundamentais cando descoñecemos o valor da integral. Centrémonos nas fórmulas de tipo interpolatorio polinómico que aproximan o valor real a partir da integral dun polinomio de interpolación. Estudamos en profundidade tres métodos principais de cuadratura. Primeiro as fórmulas de Gauss, caracterizadas pola súa alta precisión empregando poucos nodos. Despois, estudamos o método de Romberg, que combina a regra do trapecio composta coa extrapolación de Richardson. E por último, o uso de correccións extremas para as regras de trapecio e Simpson compostas. Para cada método exploraremos a súa formulación teórica, o comportamento do erro e os requisitos para a exactitude dos métodos. Ademais, aportaremos exemplos e táboas nas que representen a variación do erro para cada método.

## Abstract

In this work, we address the study of numerical methods for the approximate calculation of definite integrals through quadrature formulas, fundamental techniques when the exact value of the integral is unknown. Specifically, we focus on polynomial interpolatory formulas, which approximate the true value by integrating an interpolation polynomial. We examine in depth three main quadrature methods. First of all, the Gauss formulas, known for their high accuracy using a few nodes. Then, the Romberg method, which combines the composite trapezoidal rule with Richardson extrapolation. Finally, we study the use of endpoint corrections for the composite trapezoidal and Simpson's rules. For each method, we explore its theoretical formulation, error behavior, and the conditions required to achieve accuracy. Additionally, we provide examples and tables illustrating the variation of the approximation error for each method.



# Introdución

En ocasións é probable atopar certas integrais definidas cuxo cálculo explícito resulta moi complexo. Isto pode deberse a diferentes motivos como poden ser a dificultade de obter as primitivas da función ou o descoñecemento do valor da función en todo o intervalo de integración. Para resolver estes problemas, defínense os métodos de cuadratura, que en análise numérico trátanse de aproximacións da integral mediante a combinación lineal do valor da función en puntos concretos (nodos).

Neste traballo recolleemos distintos métodos de cuadratura, centrándonos nas fórmulas de tipo interpolatorio polinómica, naquelas que aproximan as integrais mediante a integración dun polinomio interpolador. Ademais, presentamos métodos de cuadratura cunha precisión moi alta, é dicir, fórmulas que empregando a menor cantidade de nodos posibles sexan capaces de alcanzar unha unha orde de converxencia elevada. Sumado ao estudo teórico dos métodos, tamén implementamos os métodos e incluímos representacións gráficas sobre o funcionamento das fórmulas, así como táboas de variación do erro dependendo do número de nodos.

No primeiro capítulo, introducimos nocións básicas e xerais para todos os métodos de cuadratura.

No segundo capítulo estudamos as fórmulas de Gauss. A súa característica principal é que, usando  $n$  nodos son exactas para calcular a integral de polinomios de grao menor ou igual que  $2n - 1$ . Ademais, tamén conta cunha introdución aos polinomios ortogonais debido a súa relevancia para o cálculo das fórmulas.

Posteriormente, no terceiro capítulo introducimos o método de Romberg. Este emprega combinacións lineais de aproximacións dadas pola regra do trapecio composta e axúdase da extrapolación de Richardson, tamén definida neste capítulo, para dar os resultados finais.

Por último, no capítulo final estudamos as regras do trapecio e Simpson compostas con correccións extremas. Estas son capaces de dar erros moi baixos se coñecemos o valor das derivadas da función nos extremos do intervalo.

---

# Capítulo 1

## Preliminares

Comezamos introducindo unha serie de conceptos previos que serán fundamentais para o desenvolvemento dos métodos de aproximación de integrais nun intervalo limitado. Podemos ver as definicións en profundidade en [1]

### 1.1. Fórmula de cuadratura

O noso obxectivo é estudar métodos para calcular aproximacións de integrais definidas

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx, \quad (1.1)$$

sendo  $(a, b)$  un intervalo limitado e non baleiro e  $f$  unha función Riemann integrable en  $(a, b)$ .

**Definición 1.1.** As **fórmulas de cuadratura** son métodos numéricos que permiten aproximar o valor dunha integral definida mediante unha combinación lineal de valores da función que se quere integrar. Denotaremos estas fórmulas como

$$Q_n(f) = \sum_{i=1}^n A_i f(x_i), \quad (1.2)$$

onde os puntos  $x_i$  denomínanse **nodos** e serán os puntos, diferentes entre si, nos cales se avaliará a función, e os  $A_i$  son os **coeficientes** ou **pesos**, que determinan o efecto da avaliación da función en cada nodo no cálculo da aproximación. Ademais, imos supoñer que os nodos  $x_1, \dots, x_n$  están ordenados de menor a maior.

A continuación, definimos o erro e a orde dunha fórmula de cuadratura.

**Definición 1.2.** Para unha fórmula de  $n$  nodos, definimos o **erro de cuadratura**, e denotámolo por  $E_n(f)$ , como a diferenza entre o valor da integral e a aproximación estimada pola fórmula

de cuadratura correspondente. En consecuencia,

$$I(f) = Q_n(f) + E_n(f). \quad (1.3)$$

**Definición 1.3.** Unha fórmula de cuadratura de  $n$  nodos é **polo menos de orde**  $m \in \mathbb{N}$  se cumpre que

$$E_n(x^k) = 0 \quad \text{para } k = 0, 1, \dots, m. \quad (1.4)$$

Ademais, unha fórmula de cuadratura será de **orde**  $m \in \mathbb{N}$  se é polo menos de orde  $m$  e

$$E_n(x^{m+1}) \neq 0. \quad (1.5)$$

## 1.2. Fórmulas de tipo interpolatorio polinómico

Para os distintos métodos que veremos, é necesario introducir certas definicións sobre os polinomios, xa que serán clave para caracterizar ditos métodos.

**Definición 1.4.** Un **polinomio con coeficientes reais** é unha expresión que segue a forma

$$p(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n, \quad n \in \mathbb{N}, a_i \in \mathbb{R}. \quad (1.6)$$

Se  $a_n \neq 0$ , o polinomio  $p$  ten **gra**o  $n$ , e dicimos que  $a_n$  é o **coeficiente principal** de  $p$ . Un **polinomio mónico** é aquel cuxo coeficiente principal vale 1. O espazo vectorial dos **polinomios de grao menor ou igual a  $n$**  denotarémolo como  $\mathbb{P}_n$ . Ademais, o espazo vectorial dos polinomios con coeficientes reais denótase como  $\mathbb{P}$ .

**Definición 1.5.** Diremos que un polinomio  $p$  **interpola** a unha función  $f$  nos puntos  $x_1, \dots, x_n$  se

$$p(x_i) = f(x_i) \quad \forall i = 1, \dots, n. \quad (1.7)$$

**Definición 1.6.** Dados unha función  $f$  e  $n$  puntos distintos  $x_1, \dots, x_n$ , existe un único polinomio  $p \in \mathbb{P}_{n-1}$  que interpola a  $f$  neses puntos. Dito polinomio denomínase **polinomio de interpolación de Lagrange** relativo a  $f$  e aos puntos  $x_1, \dots, x_n$ .

**Definición 1.7.** Unha fórmula de cuadratura  $Q_n(f)$  é de tipo **interpolatorio polinómico** se  $Q_n(f) = \int_a^b p(x) dx$ , sendo  $p$  o polinomio de interpolación de Lagrange relativo a  $f$  e aos nodos  $x_1, \dots, x_n$ . Efectivamente  $\int_a^b p(x) dx$  pode escribirse como  $\sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$ , para certos pesos  $A_i$ :

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p(x) dx = A_1 f(x_1) + \dots + A_n f(x_n). \quad (1.8)$$

**Definición 1.8.** Definimos os **polinomios fundamentais de Lagrange asociados aos puntos**  $x_1, \dots, x_n$ , como os únicos polinomios de grao  $n - 1$  que, nos nodos  $x_1, \dots, x_n$ , verifican a seguinte propiedade

$$l_k(x_i) = \delta_{ik}, \quad i = 1, \dots, n, \quad k = 1, \dots, n, \quad (1.9)$$

sendo  $\delta_{ik}$  a delta de Kronecker.

*Observación 1.9.* É fácil ver que os polinomios fundamentais de Lagrange seguen a fórmula

$$l_k(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j}, \quad k = 1, \dots, n. \quad (1.10)$$

**Definición 1.10.** Coa observación anterior é claro que o **polinomio de interpolación de Lagrange** relativo aos nodos  $x_1, \dots, x_n$  e á función  $f$  vén dado pola expresión

$$p(x) = \sum_{k=1}^n f(x_k) l_k(x). \quad (1.11)$$

Entón

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{k=1}^n \left( \int_a^b l_k(x) dx \right) f(x_k), \quad (1.12)$$

de onde

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{k=1}^n A_k f(x_k), \quad (1.13)$$

se  $A_k = \int_a^b l_k(x) dx$ .

**Teorema 1.11** (de caracterización das fórmulas de tipo interpolatorio polinómico). *Unha fórmula de cuadratura de  $n$  nodos é de tipo interpolatorio polinómico, se, e só se, é polo menos de orde  $n - 1$ .*

**Exemplo 1.12.** Un exemplo de fórmula de cuadratura de tipo interpolatorio polinómico é a fórmula do **trapezio simple**. Sexa  $(a, b)$  un intervalo limitado non baleiro, obtemos unha aproximación da integral mediante a seguinte combinación lineal:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} (f(a) + f(b)), \quad (1.14)$$

onde  $h$  é a diferenza entre  $b$  e  $a$ . No caso de que  $f(b), f(a) > 0$  estaríamos calculando a área do trapezio definido polos vértices  $(a, 0)$ ,  $(a, f(a))$ ,  $(b, 0)$  e  $(b, f(b))$ . A partir de fórmulas simples como esta xorden as fórmulas compostas, que son basicamente a aplicación das fórmulas simples en pequenos subintervalos. Seguindo cos trapezios, podemos dar a definición da regra do **trapezio composta**. Sexan  $x_1, \dots, x_n$ ,  $n$  puntos equidistantes en  $(a, b)$ , con  $x_1 = a$  e  $x_n = b$ . Os devanditos puntos dividen  $(a, b)$  en  $m = n - 1$  subintervalos de igual lonxitude  $h = (b - a)/(n - 1)$ . Se

aplicamos a fórmula do trapecio simple en cada subintervalo obtemos a fórmula do **trapecio composta**:

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \left[ \frac{1}{2}(f(a) + f(b)) + \sum_{k=2}^{n-1} f(x_k) \right]. \quad (1.15)$$

**Definición 1.13.** Diremos que unha fórmula de cuadratura composta ten **orde de converxencia**  $p \in \mathbb{N}$  se a expresión do seu erro é unha  $\mathcal{O}(h^p)$ , é dicir, se existe unha constante  $C > 0$ , independente de  $h$ , tal que o erro cometido teña a seguinte acotación

$$|E(h)| \leq Ch^p, \quad (1.16)$$

para  $h$  suficientemente pequena, sendo  $h$  o tamaño dos subintervalos da partición. Neste caso,  $E(h)$  representa o erro cometido ao aproximar a integral mediante unha fórmula de cuadratura composta utilizando un paso  $h$ .

## Capítulo 2

# Fórmulas de Gauss

Como xa vimos no Teorema 1.11, sabemos que as fórmulas de tipo interpolatorio polinómico son polo menos de orde  $n - 1$ . Estudaremos agora o chamado problema de Gauss, o cal cuestiona o xeito de escoller os nodos  $x_1, \dots, x_n$  para que a fórmula de tipo interpolatorio polinómico correspondente sexa exacta en  $\mathbb{P}_m$  con  $m > n - 1$ . A descripción detallada destas fórmulas pódese consultar no segundo capítulo de Davis e Rabinowitz [9].

Primeiro, vexamos un resultado que establece unha cota superior para a orde que se pode alcanzar cunha fórmula de  $n$  nodos.

**Teorema 2.1.** *Unha fórmula de cuadratura de  $n$  nodos non pode ser de orde superior a  $2n - 1$ .*

*Demostración.* Consideremos a fórmula de cuadratura de  $n$  nodos:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i). \quad (2.1)$$

Para demostrar que non ten unha orde de exactitude superior a  $2n - 1$  imos probar que existe un polinomio de grao  $2n$  para o cal a fórmula non é exacta. Para iso, buscamos un polinomio de grao  $2n$  que sexa non negativo e tal que os nodos da fórmula de cuadratura sexan as súas únicas raíces:

$$p(x) = \left( \prod_{i=1}^n (x - x_i) \right)^2. \quad (2.2)$$

Como se pode comprobar con facilidade, este polinomio é de grao  $2n$ , e ademais é non negativo e non nulo, polo que:

$$\int_a^b p(x) dx > 0. \quad (2.3)$$

Por outra banda,

$$p(x_i) = 0 \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} \implies \sum_{i=1}^n A_i p(x_i) = 0. \quad (2.4)$$

Polo tanto, das ecuacións (2.3) e (2.4) dedúcese que o erro de cuadratura ao aproximar  $p$  é distinto de cero e, en consecuencia, a fórmula non é exacta para un polinomio de grao  $2n$ , obtendo así o resultado que buscábamos.  $\square$

## 2.1. Polinomios ortogonais

Para deducir as fórmulas de cuadratura de Gauss, necesitamos introducir conceptos previos sobre os polinomios ortogonais, xa que estas fórmulas fundamentan o seu comportamento nalgunhas propiedades destes polinomios. Como veremos, os nodos das fórmulas de cuadratura de Gauss coinciden coas raíces dos polinomios ortogonais no intervalo de integración. A teoría sobre os polinomios ortogonais pódese consultar na obra de Szegő [4].

**Definición 2.2.** Sexan  $p, q$  dous polinomios, definimos o **produto escalar** en  $\mathbb{P}$ , e denotámolo por  $(p, q)$ , como

$$(p, q) = \int_a^b p(x)q(x) dx \in \mathbb{R}. \quad (2.5)$$

Pódese demostrar que, en efecto, esta aplicación define un produto escalar en  $\mathbb{P}$ . Polo tanto, a **norma** asociada será:

$$\|p\| = \sqrt{(p, p)} = \left( \int_a^b p(x)^2 dx \right)^{1/2} \in \mathbb{R}. \quad (2.6)$$

**Definición 2.3.** Sexan  $p, q \in \mathbb{P}$ , dise que  $p$  e  $q$  son **ortogonais** se

$$(p, q) = 0, \quad (2.7)$$

e denótase por  $p \perp q$ .

**Definición 2.4.** Sexa  $X$  un subconxunto non baleiro de  $\mathbb{P}$ . Dise que un polinomio  $p \in \mathbb{P}$  é **ortogonal a  $X$**  se  $p \perp q \forall q \in X$ , e denótase como  $p \perp X$ .

**Definición 2.5.** Dise que un conxunto non baleiro  $X$  de  $\mathbb{P}$  é un **conxunto ortogonal** se

$$p \perp q \quad \forall p, q \in X, \quad p \neq q. \quad (2.8)$$

Se ademais se cumpre que

$$\|p\| = 1 \quad \forall p \in X, \quad (2.9)$$

dise que  $X$  é un conxunto **ortonormal**.

**Definición 2.6.** Unha sucesión de polinomios  $\{\psi_n\}_{n=0}^{\infty}$  dise que é unha **sucesión de polinomios ortogonais** se a sucesión, como conxunto, é un conxunto ortogonal.

**Teorema 2.7** (Método de ortogonalización de Gram-Schmidt). *Sexa  $V$  un espazo vectorial euclidiano. Se  $u_1, \dots, u_n \in V$  son vectores linealmente independentes, entón os vectores que se obtéñen do seguinte xeito:*

$$v_1 = u_1, \quad (2.10)$$

$$v_i = u_i - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{(u_i, v_j)}{(v_j, v_j)} v_j \quad \forall i \in \{2, \dots, n\}, \quad (2.11)$$

*son linealmente independentes, ortogonais dous a dous e xeran o mesmo subespazo que  $u_1, \dots, u_n$ .*

A demostración recóllese en [3], na páxina 361.

**Teorema 2.8.** *Existe polo menos unha sucesión de polinomios ortogonais  $\{\psi_n\}_{n=0}^{\infty}$  tal que  $\psi_0 \neq 0$  e  $\text{grao}(\psi_n) = n \forall n$ .*

*Demostración.* A demostración deste resultado é consecuencia de aplicar o método de ortogonalización de Gram-Schmidt, definido no Teorema 2.7, ao espazo vectorial  $\mathbb{P}$ . Eliximos como base do espazo vectorial o conxunto  $\{1, x, x^2, \dots\}$ . Mediante o proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt obtemos un conxunto de elementos  $\{\psi_0, \psi_1, \dots\}$ , ortogonais dous a dous respecto ao produto escalar dado na definición 2.2. Ademais, cumpre que  $\psi_0 \neq 0$  posto que o primeiro elemento do proceso non se modifica. Tamén cumpre que  $\text{grao}(\psi_n) = n$  xa que no proceso de Gram-Schmidt só se restan combinacións lineais de polinomios de grao menor a  $n$  en cada  $\psi_n$

$$v_n = \psi_i - \sum_{j=1}^{n-1} \frac{(\psi_n, v_j)}{(v_j, v_j)} v_j. \quad (2.12)$$

Polo tanto, obtense unha sucesión infinita de polinomios ortogonais que cumpren o enunciado no teorema.  $\square$

**Definición 2.9.** Sexa  $\{\psi_n\}_{n=0}^{\infty}$  unha sucesión de polinomios ortogonais tal que  $\psi_0 \neq 0$  e  $\text{grao}(\psi_n) = n$  para todo  $n \in \mathbb{N}$ . Chamarémoslle **polinomio ortogonal de grao  $n$**  a cada  $\psi_n$  pertencente a esa sucesión.

Tendo en conta o Teorema 2.8, son evidentes as seguintes dúas observacións:

*Observación 2.10.* O conxunto  $\{\psi_0, \dots, \psi_n\}$  é unha base ortogonal de  $\mathbb{P}_n$  para cada  $n \in \mathbb{N}$ .

*Observación 2.11.* Coa anterior observación en mente, é claro que o conxunto  $\{\psi_0/\|\psi_0\|, \dots, \psi_n/\|\psi_n\|\}$  é unha base ortonormal de  $\mathbb{P}_n$  para cada  $n \in \mathbb{N}$ .

**Teorema 2.12.** *Sexa  $n \in \mathbb{N}$  e  $S = \{p \in \mathbb{P}_n : p \perp \mathbb{P}_{n-1}\}$  o ortogonal de  $\mathbb{P}_{n-1}$  en  $\mathbb{P}_n$ . Entón, se  $p \in S$ , ou ben  $p \equiv 0$ , ou ben  $\text{grao}(p) = n$ . Ademais, cúmprese que  $\dim(S) = 1$ .*

*Demostración.* O caso  $p \equiv 0$  é evidente. Sexa entón  $p \in S \setminus \{0\}$  e vexamos que  $\text{grao}(p) = n$ . Por redución ao absurdo, supoñamos que  $p \in \mathbb{P}_{n-1}$ . Como  $p \in S$ , debe cumprir que  $p \perp p$ , o que implica que  $\|p\| = 0$ , que contradí o feito de que  $p \neq 0$ .

É claro que  $S$  é un subespazo vectorial de  $\mathbb{P}_n$ , vexamos que  $\dim(S) = 1$ . Para iso, escollamos dous polinomios arbitrarios  $p, q \in S \setminus \{0\}$ . Como ambos polinomios teñen que ser de grao  $n$  existe un escalar  $K \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$  tal que o polinomio  $f = p - Kq \in \mathbb{P}_{n-1}$ . Por definición de subespazo, o polinomio  $f$  ten que pertencer a  $S$ . Como non é de grao  $n$ , debe ser  $f \equiv 0$ , o que implica que  $p = Kq$ . Queda entón demostrado que  $\dim(S) = 1$ .  $\square$

Como consecuencia deste teorema deducimos o seguinte resultado.

**Teorema 2.13.** *Se  $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$  e  $\{\phi_n\}_{n=0}^\infty$  son dúas sucesións coma as do Teorema 2.8, entón, para cada  $n \in \mathbb{N}$ , existe  $k_n \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$  de xeito que  $\psi_n = k_n \phi_n$ .*

Directamente deste teorema podemos deducir unha observación de gran interese sobre a unicidade das raíces dos polinomios ortogonais.

*Observación 2.14.* As raíces dun polinomio ortogonal de grao  $n$  están unicamente determinadas. Isto significa que se  $\psi_n$  e  $\phi_n$  son dous polinomios ortogonais de grao  $n$  entón teñen as mesmas raíces, xa que do teorema anterior dedúcese que  $\psi_n = k_n \phi_n$  con  $k_n \neq 0$ .

**Corolario 2.15.** *Existe unha única sucesión  $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$  de polinomios mónicos ortogonais de xeito que  $\text{grao}(\psi_n) = n \forall n$ .*

**Corolario 2.16.** *Se existe unha sucesión  $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$  de polinomios ortogonais estandarizados, é dicir, que cumpren que  $\psi_n(1) = 1 \forall n$ , de xeito que  $\text{grao}(\psi_n) = n \forall n$ , entón esta sucesión é única.*

*Observación 2.17.* A sucesión definida no corolario anterior só existe se para unha sucesión como a do Teorema 2.8 se cumpre que  $\psi_n(1) \neq 0$  para todo  $n$ .

Estamos moi preto de construír as fórmulas de Gauss. Para iso, é fundamental entender mellor as propiedades dos polinomios ortogonais, en particular, as súas raíces. O seguinte resultado proporciónanos información clave sobre a natureza destas raíces e a súa localización no intervalo de integración. Este paso é esencial, xa que as raíces dos polinomios ortogonais de grao  $n$  serán precisamente os nodos que utilizaremos na fórmula de cuadratura de Gauss.

**Teorema 2.18.** *Sexa  $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$  unha sucesión nas condicións descritas no Teorema 2.8. Para cada  $n \in \mathbb{N}$ , as raíces do polinomio ortogonal de grao  $n$ ,  $\psi_n$ , son reais, distintas e están situadas no intervalo  $(a, b)$ .*

*Demostración.* Sexa  $\psi_n$  o polinomio ortogonal de grao  $n$  e definamos  $R$  como o conxunto das raíces de multiplicidade impar de  $\psi_n$ ,  $R = \{r \in (a, b) : r \text{ é raíz de multiplicidade impar de } \psi_n\}$ .  $R$  non pode ser baleiro, xa que por ser os polinomios funcións continuas implicaría que  $\psi_n$  non cambia de signo en  $(a, b)$  e, polo tanto,

$$\int_a^b \psi_n(x) dx \neq 0, \quad (2.13)$$

que contradí o feito de que  $\psi_n \perp \mathbb{P}_{n-1}$ , xa que  $1 \in \mathbb{P}_{n-1}$ . Vexamos que ademais  $R$  é finito e o seu cardinal é  $n$ . Denotamos o seu cardinal por  $l \in \mathbb{N}$ ,  $R = \{x_1, \dots, x_l\}$ . Necesariamente pola definición do conxunto  $R$  e por ser un polinomio de grao  $n$  non pode ter máis de  $n$  raíces,  $l \leq n$ . Entón, só necesitamos ver que  $l$  non pode ser menor que  $n$ . Sexa

$$q(x) = \prod_{i=1}^l (x - x_i) \implies \text{grao}(q) = l. \quad (2.14)$$

Como  $\psi_n(x)q(x)$  é un polinomio non nulo que non cambia de signo en  $(a, b)$ , pois é un produto de cadrados debido a que ambos teñen as mesmas raíces, tense que

$$\int_a^b \psi_n(x)q(x) dx \neq 0. \quad (2.15)$$

Polo tanto  $l = n$ , xa que, se  $l$  fose menor a  $n$ , necesariamente, pola definición da sucesión  $\{\psi_n\}_{n=0}^{\infty}$  e porque  $\psi_n \perp \mathbb{P}_{n-1}$  teríase que  $q \perp \psi_n$  o que contradí a ecuación (2.15).  $\square$

## 2.2. Fórmulas de Gauss

Ao longo deste traballo, o termo *fórmulas de Gauss* equivale a *fórmula de Gauss-Legendre*. Nesta sección daremos resposta ao **problema de Gauss**, xa que indicaremos a forma de elixir os  $n$  nodos para que a fórmula de cuadratura sexa exacta en  $\mathbb{P}_{2n-1}$ . Aplicaremos os resultados introducidos na sección anterior para demostrar o seguinte teorema que resolve o problema.

**Teorema 2.19** (Caracterización dos nodos das fórmulas de Gauss). *Sexa  $\{\psi_n\}_{n=0}^{\infty}$  unha sucesión definida como no Teorema 2.8. Entón a fórmula de cuadratura:*

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i), \quad (2.16)$$

sendo

$$A_i = \int_a^b l_i(x) dx, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.17)$$

con  $l_i$  o polinomio fundamental de Lagrange, é exacta en  $\mathbb{P}_{2n-1}$ , se, e só se,  $x_1, \dots, x_n$  son as raíces do polinomio ortogonal de grao  $n$ ,  $\psi_n$ .

*Demostración.* ( $\implies$ ) Para a primeira implicación supoñemos que a fórmula é exacta en  $\mathbb{P}_{2n-1}$ , é dicir:

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{i=1}^n A_i p(x_i) \quad \forall p \in \mathbb{P}_{2n-1}. \quad (2.18)$$

Queremos ver que

$$\prod_{i=1}^n (x - x_i) \perp \mathbb{P}_{n-1}, \quad (2.19)$$

sendo os  $x_i$  as raíces do polinomio  $\psi_n$ . Recordemos que se  $q_1$  e  $q_2$  son dous polinomios de grao  $n$  e ortogonais a  $\mathbb{P}_{n-1}$ , entón existe  $k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$  tal que  $q_1(x) = kq_2(x)$ , xa que, como vimos no Teorema 2.12, o ortogonal de  $\mathbb{P}_{n-1}$  en  $\mathbb{P}_n$  ten dimensión 1. Polo tanto, se probamos a ecuación (2.19) podemos afirmar que existe  $k_n \neq 0$ , que neste caso será o coeficiente principal de  $\psi_n$ , de xeito que:

$$\psi_n(x) = k_n \prod_{i=1}^n (x - x_i), \quad (2.20)$$

de onde podemos deducir que  $\{x_1, \dots, x_n\}$  son as raíces de  $\psi_n$ . Para probar esa ortogonalidade tomamos un  $q \in \mathbb{P}_{n-1}$  arbitrario, e construímos o polinomio  $t(x) = q(x) \prod_{i=1}^n (x - x_i) \in \mathbb{P}_{2n-1}$ . Como estamos supoñendo a exactitude da fórmula de cuadratura en  $\mathbb{P}_{2n-1}$ , entón

$$\int_a^b q(x) \prod_{i=1}^n (x - x_i) dx = \sum_{j=1}^n A_j q(x_j) \prod_{i=1}^n (x_j - x_i) = 0, \quad (2.21)$$

polo que

$$\prod_{i=1}^n (x - x_i) \perp \mathbb{P}_{n-1}, \quad (2.22)$$

como queríamos demostrar. Demostremos a continuación a outra implicación.

( $\impliedby$ ) Reciprocamente, supoñamos que  $x_1, \dots, x_n$  son as raíces de  $\psi_n$ . Sabemos, polo Teorema 2.18, que estas raíces son distintas e que todas pertencen ao interior do intervalo no que queremos integrar,  $(a, b)$ . Se definimos os coeficientes  $A_i$  como na ecuación (2.17), é dicir,

$$A_i = \int_a^b l_i(x) dx, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.23)$$

Entón cúmprese que:

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{i=1}^n A_i p(x_i) \quad \forall p \in \mathbb{P}_{n-1}, \quad (2.24)$$

por ser a fórmula de tipo interpolatorio polinómico, como vimos no Teorema 1.11. Vexamos agora que é exacta en  $\mathbb{P}_{2n-1}$ . Sexa  $p \in \mathbb{P}_{2n-1}$  con  $\text{grao}(p) \geq n$ . Imos probar que  $\int_a^b p(x) dx = \sum_{i=1}^n A_i p(x_i)$ . Para iso realizamos a división euclidiana entre  $p$  e  $\psi_n$  e obtemos os polinomios  $q \in \mathbb{P}_{n-1}$  e  $r \in \mathbb{P}_{n-1}$  de xeito que

$$p(x) = \psi_n(x)q(x) + r(x). \quad (2.25)$$

Como  $\psi_n \perp \mathbb{P}_{n-1}$ ,

$$\int_a^b p(x) dx = \int_a^b (\psi_n(x)q(x) + r(x)) dx = \int_a^b r(x) dx. \quad (2.26)$$

Como dixemos anteriormente, a fórmula é exacta en  $\mathbb{P}_{n-1}$ , polo tanto

$$\int_a^b r(x) dx = \sum_{i=1}^n A_i r(x_i). \quad (2.27)$$

Para rematar

$$p(x_i) = \psi_n(x_i)q(x_i) + r(x_i) = r(x_i) \quad \text{para } i = 1, \dots, n, \quad (2.28)$$

xa que  $x_1, \dots, x_n$  son as raíces de  $\psi_n$ , co que

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{i=1}^n A_i p(x_i). \quad (2.29)$$

Deste xeito concluímos que a fórmula é exacta en  $\mathbb{P}_{2n-1}$ .  $\square$

**Definición 2.20.** As fórmulas descritas no teorema anterior chámanse **fórmulas de Gauss**.

*Observación 2.21.* En virtude do Teorema 1.11, as fórmulas de Gauss son necesariamente de tipo interpolatorio polinómico.

**Definición 2.22.** Os coeficientes  $A_i$  das fórmulas de Gauss denomínanse **números de Christoffel**.

A partir da definición anterior introducimos un novo resultado no que caracterizaremos estes números.

**Teorema 2.23** (Positividade dos números de Christoffel). *Os números de Christoffel son positivos e veñen dados pola expresión*

$$A_i = \frac{1}{(\psi_n'(x_i))^2} \int_a^b \left( \frac{\psi_n(x)}{x - x_i} \right)^2 dx, \quad (2.30)$$

onde  $\psi_n$  é o polinomio ortogonal de grao  $n$ .

*Demostración.* Recordemos que os polinomios fundamentais de Lagrange son de grao  $n - 1$  e cumpren  $l_i \in \mathbb{P}_{n-1}$  e  $l_i(x_j) = \delta_{ij}$  para  $i, j \in \{1, \dots, n\}$ . Entón  $(l_i(x))^2 \in \mathbb{P}_{2n-2}$ , así que, debido á exactitude en  $\mathbb{P}_{2n-1}$ , podemos obter a seguinte fórmula:

$$\int_a^b (l_i(x))^2 dx = \sum_{j=1}^n A_j (l_i(x_j))^2 = A_i. \quad (2.31)$$

Polo feito de que  $(l_i(x))^2 \geq 0$ , conclúese que

$$A_i = \int_a^b (l_i(x))^2 dx > 0, \quad (2.32)$$

o que nos indica que os números de Christoffel son positivos. A continuación, deducimos a expresión (2.30) para estes números. Como a expresión do polinomio fundamental de Lagrange asociado ao nodo  $x_i$  é

$$l_i(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.33)$$

e o conxunto  $\{x_i\}_{i=1}^n$  coincide coas raíces do polinomio ortogonal,  $\psi_n$ , sabemos polo Teorema 2.12 que existe unha constante non nula  $k_n$  tal que

$$\psi_n(x) = k_n \prod_{i=1}^n (x - x_i), \quad (2.34)$$

como xa vimos na ecuación (2.20). Polo tanto, para  $x \neq x_i$ ,

$$\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (x - x_j) = \frac{1}{k_n} \frac{\psi_n(x)}{x - x_i}. \quad (2.35)$$

Por outra banda, como  $\psi_n(x_i) = 0$ , para  $x = x_i$  temos

$$\begin{aligned} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (x_i - x_j) &= \lim_{x \rightarrow x_i} \left( \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (x - x_j) \right) = \frac{1}{k_n} \lim_{x \rightarrow x_i} \frac{\psi_n(x)}{x - x_i} = \\ &= \frac{1}{k_n} \lim_{x \rightarrow x_i} \frac{\psi_n(x) - \psi_n(x_i)}{x - x_i} = \frac{1}{k_n} \psi_n'(x_i). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Entón, se  $x \neq x_i$ , utilizando (2.33), (2.35) e (2.36), resulta

$$l_i(x) = \frac{1}{\psi_n'(x_i)} \frac{\psi_n(x)}{x - x_i}. \quad (2.37)$$

Finalmente, da expresión (2.32) obtemos que os números de Christoffel seguen a expresión:

$$A_i = \int_a^b (l_i(x))^2 dx = \frac{1}{(\psi_n'(x_i))^2} \int_a^b \left( \frac{\psi_n(x)}{x - x_i} \right)^2 dx. \quad (2.38)$$

□

Por último, abordaremos a cuestión do erro cometido ao aproximar as integrais mediante a fórmula de Gauss. Dito erro recollémolo no seguinte resultado.

**Teorema 2.24** (Fórmula de Markov do erro). *Sexa  $(a, b)$  un intervalo limitado e non baleiro e sexa  $\sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$  a fórmula de cuadratura de Gauss de  $n$  puntos. Se  $f \in C^{2n}([a, b])$ , entón existe  $\xi \in (a, b)$  de xeito que:*

$$E_n(f) = \frac{f^{2n}(\xi)}{(2n)!} \int_a^b (\hat{\psi}_n(x))^2 dx, \quad (2.39)$$

sendo  $\hat{\psi}_n(x)$  o polinomio mónico ortogonal de grao  $n$ .

*Demostración.* Como se estableceu no Corolario 2.15, o polinomio mónico ao que se fai referencia neste teorema é único. Sexan  $x_1, \dots, x_n$  as raíces do polinomio ortogonal de grao  $n$ ,  $\psi_n(x)$ , que supoñemos ordenadas de menor a maior. Tendo en conta a Observación 2.14 estas raíces están unicamente determinadas, polo que coinciden coas raíces do polinomio ortogonal mónico,  $\hat{\psi}_n(x)$ .

Ademais, seguindo o Teorema 2.18, as raíces están todas contidas no intervalo aberto  $(a, b)$ . Consideremos o polinomio  $h \in \mathbb{P}_{2n-1}$  que resolve o problema de interpolación de Hermite<sup>1</sup> asociado aos nodos  $x_1, \dots, x_n$  e a función  $f$ . Podemos atopar os resultados sobre a interpolación de Hermite no libro de Burden e Faires [10]. Sabemos polo Teorema 2.19 que a fórmula de Gauss é exacta en  $\mathbb{P}_{2n-1}$ . En particular, para o polinomio  $h(x)$  obtense

$$\int_a^b h(x) dx = \sum_{i=1}^n A_i f(x_i), \quad (2.40)$$

xa que  $h(x_i) = f(x_i)$ . A partir disto, dedúcese a expresión do erro de converxencia seguindo a definición 1.2

$$E_n(f) = \int_a^b (f(x) - h(x)) dx. \quad (2.41)$$

Seguindo a expresión do erro na interpolación de Hermite<sup>2</sup>, para cada  $x \in [a, b]$  existe  $\xi_x \in (\alpha_x, \beta_x) \subset (a, b)$  que verifica:

$$f(x) - h(x) = \frac{f^{2n}(\xi_x)}{(2n)!} \prod_{i=1}^n (x - x_i)^2 = \frac{f^{2n}(\xi_x)}{(2n)!} (\hat{\psi}_n(x))^2, \quad (2.42)$$

onde  $\alpha_x = \min\{x_1, x\}$  e  $\beta_x = \max\{x_n, x\}$ . Podemos dicir entón que, para cada  $x \in [a, b]$  existe un conxunto non baleiro  $\xi(x) \subset (\alpha_x, \beta_x) \subset (a, b)$ , tal que

$$f(x) - h(x) = \frac{f^{2n}(\xi_x)}{(2n)!} \prod_{i=1}^n (x - x_i)^2 = \frac{f^{2n}(\xi_x)}{(2n)!} (\hat{\psi}_n(x))^2 \quad (2.43)$$

<sup>1</sup>O problema de interpolación de Hermite consiste en atopar un polinomio  $p(x)$  de xeito que as súas derivadas verifican

$$p^{(j)}(x_i) = f^{(j)}(x_i) \quad j = 0, \dots, n, \quad i = 1, \dots, n,$$

sendo  $x_1, \dots, x_n$  os nodos de interpolación.

<sup>2</sup>Sexa  $f \in C^{2n}([a, b])$ , e sexan  $x_1, \dots, x_n$  os nodos de interpolación. Entón para cada  $x \in [a, b]$  existe un  $\xi_x \in (a, b)$  tal que

$$f(x) - H_{2n-1}(x) = \frac{f^{2n}(\xi_x)}{(2n)!} \prod_{i=1}^n (x - x_i)^2,$$

sendo  $H_{2n-1}$  o polinomio de interpolación de Hermite de  $n$  nodos.

para  $\xi_x \in \xi(x)$ . Definimos a función

$$G(x) = \begin{cases} \frac{f(x)-h(x)}{(\hat{\psi}_n(x))^2} & \text{se } x \in [a, b] \setminus \{x_1, \dots, x_n\}, \\ \frac{f''(x_i)-h''(x_i)}{2(\hat{\psi}'_n(x))^2} & \text{se } x = x_i. \end{cases} \quad (2.44)$$

Para analizar o límite de  $G$  cando  $x$  tende a  $x_i$ , aplicamos a regra de L'Hôpital<sup>3</sup>, que podemos atopar na páxina 116 da obra de Rudin [11], dúas veces. En efecto,

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow x_i} \frac{f(x) - h(x)}{(\hat{\psi}_n(x))^2} &\stackrel{(*)}{=} \lim_{x \rightarrow x_i} \frac{f'(x) - h'(x)}{2(\hat{\psi}'_n(x) \cdot \hat{\psi}_n(x))} \stackrel{(**)}{=} \\ &\lim_{x \rightarrow x_i} \frac{f''(x) - h''(x)}{2(\hat{\psi}'_n(x))^2} = \frac{f''(x_i) - h''(x_i)}{2(\hat{\psi}'_n(x_i))^2} = G(x_i), \end{aligned} \quad (2.45)$$

onde en  $(*)$  e en  $(**)$  aplicamos L'Hôpital. Estamos dentro das hipóteses de L'Hôpital en ámbas ocasións xa que

$$f'(x_i) = h'(x_i) \quad e \quad f''(x_i) = h''(x_i), \quad (2.46)$$

debido a que  $h$  é o polinomio que resolve o problema de interpolación de Hermite nos nodos  $x_1, \dots, x_n$ . Ademais,

$$\hat{\psi}_n(x_i) = 0, \quad (2.47)$$

xa que  $x_i$  é unha raíz do polinomio ortogonal de grao  $n$ , o que tamén implica que

$$\left. \frac{d}{dx} (\hat{\psi}_n(x))^2 \right|_{x_i} = 2(\hat{\psi}_n(x_i))(\hat{\psi}'_n(x_i)) = 0. \quad (2.48)$$

Só resta aclarar o cálculo da segunda derivada:

$$\left. \frac{d^2}{dx^2} (\hat{\psi}_n(x))^2 \right|_{x_i} = 2[(\hat{\psi}'_n(x))^2 + \hat{\psi}_n(x) \cdot \hat{\psi}''_n(x)] \Big|_{x_i} = 2(\hat{\psi}'_n(x_i))^2. \quad (2.49)$$

Deste xeito, concluímos que o límite coincide co valor definido para  $G(x_i)$ , polo que a función é continua en  $[a, b]$ . Pola ecuación (2.41) podemos escribir o erro como

$$E_n(f) = \int_a^b \frac{f(x) - h(x)}{(\hat{\psi}_n(x))^2} (\hat{\psi}_n(x))^2 dx = \int_a^b G(x) (\hat{\psi}_n(x))^2 dx. \quad (2.50)$$

<sup>3</sup>**Regra de L'Hôpital:** Sexan  $f, g$  dúas funcións reais definidas nun intervalo  $[a, b]$ , derivables en  $(a, b) \setminus \{c\}$  sendo  $c \in (a, b)$  tal que

$$\lim_{x \rightarrow c} f(x) = \lim_{x \rightarrow c} g(x) = 0 \quad \text{ou} \quad \lim_{x \rightarrow c} f(x) = \lim_{x \rightarrow c} g(x) = \pm\infty$$

entonces

$$\lim_{x \rightarrow c} \frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x \rightarrow c} \frac{f'(x)}{g'(x)},$$

sempre que o límite do cociente das derivadas exista

Grazas á continuidade da función  $G$  podemos aplicar o segundo teorema do valor medio do cálculo integrais<sup>4</sup>, que nos garante a existencia dun  $\bar{x} \in (a, b)$  tal que

$$E_n(f) = G(\bar{x}) \int_a^b (\hat{\psi}_n(x))^2 dx. \quad (2.51)$$

Facendo uso da ecuación (2.43), obtemos (2.39)  $\forall \xi \in \xi(\bar{x})$  no caso de que  $\bar{x} \notin \{x_1, \dots, x_n\}$ .

Só falta demostrar o caso no que  $\bar{x} \in \{x_1, \dots, x_n\}$ . Supoñamos entón que  $\bar{x} = x_i$  e demostremos que existe  $\xi \in (a, b)$  de xeito que:

$$G(x_i) = \frac{f^{2n}(\xi)}{(2n)!}. \quad (2.52)$$

Para iso, consideremos unha sucesión  $\{y_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subset [a + \epsilon, b - \epsilon] \setminus \{x_1, \dots, x_n\}$  tal que:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} y_k = x_i, \quad (2.53)$$

onde se escolle  $\epsilon > 0$  tal que  $a + \epsilon < x_1 < \dots < x_n < b - \epsilon$ . Para cada  $y_k$ , aplicando a ecuación (2.43) e o axioma de elección, existe un  $\xi(y_k) \in (a, b)$ , de xeito que

$$G(y_k) = \frac{f^{2n}(\xi(y_k))}{(2n)!}. \quad (2.54)$$

Debido a compacidade do intervalo  $[a + \epsilon, b - \epsilon]$  e como a sucesión  $\{\xi(y_k)\}$  está contida en dito compacto, podemos aplicar o Teorema de Bolzano-Weierstrass<sup>5</sup>. O Teorema de Bolzano-Weierstrass dinos que esta sucesión posúe unha subsucesión converxente  $\{\xi(y_{k_l})\}_{l \in \mathbb{N}}$ , de xeito que

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \xi(y_{k_l}) = \xi, \quad (2.55)$$

con  $\xi \in [a + \epsilon, b - \epsilon] \subset (a, b)$ . Por ser a función de clase  $2n$ , sabemos que  $f^{2n}$  é continua en  $[a, b]$ , o que garante que

$$\lim_{l \rightarrow \infty} f^{2n}(\xi(y_{k_l})) = f^{2n}(\xi). \quad (2.56)$$

Ademais pola continuidade de  $G$  e a ecuación (2.53)

$$\lim_{l \rightarrow \infty} G(y_{k_l}) = G(x_i). \quad (2.57)$$

Polo tanto queda demostrada a ecuación (2.52)

$$G(x_i) = \lim_{l \rightarrow \infty} G(y_{k_l}) = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{f^{2n}(\xi(y_{k_l}))}{(2n)!} = \frac{f^{2n}(\xi)}{(2n)!}, \quad (2.58)$$

o que remata a demostración. □

<sup>4</sup>**Segundo teorema do valor medio do cálculo integral:** Supoñamos que  $f \in C([a, b])$ , a integral de Riemann de  $g$  existe en  $[a, b]$ , e  $g(x)$  non cambia de signo en  $[a, b]$ . Entón, existe un número  $c$  en  $(a, b)$ , tal que

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

<sup>5</sup>**Teorema de Bolzano-Weierstrass:** Toda sucesión limitada admite unha subsucesión converxente

### 2.3. Fórmulas de Gauss en $(-1, 1)$

Para explicar as fórmulas de Gauss primeiro reduciremos o estudo ao caso máis sinxelo, que consiste en aplicarlas no intervalo  $(-1, 1)$ . A partir desta restrición, na seguinte sección xeneralizaremos o resultado para calquera intervalo limitado, aplicando unha transformación afín.

Como vimos no Corolario 2.16, se existe unha sucesión de polinomios estandarizados ortogonais, esta é única. Denominamos polinomios de Legendre  $\{L_n\}_{n=0}^{\infty}$  aos que forman esa única sucesión. Vexamos algunhas das súas propiedades:

1. Cumpren a relación de recurrencia:

$$L_0(x) = 1, \quad (2.59)$$

$$L_1(x) = x, \quad (2.60)$$

$$L_n(x) = \frac{1}{n}[(2n-1)xL_{n-1}(x) - (n-1)L_{n-2}(x)] \quad n > 1. \quad (2.61)$$

2. Cumpren a fórmula de Rodrigues:

$$L_n(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} ((1-x^2)^n) \quad n > 0, \quad (2.62)$$

de onde obtemos que o coeficiente principal de  $L_n$  é

$$k_n = \frac{1}{2^{n-1}} \frac{(2n)!}{[(n-1)!]^2}. \quad (2.63)$$

3. Ademais, sabemos o valor exacto das integrais

$$\int_{-1}^1 L_n^2(x) dx = \frac{2}{2n+1}. \quad (2.64)$$

4. Para rematar, cúmprese que

$$L_n(-x) = (-1)^n L_n(x). \quad (2.65)$$

#### Obtención das fórmulas de Gauss en $(-1, 1)$

Para construír as fórmulas de Gauss en  $(-1, 1)$ , vexamos primeiro unha observación que nos facilitará os cálculos posteriores.

*Observación 2.25.* Pódese demostrar que  $A_i = A_{n-i+1}$ , o cal se debe á propia definición dos coeficientes de Christoffel, vista no Teorema 2.23 e a cuarta propiedade recollida na ecuación (2.65) dos polinomios de Legendre. En concreto, se consideramos como os polinomios de Legendre

os polinomios ortogonais  $\psi_n$  do Teorema 2.23, a expresión que verifican os números de Christoffel particularízase do seguinte xeito:

$$A_i = \frac{1}{(L'_n(x_i))^2} \int_a^b \left( \frac{L_n(x)}{x - x_i} \right)^2 dx. \quad (2.66)$$

Agora, aplicando que  $L_n(-x) = (-1)^n L_n(x)$  e  $x_i = -x_{n-i+1}$ , é dicir, se un valor é un nodo tamén o será o seu oposto, resulta:

$$A_i = \frac{1}{(L'_n(-x_{n-i+1}))^2} \int_a^b \left( \frac{L_n(x)}{x - x_{n-i+1}} \right)^2 dx = A_{n-i+1}. \quad (2.67)$$

Primeiro construiremos a fórmula para un só nodo, fórmula que será exacta en  $\mathbb{P}_1$ , coñecida como fórmula do punto medio ou de Poncelet. A fórmula seguirá o seguinte esquema

$$\int_a^b f(x) dx \approx A_0 f(x_0). \quad (2.68)$$

Xa que só ten un nodo, este é a única raíz do polinomio de Legendre de grao un, é dicir de  $L_1(x) = x$ , que evidentemente é  $x_0 = 0$ . Como a fórmula é exacta para  $\mathbb{P}_0$ , entón ten que cumprir

$$A_0 = \int_{-1}^1 dx \implies A_0 = 2. \quad (2.69)$$

Como o único nodo é  $x_0 = 0$ , obtemos que para  $n = 1$  a fórmula é:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = 2f(0). \quad (2.70)$$

Para finalizar, procederase á obtención da fórmula de Gauss empregando 4 nodos indicando detalladamente cada paso a seguir.

1. Buscamos as raíces do polinomio de Legendre de grao  $n$ . Para iso debemos primeiro coñecer a expresión de dito polinomio. Pódese obter de dúas formas diferentes:

- Usando a primeira propiedade dos polinomios de Legendre e obtendo o polinomio por recurrencia seguindo a ecuación (2.61):

$$L_0(x) = 1; \quad (2.71)$$

$$L_1(x) = x; \quad (2.72)$$

$$L_2(x) = \frac{1}{2}[3x^2 - 1]; \quad (2.73)$$

$$L_3(x) = \frac{1}{3} \left[ 5x \left( \frac{1}{2}[3x^2 - 1] \right) - 2x \right] = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x); \quad (2.74)$$

$$L_4(x) = \frac{1}{4} \left[ 7x \left( \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \right) - 3 \left( \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \right) \right] = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3). \quad (2.75)$$

- Empregando a fórmula de Rodrigues recollida na ecuación (2.62):

$$\begin{aligned} L_4(x) &= \frac{(-1)^4}{2^4 4!} \frac{d^4}{dx^4} ((1-x^2)^4) = \frac{1}{384} (48(35x^4 - 30x^2 + 3)) = \\ &= \frac{1}{8} (35x^4 - 30x^2 + 3). \end{aligned} \quad (2.76)$$

Ademais, usando a última propiedade dos polinomios de Legendre, só debemos calcular a metade dos nodos no caso no que usemos un número par de nodos, e a metade mais o 0 no caso de que sexan impares. Polo tanto podémonos restrinxir ao estudo das raíces no intervalo  $(0, 1)$ . Facéndoo, obtemos os ceros do polinomio de Legendre de grao 4, despois de aplicar o cambio de variable  $z = x^2$ .

$$\begin{aligned} \frac{1}{8} (35x^4 - 30x^2 + 3) = 0 &\stackrel{(*)}{\iff} 35z^2 - 30z + 3 = 0 \iff \\ \iff z = \frac{30 \pm \sqrt{30^2 - 4 \cdot 35 \cdot 3}}{2 \cdot 35} &\iff \begin{cases} z = \frac{3+2\sqrt{6/5}}{7} \\ z = \frac{3-2\sqrt{6/5}}{7} \end{cases} \iff \\ \iff \begin{cases} x = \sqrt{\frac{3+2\sqrt{6/5}}{7}} \\ x = -\sqrt{\frac{3+2\sqrt{6/5}}{7}} \\ x = \sqrt{\frac{3-2\sqrt{6/5}}{7}} \\ x = -\sqrt{\frac{3-2\sqrt{6/5}}{7}} \end{cases} & \end{aligned} \quad (2.77)$$

2. Calculamos os números de Christoffel. Como vimos na Observación 2.25,  $A_i = A_{n-i+1}$ , polo tanto só necesitamos calcular a metade deles, ao igual que os nodos. Para calcular estes coeficientes temos que ter en conta que ter  $n$  nodos, por ser unha fórmula de tipo interpolatorio polinómico, impón a exactitude en  $\mathbb{P}_{n-1}$ . Por tanto, podemos usar o método de coeficientes indeterminados usando os polinomios  $1, x, x^2$  e  $x^3$ .

$$\int_{-1}^1 dx = 2, \quad (2.78)$$

$$\int_{-1}^1 x dx = 0, \quad (2.79)$$

$$\int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3}, \quad (2.80)$$

$$\int_{-1}^1 x^3 dx = 0. \quad (2.81)$$

Obtemos os números de Christoffel resolvendo o sistema

$$\begin{cases} A_1 + A_2 + A_3 + A_4 = 2, \\ A_1 \left( \frac{3+2\sqrt{6/5}}{7} \right) + A_2 \left( \frac{3-2\sqrt{6/5}}{7} \right) + A_3 \left( \frac{3-2\sqrt{6/5}}{7} \right) + A_4 \left( \frac{3+2\sqrt{6/5}}{7} \right) = \frac{2}{3}, \end{cases} \quad (2.82)$$

que podemos reducir usando que  $A_1 = A_4$  e  $A_2 = A_3$  a

$$\begin{cases} 2A_1 + 2A_2 = 2, \\ 2A_1 \left( \frac{3+2\sqrt{6/5}}{7} \right) + 2A_2 \left( \frac{3-2\sqrt{6/5}}{7} \right) = \frac{2}{3}. \end{cases} \quad (2.83)$$

Resolvendo o sistema obtemos os seguintes valores

$$A_1 = A_4 = \frac{-1 + 3\sqrt{\frac{6}{5}}}{6\sqrt{\frac{6}{5}}}, \quad (2.84)$$

$$A_2 = A_3 = \frac{1 + 3\sqrt{\frac{6}{5}}}{6\sqrt{\frac{6}{5}}}. \quad (2.85)$$

Polo tanto, se substituímos na fórmula de Gauss para  $(-1, 1)$ , temos que para catro nodos a fórmula é

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 f(x) dx \approx & \frac{-1 + 3\sqrt{\frac{6}{5}}}{6\sqrt{\frac{6}{5}}} \left[ f \left( \sqrt{\frac{3 + 2\sqrt{6/5}}{7}} \right) + f \left( -\sqrt{\frac{3 + 2\sqrt{6/5}}{7}} \right) \right] + \\ & + \frac{1 + 3\sqrt{\frac{6}{5}}}{6\sqrt{\frac{6}{5}}} \left[ f \left( \sqrt{\frac{3 - 2\sqrt{6/5}}{7}} \right) + f \left( -\sqrt{\frac{3 - 2\sqrt{6/5}}{7}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.86)$$

*Observación 2.26.* Seguindo os pasos anteriores pódese dar a fórmula de Gauss en  $(-1, 1)$  para calquera cantidade de nodos. Non obstante, o proceso só é aplicable para fórmulas de poucos nodos, menos de cinco, xa que a obtención dos polinomios de Legendre e especialmente a obtención das raíces dos polinomios son tarefas moi laboriosas e pouco prácticas. Na seguinte sección estudaremos a implementación computacional dos métodos, onde non usaremos o proceso descrito anteriormente.

Por último, estudamos a expresión do erro das fórmulas de Gauss no intervalo  $(-1, 1)$ . Como consecuencia da fórmula de Markov (2.39), podemos dicir que para toda función  $f \in C^{2n}([-1, 1])$  existe  $\xi \in (-1, 1)$  tal que

$$E_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_{-1}^1 (\hat{L}_n(x))^2 dx, \quad (2.87)$$

sendo  $\hat{L}_n$  o polinomio mónico ortogonal de grao  $n$ . Sexa  $k_n$  o coeficiente principal de  $L_n$ , entón

$$\hat{L}_n(x) = \frac{L_n(x)}{k_n}. \quad (2.88)$$

Se recordamos a ecuación (2.63) sabemos que

$$k_n = \frac{1}{2^{n-1}} \frac{(2n)!}{[(n-1)!]^2}. \quad (2.89)$$

Ademais, podemos obter a expresión da integral do erro usando a cuarta propiedade dos polinomios de Legendre, en concreto (2.64),

$$\int_{-1}^1 L_n^2(x) dx = \frac{2}{2n+1}. \quad (2.90)$$

Xuntando estas últimas expresións obtemos a expresión do erro

$$E_n(f) = \frac{2^{2n+1}(n!)^4 f^{2n}(\xi)}{(2n!)^3 2n+1}, \quad (2.91)$$

para  $\xi \in (-1, 1)$ .

### 2.3.1. Programación da fórmula de Gauss no intervalo $(-1, 1)$

Antes de xeneralizar as fórmulas de Gauss para calquera intervalo limitado, imos ver algúns exemplos de como funcionan estas fórmulas cando nos restrinximos ao intervalo  $(-1, 1)$ . Para iso, empregaremos varios *scripts* de Matlab e realizaremos comparacións utilizando distintas cantidades de nodos. Para o cálculo da aproximación da integral, usaremos un *script* principal e definiremos dúas funcións:

- O programa principal é un programa sinxelo que simplemente recolle a función que se quere aproximar, o número de nodos, o erro cometido e chama ao resto das funcións externas. Podemos ver o código no Anexo A.1.
- A función máis importante é a encargada de facer a aproximación da integral polo método de Gauss, e de obter os nodos. Dita función está descrita por Trefethen [7], e segue o algoritmo de **Golub-Welsch**. Podémola ver no Anexo A.2.
- Por último, implementamos unha función que debuxa as gráficas que permiten visualizar o funcionamento do método e a distribución dos nodos, así como os pesos asociados a cada un deles. A función, denominada *grafo.m*, representa mediante rectángulos a aproximación da integral co método de Gauss, sendo a súa área a aproximación estimada. En concreto, os rectángulos terán de altura o valor da función nos nodos e de lonxitude o coeficiente asociado. Podémola atopar no Anexo A.5.

**Exemplo 2.27.** Para visualizar o funcionamento das fórmulas de Gauss en  $(-1, 1)$ , aproximamos a integral dunha función moi sinxela como é a función coseno. Ao executar o programa obtemos a seguinte táboa de erros e da aproximación do valor da integral dependendo do número de nodos. Remarcamos en negrita as cifras que coinciden co valor exacto, sabendo que o valor exacto é  $2 \operatorname{sen}(1)$ .

| Número de nodos | Valor da integral aproximada | Erro                     |
|-----------------|------------------------------|--------------------------|
| 1               | 2                            | -0.3170                  |
| 2               | <b>1.675823655389986</b>     | $7.118 \times 10^{-3}$   |
| 4               | <b>1.682941688695973</b>     | $2.809 \times 10^{-7}$   |
| 6               | <b>1.682941969614280</b>     | $1.513 \times 10^{-12}$  |
| 7               | <b>1.682941969615794</b>     | $-1.328 \times 10^{-15}$ |
| 8               | <b>1.682941969615793</b>     | $3.553 \times 10^{-18}$  |

Cadro 2.1: Erros da integral de  $\cos(x)$  en  $(-1, 1)$  empregando as fórmulas de Gauss.

Como podemos ver, conseguimos un erro moi pequeno simplemente empregando 8 nodos. Ademais, vemos que cada vez que engadimos un nodo, o erro redúcese alomenos en tres decimais. Como era de esperar, o método funciona moi ben para funcións regulares. Vexamos agora unha pequena interpretación gráfica do noso exemplo, á cal podemos acceder empregando a función *grafo.m*:

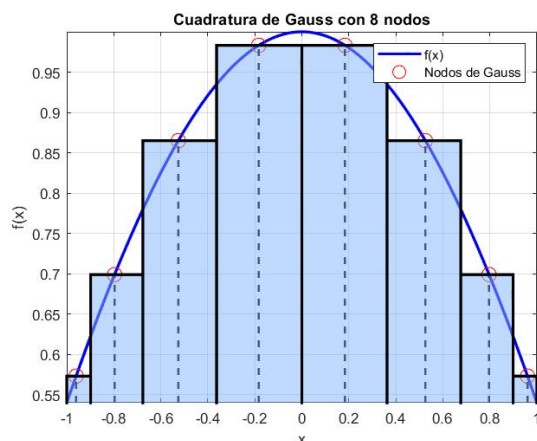


Figura 2.1: Representación gráfica da fórmula de Gauss en  $(-1, 1)$ .

Cómpre destacar que hai fortes evidencias teóricas (ver conxectura 4 de López Pouso e Segura [?]) do seguinte feito: existe un único nodo en cada intervalo da forma  $(\mu_{i-1}, \mu_i)$  para  $i = 1, \dots, n$  sendo  $\mu_0 = -1$  e  $\mu_i = \mu_{i-1} + A_i$ , sendo  $A_i$  os números de Christoffel. Este resultado proporciona unha interpretación xeométrica da distribución dos nodos e do peso de cada nodo. Ademais, permítenos representar a aproximación da integral polo método de Gauss, que é a área dos rectángulos de base o peso do nodo e altura o valor da función en dito nodo, como se pode ver na figura 2.1.

Antes de rematar o exemplo, vexamos unha pequena comparativa ca regra do trapecio composta, definida no exemplo 1.12. Para iso, volvemos a empregar códigos en Matlab. Non entra-

remos en moito detalle, xa que non é o noso propósito, e simplemente recóllense no Anexo A.8. Obtemos así a seguinte táboa de erros:

| Número de nodos | Valor da integral aproximada | Erro                   |
|-----------------|------------------------------|------------------------|
| 10              | <b>1.676010575633620</b>     | $6.931 \times 10^{-3}$ |
| 100             | <b>1.682884732142843</b>     | $5.723 \times 10^{-5}$ |
| 1000            | <b>1.682941407511452</b>     | $5.621 \times 10^{-7}$ |
| 10000           | <b>1.682941964004865</b>     | $5.610 \times 10^{-9}$ |

Cadro 2.2: Erros da integral de  $\cos(x)$  en  $(-1, 1)$  coa regra do trapecio composto.

Nesta táboa podemos ver que a regra de trapecio composta é moito menos precisa que as fórmulas de Gauss mesmo usando moitos máis nodos para aproximar. Ademais, pódese observar a orde de converxencia de  $\mathcal{O}(h^2)$ , sendo  $h$  a lonxitude dos subintervalos empregados para a regra do trapecio composto. Vexamos agora a expresión gráfica da fórmula de trapecio composto (usando o código A.9) con 8 nodos.

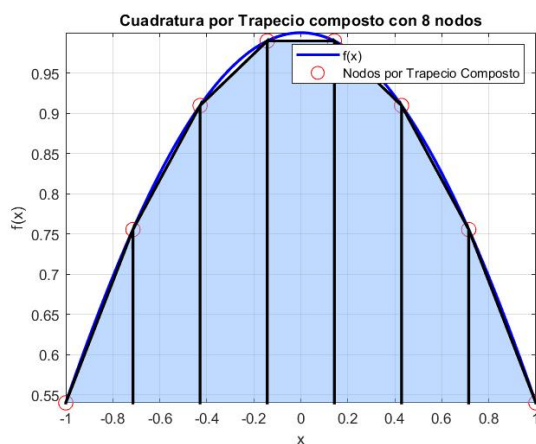


Figura 2.2: Grafo da regra do trapecio composto para a integral de  $\cos(x)$  en  $(-1, 1)$ .

## 2.4. Fórmulas de Gauss en $(a, b)$

Unha vez visto o funcionamento e o proceso de cálculo das fórmulas de Gauss no intervalo  $(-1, 1)$ , faremos o caso xeral. A partir de agora consideraremos  $(a, b)$  intervalo limitado non baleiro.

Sexa a transformación afín  $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

$$\varphi : t \in [-1, 1] \longrightarrow \varphi(t) = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2} \in [a, b]. \quad (2.92)$$

A súa inversa é

$$\varphi^{-1} : x \in [a, b] \longrightarrow \varphi^{-1}(x) = \frac{2x - a - b}{a - b}. \quad (2.93)$$

Entón a sucesión  $\{\psi_n\}_{n \geq 0}$ , definida por

$$\psi_n = L_n \circ \varphi^{-1}, \quad (2.94)$$

sendo  $L_n$  os polinomios de Legendre, é unha sucesión de polinomios ortogonais en  $(a, b)$  que cumpre que  $\text{grao}(\psi_n) = n$ . Polo tanto, os nodos da fórmula de Gauss en  $(a, b)$  son as raíces de  $\psi_n$ .

*Observación 2.28.* Os puntos  $x_1, \dots, x_n$  son os nodos da fórmula de Gauss en  $(a, b)$  se, e só se,  $x_i = \varphi(t_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$  sendo  $t_1, \dots, t_n$  os nodos da fórmula de Gauss en  $(-1, 1)$ . Isto débese a que se  $x_i$  é un nodo da fórmula de Gauss en  $(a, b)$ , entón

$$0 = \psi_n(x_i) = (L_n \circ \varphi^{-1})(x_i) = L_n(\varphi^{-1}(x_i)). \quad (2.95)$$

É dicir,  $t_i = \varphi^{-1}(x_i)$  é unha raíz do polinomio de Legendre, e consecuentemente, un nodo da fórmula de Gauss en  $(-1, 1)$ . Reciprocamente, se  $t_i$  é un nodo da fórmula de Gauss en  $(-1, 1)$ , entón  $L_n(t_i) = 0$ . Como  $t_i$  está contido en  $(-1, 1)$  e a aplicación  $\varphi$  é bixectiva, entón existe un único  $x_i$  tal que  $\varphi^{-1}(x_i) = t_i$ , polo tanto  $L_n(t_i) = L_n(\varphi^{-1}(x_i)) = 0$  polo que  $x_i$  é un nodo da fórmula de Gauss en  $(a, b)$ .

Para o cálculo da fórmula de Gauss en  $(a, b)$  temos dúas opcións, o método dos coeficientes indeterminados, ou aproveitar as fórmulas en  $(-1, 1)$  e deducir estas usando a transformación afín. Nós usaremos este segundo proceso xa que temos definido previamente o cálculo da fórmula en  $(-1, 1)$ . Sexa

$$\int_{-1}^1 g(t) dt = \sum_{i=1}^n A_i g(t_i) + E_n(g) \quad (2.96)$$

a fórmula de Gauss de  $n$  nodos en  $(-1, 1)$ . Se aplicamos o cambio de variable afín  $x = \varphi(t)$ , definido ao principio desta sección, teriamos a fórmula de Gauss en  $(a, b)$ :

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \tilde{A}_i f(x_i) + \tilde{E}_n(f), \quad (2.97)$$

sendo  $x_i = \varphi(t_i)$  e  $\tilde{A}_i = (b - a)/2A_i$  e como erro  $\tilde{E}_n(f) = (b - a)/2E_n(f \circ \varphi)$ . Sexa

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

a función  $f$  composta coa transformación afín  $\varphi(t)$ . Vexamos a expresión de  $\tilde{A}_i$  e  $\tilde{E}_n(f)$ . Facendo

uso do Teorema de cambio de variable para o cálculo integral<sup>6</sup> (que podemos atopar en [?]), a definición de  $x_i$ ,  $\tilde{A}_i$  e  $\tilde{E}_n(f)$  vemos que, efectivamente,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_{\varphi(-1)}^{\varphi(1)} f(x) dx = \int_{-1}^1 f(\varphi(t))\varphi'(t) dt = \int_{-1}^1 g(t) \frac{b-a}{2} dt = \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{b-a}{2} A_i g(t_i) + \frac{b-a}{2} E_n(g) = \sum_{i=1}^n \tilde{A}_i f(x_i) + \tilde{E}_n(f). \end{aligned} \quad (2.98)$$

Vexamos entón como sería a expresión do erro, sexa  $f \in C^{2n}([a, b])$ , se temos en conta a ecuación (2.91), facendo pequenas contas obtemos que o erro da fórmula en calquera intervalo limitado é

$$\begin{aligned} \tilde{E}_n(f) &= \frac{b-a}{2} E_n(f \circ \varphi) = \left(\frac{b-a}{2}\right) \frac{2^{2n+1} [n!]^4 (f \circ \varphi)^{(2n)}(\eta)}{[(2n)!]^3 2n+1} = \\ &= \left(\frac{b-a}{2}\right) \frac{2^{2n+1} [n!]^4 f^{(2n)}(\eta)}{[(2n)!]^3 2n+1} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{2n} = (b-a)^{2n+1} \frac{[n!]^4 f^{(2n)}(\eta)}{[(2n)!]^3 2n+1}, \end{aligned} \quad (2.99)$$

para un certo  $\eta \in (a, b)$ .

*Observación 2.29.* O obxectivo desta observación é establecer unha cota para o erro en función do número de nodos, así como determinar a súa orde de decrecemento asintótico. Para iso debemos estudar a ecuación (2.99) como unha función dependente da variable  $n$ . Aplicamos a fórmula de **Stirling** que ven dada pola expresión

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n. \quad (2.100)$$

Como podemos ver nos resultados establecidos por Bukac, Buíc e Eleović [5], pódese limitar tanto superior como inferiormente o factorial dun número por

$$\sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \exp\left(\frac{1}{12n+1}\right) < n! < \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \exp\left(\frac{1}{12n}\right). \quad (2.101)$$

Para establecer unha cota superior do erro en función de  $n$ , debemos acotar superiormente  $(n+1)!$  e inferiormente  $(2n)!$

$$\frac{[n!]^4}{[(2n)!]^3} < \frac{[\sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \exp\left(\frac{1}{12n}\right)]^4}{[\sqrt{4\pi n} \left(\frac{2n}{e}\right)^{2n} \exp\left(\frac{1}{24n+1}\right)]^3}. \quad (2.102)$$

Simplificamos esta expresión por partes.

---

<sup>6</sup>**Teorema de cambio de variable para o cálculo integral:** Sexan  $g$  unha función Riemann integrable en  $[a, b]$  e  $f$  unha función Riemann integrable en  $G([a, b])$ , sendo  $G$  a integral indefinida de  $g$ , é dicir,  $G(t) = \int_h^t g(w) dw$ , con  $t \in [a, b]$  e  $h \in [a, b]$  arbitrario. Entón a función  $f(G(t))g(t)$  é Riemann integrable en  $[a, b]$  e verifica

$$\int_{G(a)}^{G(b)} f(x) dx = \int_a^b f(G(t))g(t) dt.$$

- Primeiro, tratamos as expoñenciais

$$\frac{e^{-4n} \exp\left(\frac{1}{3n}\right)}{e^{-6n} \exp\left(\frac{3}{24n+1}\right)} = e^{2n} \exp\left(\frac{15n+1}{3n(24n+1)}\right). \quad (2.103)$$

- En segundo lugar, se agrupamos as potencias de  $n$

$$\frac{\binom{n}{2n}^{4n}}{\binom{2n}{2n}^{6n}} = \left(\frac{n}{2n}\right)^{4n} \left(\frac{1}{2n}\right)^{2n} = \frac{1}{2^{6n} n^{2n}}. \quad (2.104)$$

- Por último, estudamos os termos correspondentes ás raíces cadradas

$$\frac{(2\pi n)^2}{(4\pi n)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \frac{n^2}{\sqrt{n^3}} = \frac{1}{2} \sqrt{\pi n}. \quad (2.105)$$

Polo tanto podemos expresar a acotación (2.102) como

$$\frac{[n!]^4}{[(2n)!]^3} < \sqrt{\pi n} \frac{\exp(2n) \exp\left(\frac{15n+1}{3n(24n+1)}\right)}{2^{6n+1} n^{2n}} \quad (2.106)$$

O estudo da acotación do erro non se pode realizar para todas as funcións, xa que a función  $f$  debe cumprir dúas condicións. En primeiro lugar  $f$  debe pertencer a  $C^\infty([a, b])$  e ademais, debe existir unha constante  $M$  tal que  $|f^k(x)| \leq M \forall x \in [a, b], \forall k \in \mathbb{N}$ . Se estas dúas condicións se verifican podemos establecer unha función cota, que denotaremos por  $c(n, f)$ , que depende da cantidade de nodos que queremos utilizar e da función que queremos acotar.

$$|\hat{E}_n(f)| \leq \frac{(b-a)^{2n+1} M}{2n+1} \sqrt{\pi n} \frac{\exp(2n) \exp\left(\frac{15n+1}{3n(24n+1)}\right)}{2^{6n+1} n^{2n}}. \quad (2.107)$$

Como  $n \in \mathbb{N}$  verifícase que

$$0 < \exp\frac{1}{3n} \leq \exp\frac{1}{3}, \quad (2.108)$$

e considerando que

$$\frac{\pi}{2} \exp\frac{1}{3} < 2, \quad (2.109)$$

pódese simplificar a ecuación (2.107) como

$$|\hat{E}_n(f)| < (b-a)^{2n+1} \frac{M}{2^{6n} \sqrt{n}} \left(\frac{e}{n}\right)^{2n}. \quad (2.110)$$

Polo tanto, a función cota vén dada polo termo dereito da desigualdade anterior

$$c(n, f) = (b-a)^{2n+1} \frac{M}{2^{6n} \sqrt{n}} \left(\frac{e}{n}\right)^{2n}. \quad (2.111)$$

Ademais, para este tipo de funcións podemos estudar a velocidade de decremento do erro, estudando a función  $c(n, f)$  como unha sucesión respecto de  $n$ . Así, para valores moi altos de  $n$ , a función  $c(n, f)$ , pódese expresar en termos de

$$\left(\frac{b-a}{2^3}\right)^{2n} \left(\frac{1}{n}\right)^{2n}. \quad (2.112)$$

Finalmente, se denotamos  $C = (b - a)/2^3$ , podemos expresar este decrecemento como

$$\left(\frac{C}{n}\right)^{2n} \quad (2.113)$$

En conclusión, o decrecemento do erro na fórmula de Gauss é moi alto polo que, cada vez que aumentamos un nodo a aproximación mellora significativamente.

**Exemplo 2.30.** Seguindo coa observación anterior, vexamos un exemplo dunha función para a cal poidamos acotar o erro de cuadratura mediante unha función  $c(n, f)$ . Claramente os polinomios cumpren coas condición necesarias, xa que a partir dunha certa derivada, as sucesivas derivadas son nulas. Se tomamos como exemplo a función coseno, podemos ver que verifica as condicións estudando a forma da súa derivada enésima

$$f^{(n)}(x) = \begin{cases} \cos x & n = 4k, k \in \mathbb{N}, \\ -\operatorname{sen} x & n = 4k + 1, k \in \mathbb{N}, \\ -\cos x & n = 4k + 2, k \in \mathbb{N}, \\ \operatorname{sen} x & n = 4k + 3, k \in \mathbb{N}. \end{cases} \quad (2.114)$$

Vemos que calquera que sexa a derivada da función está limitada inferior e superiormente por  $-1$  e  $1$  respectivamente. Isto permite, tomando  $M = 1$ , establecer unha cota para o erro que dependa da cantidade de nodos, se temos en conta a ecuación (2.99) obtemos que

$$c(n, f) = (b - a)^{2n+1} \frac{1}{2^{6n}\sqrt{n}} \left(\frac{e}{2n}\right)^{2n}. \quad (2.115)$$

Polo tanto, se tomamos unha cantidade de nodos determinada podemos saber unha cota do erro ao aproximar a integral polo método de Gauss con  $n$  nodos. Se tomamos como exemplo  $n = 10$  para a función anterior no intervalo  $[-\pi, \pi]$ , sabemos que

$$\hat{E}_n(f) < c(n, f) = (2\pi)^{21} \frac{1}{2^{60}\sqrt{10}} \left(\frac{e}{20}\right)^{20} \approx 7.3328 \times 10^{-20}. \quad (2.116)$$

Polo tanto, podemos garantir unha moi boa aproximación con  $n = 10$  nodos.

#### 2.4.1. Programación da fórmula de Gauss no intervalo $(a, b)$

Para rematar co capítulo presentamos un programa de Matlab que use a fórmula de Gauss para o cálculo aproximado das integrais en calquera intervalo acotado. Este é moi parecido ao descrito na sección anterior, xa que só cambia a implementación da transformación afín definida na ecuación (2.92). Describamos os *scripts*:

- O programa principal é practicamente igual, só cambia a necesidade de introducir a definición da transformación afín e os valores de  $a$  e  $b$  nos que queremos integrar. Podémolo ver no anexo A.4.

- O procedemento do cálculo da aproximación seguindo a fórmulas de Gauss é o mesmo, pero tendo que modificar os pesos e os nodos coa transformación afín (ver Anexo A.6).
- Para a función do grafo só cambia o intervalo de puntos no que queremos debuxar a súa función e os límites dos grafos. Podémola ver no Anexo A.7.

Como na sección anterior, imos ver un exemplo:

**Exemplo 2.31.** Calcularemos a integral da función

$$f(x) = \exp(\cos(x)) \quad (2.117)$$

en  $[-\pi, \pi]$ . Aplicando a fórmula de Gauss obtemos a seguinte táboa de valores. Destacamos que o valor exacto en forma simbólica é  $2\pi I_0(1)$ , sendo  $I_0$  a función de Bessel modificada de primeira clase e orde 0, que en valor numérico, se aproximamos por truncamento, é 7.95492652101285427.

| Número de nodos | Valor da integral aproximada | Erro                    |
|-----------------|------------------------------|-------------------------|
| 5               | 8.095690126869422798         | -0.140                  |
| 10              | <b>7.9547349085829974769</b> | $1.916 \times 10^{-4}$  |
| 20              | <b>7.9549265209866231174</b> | $2.622 \times 10^{-11}$ |
| 30              | <b>7.9549265210128439207</b> | $1.353 \times 10^{-15}$ |
| 40              | <b>7.9549265210128548089</b> | $4.655 \times 10^{-16}$ |

Cadro 2.3: Fórmulas de Gauss de  $\exp(\cos(x))$  en  $(-\pi, \pi)$ .

Ao igual que antes, facemos a seguinte interpretación gráfica.

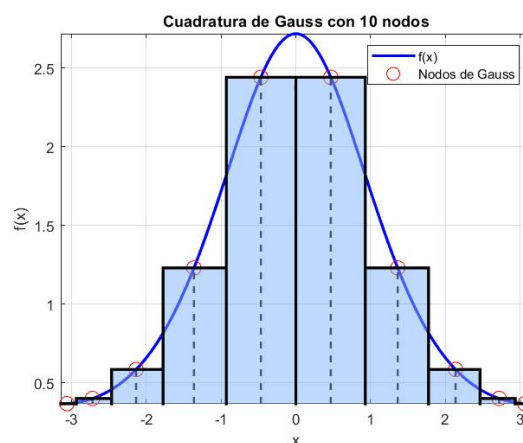


Figura 2.3: Grafo do método de Gauss para a integral de  $\exp \cos x$  en  $(-\pi, \pi)$ .

Se facemos unha comparativa coa regra do trapezio composta obtemos a táboa 2.4.

| Número de nodos | Valor da integral aproximada | Erro                     |
|-----------------|------------------------------|--------------------------|
| 5               | <b>7.9893234398220381202</b> | $-3.439 \times 10^{-2}$  |
| 10              | <b>7.954926451666763738</b>  | $6.934 \times 10^{-8}$   |
| 15              | <b>7.95492652101289359</b>   | $-9.661 \times 10^{-15}$ |
| 20              | <b>7.95492652101285471</b>   | $-4.434 \times 10^{-16}$ |

Cadro 2.4: Regra de trapezio composta de  $\exp(\cos(x))$  en  $(-\pi, \pi)$ .

Destaca o feito de que empregando menos nodos alcánzase unha precisión maior coa regra do trapezio composta que coa fórmula de Gauss. Isto ocorre xa que estamos integrando unha función periódica nun intervalo de lonxitude igual ao período da función. Non obstante, isto estudarase no seguinte capítulo

**Exemplo 2.32.** Para rematar a sección faremos outro pequeno exercicio para ver como se comporta o erro para diferentes funcións. Facemos un grafo sobre tres funcións distintas no que representamos o erro cometido ao aproximar fronte ao número de nodos. O eixe de abscisas indica o número de nodos e o eixe de ordenadas o erro cometido en valor absoluto. Empregamos tres funcións: a función coseno, un polinomio e a función exponencial no intervalo  $(-1.5, 1.5)$ . O código empregado para dita comparación está recollido no Anexo A.10. O grafo resultante é o seguinte.

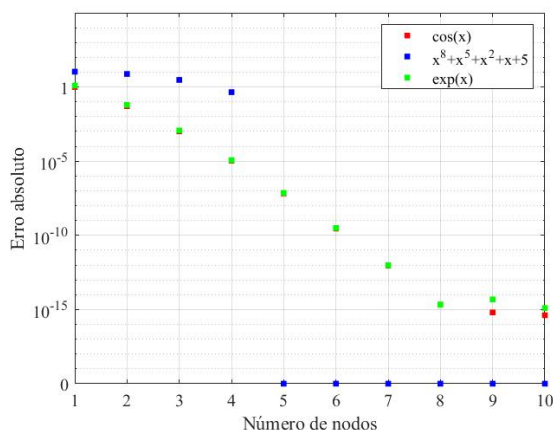


Figura 2.4: Grafo de comparación entre o erro e a cantidade de nodos no caso das fórmulas de Gauss en  $(-1.5, 1.5)$

Neste grafo podemos ver o comportamento decrecente do erro e, sobre todo, a rapidez coa que decrece. Ademais, como xa sabemos ao aproximar a intergral do polinomio é nulo a partir do quinto nodo, pois este é de grao 8 e a fórmula é exacta en  $\mathbb{P}_{2n-1}$ .

## Capítulo 3

# Método de Romberg

Neste capítulo desenvolveremos o método de Romberg, que consiste en aplicar de maneira reiterada a regra do trapezio composta, a cal nos garante unha orde de converxencia e  $\mathcal{O}(h^2)$ , e combinar os resultados mediante a extrapolación de Richardson. Na primeira sección estudamos a extrapolación de Richardson e a fórmula de Euler Maclaurin, e posteriormente construímos o esquema do método de Romberg. Este método estúdase en profundidade no noveno capítulo de Quarteroni [2] e ao longo da obra de Salgado e Wise [1].

### 3.1. Extrapolación de Richardson

Antes de entrar nos detalles do método de Romberg, é necesario introducir algúns conceptos dos que se fará uso máis adiante.

**Definición 3.1.** Sexan  $\delta_0 > 0$ ,  $\psi : (0, \delta_0) \rightarrow \mathbb{R}$  e  $p \in \mathbb{R}$ ,  $p \geq 0$ . Diremos que  $\psi(y)$  é unha **O grande de  $y^p$**  e denotase  $\psi(y) = \mathcal{O}(y^p)$ , se existen  $C > 0$  e  $\delta_1 > 0$  tales que  $|\psi(y)| \leq Cy^p \forall y \in (0, \delta_1)$ . Diremos que  $A(y)$  é unha **aproximación de  $\alpha_0$  de orde  $p$**  con respecto ao parámetro  $y$  se se verifica que

$$A(y) - \alpha_0 = \mathcal{O}(y^p) \tag{3.1}$$

**Definición 3.2.** Sexa  $\alpha_0$  unha cantidade descoñecida que aproximamos por unha cantidade calculable,  $A(y)$ ,  $y > 0$ . Chamaremos **desenvolvemento asintótico** de  $A(y)$  en potencias de  $y$ , a un desenvolvemento de  $A(y)$  que para certo  $k$  natural cumpre:

$$A(y) = \alpha_0 + \alpha_1 y + \dots + \alpha_k y^k + \mathcal{O}(y^{k+1}), \tag{3.2}$$

sendo os coeficientes  $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_k$  independentes de  $y$ .

*Observación 3.3.* Nótese que o desenvolvemento asintótico de  $A$  en potencias de  $y$  implica que

$$\lim_{y \rightarrow 0} A(y) = \alpha_0. \quad (3.3)$$

### 3.1.1. Obtención dunha aproximación de orde $n$ : Descrición da extrapolación de Richardson

Gustaríanos ter a mellor aproximación posible nos termos da definición 3.1. Para iso, comenzaremos definindo o proceso de aproximación de orde 2, xa que o de orde un é trivial desdexando da ecuación (3.2) o valor  $\alpha_0$ . Unha vez establecido proceso de orde 2 presentaremos dous resultados que nos permitirán para xeneralizar este método para obter aproximacións dunha órbita arbitraria.

#### Obtención dunha aproximación de orde 2

Sexa  $0 < r < 1$  e consideremos o desenvolvemento asintótico:

$$A(ry) = \alpha_0 + \alpha_1 ry + \alpha_2 r^2 y^2 + \cdots + \alpha_k r^k y^k + \mathcal{O}(y^{k+1}). \quad (3.4)$$

Buscamos eliminar o termo de grao 1. Para iso, facemos unha combinación lineal entre  $A(y)$  e  $A(ry)$ , concretamente restámoslle á segunda ecuación a primeira multiplicada por  $r$ :

$$A(ry) - rA(y) = \alpha_0(1 - r) + \alpha_2(r^2 - r)y^2 + \cdots + \alpha_k y^k (r^k - r) + \mathcal{O}(y^{k+1}). \quad (3.5)$$

Se denotámos  $\phi_1(y) = (A(ry) - rA(y))/(1 - r)$ , temos que:

$$\phi_1(y) = \alpha_0 + \alpha_2 \frac{r^2 - r}{1 - r} y^2 + \cdots + \alpha_k \frac{r^k - r}{1 - r} y^k + \mathcal{O}(y^{k+1}). \quad (3.6)$$

Definindo

$$\beta_{1,l} = \alpha_l \frac{r^l - r}{1 - r}, \quad l = 2, \dots, k, \quad (3.7)$$

teríamos que

$$\phi_1(y) = \alpha_0 + \beta_{1,2} y^2 + \cdots + \beta_{1,k} y^k + \mathcal{O}(y^{k+1}). \quad (3.8)$$

Observemos que:

- Se  $k = 1$ ,  $\psi_1(y)$  é unha aproximación de  $\alpha_0$  de orde polo menos 2:

$$\phi_1(y) = \alpha_0 + \mathcal{O}(y^2). \quad (3.9)$$

- Se  $k \geq 2$  e  $\beta_{1,2} \neq 0$ ,  $\psi_1(y)$  é unha aproximación de  $\alpha_0$  de orde exactamente 2:

$$\phi_1(y) = \alpha_0 + \beta_{1,2} y^2 + \mathcal{O}(y^3). \quad (3.10)$$

Visto este proceso simple, no seguinte apartado xeneralizaremos a obtención das aproximacións de  $\alpha_0$  de orde  $n$ .

### Obtención dunha aproximación de orde $n > 2$

Cando  $k > 1$  pódese obter unha aproximación de  $\alpha_0$  de orde  $n > 2$ . Para iso, partimos de

$$\phi_0(y) = A(y). \quad (3.11)$$

Traballaremos por recurrencia seguindo a fórmula

$$\phi_n(y) = \frac{\phi_{n-1}(ry) - r^n \phi_{n-1}(y)}{1 - r^n}, \quad (3.12)$$

ata chegar á orde desexada.

*Observación 3.4.* Se observamos o proceso descrito para obter unha aproximación de orde 2, estamos a seguir a ecuación (3.12) para  $n = 1$ , xa que o numerador da expresión coincide coa combinación lineal descrita en (3.5) e o denominador coa posterior denotación de  $\psi_1(y)$ .

A seguinte proposición demostra que  $\phi_n(y)$  é unha aproximación de  $\alpha_0$  de orde maior a  $n + 1$ , para  $n = 0, \dots, k$ .

**Proposición 3.5.** Para  $n = 0, \dots, k$ ,  $\phi_n(y)$  ten un desenvolvemento asintótico da forma:

$$\phi_n(y) = \alpha_0 + \beta_{n,n+1}y^{n+1} + \dots + \beta_{n,k}y^k + \mathcal{O}(y^{k+1}), \quad (3.13)$$

sendo:

$$\beta_{n,l} = \beta_{n-1,l} \frac{r^l - r^n}{1 - r^n}, \quad l = n + 1, \dots, k, \quad (3.14)$$

e

$$\beta_{0,l} = \alpha_l. \quad (3.15)$$

*Demostración.* Vexamos este resultado por inducción. Para  $n = 0$  o resultado é válido pois, por definición,  $\beta_{0,l} = \alpha_l$ ,  $l = 1, \dots, k$ , e como vimos ao principio da sección sería a formulación correcta.

Supoñamos certo o resultado para  $0, \dots, n-1$ , e vexamos que se cumpre para  $n$ . Pola definición de desenvolvemento asintótico de orde  $n - 1$ , teríamos

$$\phi_{n-1}(y) = \alpha_0 + \beta_{n-1,n}y^n + \dots + \beta_{n-1,k}y^k + \mathcal{O}(y^{k+1}). \quad (3.16)$$

Ademais,

$$\phi_{n-1}(ry) = \alpha_0 + \beta_{n-1,n}r^n y^n + \dots + \beta_{n-1,k}r^k y^k + \mathcal{O}(y^{k+1}). \quad (3.17)$$

Polo tanto, se facemos unha combinación lineal de ambas expresións multiplicando a primeira por  $r^n$  e restándolla á segunda obtemos

$$\phi_{n-1}(ry) - r^n \phi_{n-1}(y) = \alpha_0(1 - r^n) + \beta_{n-1,n+1}(r^{n+1} - r^n) + \dots + \beta_{n-1,k}(r^k - r^n)y^k + \mathcal{O}(y^{k+1}) \quad (3.18)$$

Dividindo agora a igualdade entre  $1 - r^n$ ,

$$\frac{\phi_{n-1}(ry) - r^n \phi_{n-1}(y)}{1 - r^n} = \alpha_0 + \frac{\beta_{n-1,n+1}(r^{n+1} - r^n) + \dots + \beta_{n-1,k}(r^k - r^n)y^k + \mathcal{O}(y^{k+1})}{1 - r^n}. \quad (3.19)$$

Se definimos  $\phi_n$  como en (3.12)

$$\begin{aligned} \phi_n &= \frac{\phi_{n-1}(ry) - r^n \phi_{n-1}(y)}{1 - r^n} = \\ &\alpha_0 + \frac{\beta_{n-1,n+1}(r^{n+1} - r^n) + \dots + \beta_{n-1,k}(r^k - r^n)y^k + \mathcal{O}(y^{k+1})}{1 - r^n}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

obteriamos o resultado (3.13) definindo  $\beta_n, l$  como en (3.14) □

### 3.1.2. Implementación da extrapolación de Richardson

Dado  $y_0 > 0$ , o valor inicial do paso de discretización, vexamos os pasos a seguir para calcular a aproximación  $\phi_N(y_0)$ , para un certo  $N$  tal que  $1 \leq N \leq k$ .

1. En primeiro lugar calculamos  $\phi_0(y_0) = A(y_0)$ .
2. A partir deste, calculamos  $\phi_1(ry_0) = A(ry_0)$ , tendo en conta que

$$\phi_1(y_0) = \frac{\phi_0(ry_0) - r\phi_0(y_0)}{1 - r}. \quad (3.21)$$

Se  $N = 1$  o proceso xa remataría.

3. Se  $N \geq 2$ , calculamos de forma recursiva en cada paso  $i$  os valores de

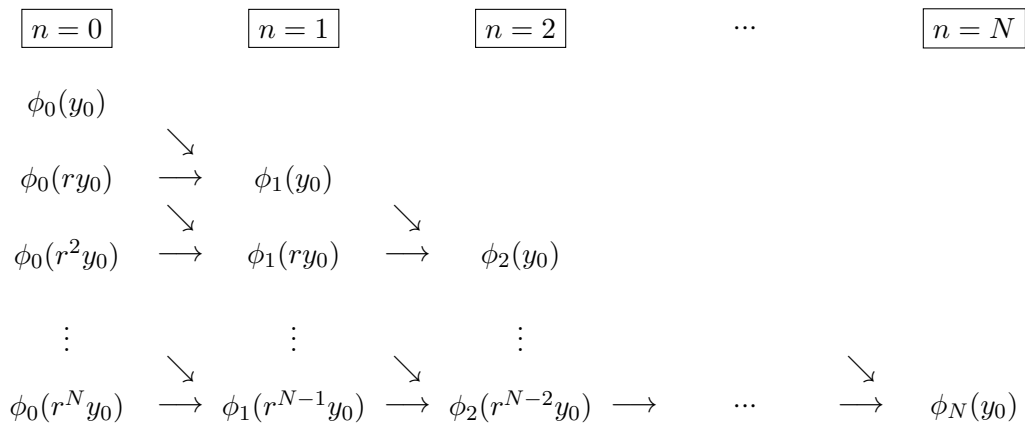
$$\phi_0(r^i y_0) = A(r^i y_0) \quad (3.22)$$

e

$$\phi_j(r^{i-j} y_0) = \frac{\phi_{j-1}(r^{i-j} y_0) - r^j \phi_{j-1}(r^{i-j} y_0)}{1 - r^j} \quad \text{para cada } j = 0, \dots, i. \quad (3.23)$$

Procederíamos deste xeito ata chegar ao paso  $i = N$ , no que remataríamos o proceso.

Para visualizar dito proceso vexamos un esquema do proceso para un  $N > 2$ :



Así, podemos ver que cada elemento calculado serve para calcular o da súa dereita ou o da diagonal, dependendo da situación na que nos atopemos. Para aclarar os cálculos, introdúcese a seguinte notación.

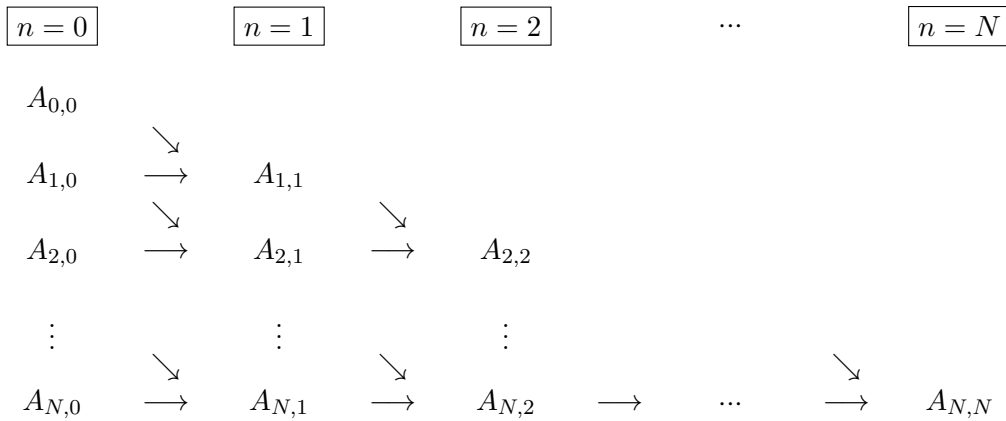
**Definición 3.6.** Definimos para  $n = 0, \dots, N$  e  $m = n, n + 1, \dots, M$

$$A_{m,n} = \phi_n(r^{m-n}y_0). \tag{3.24}$$

*Observación 3.7.* Tendo en conta a definición 3.6 e a ecuación (3.12), podemos escribir

$$A_{m,n} = \phi_n(r^{m-n}y_0) = \frac{\phi_{n-1}(r^{m-n+1}y_0) - r^n \phi_{n-1}(r^{m-n}y_0)}{1 - r^n} = \frac{A_{m,n-1} - r^n A_{m-1,n-1}}{1 - r^n}. \tag{3.25}$$

Con esta última definición podemos redentotar a implementación da extrapolación de Richardson, co seguinte diagrama do proceso:



### 3.2. Polinomios e números de Bernoulli

Co obxectivo de construír as fórmulas de Euler-Maclaurin, que estudaremos na seguinte sección, necesitamos empregar unha familia de polinomios coñecidos como **polinomios de Bernoulli**. Estes polinomios posúen unha serie de propiedades útiles no estudo dos erros das fórmulas de integración numérica, e empregarémolo para dar a expresión do erro na fórmula de Euler-Maclaurin, a cal permite estudar o erro cometido ao aplicar a regra do trapecio composta

**Definición 3.8.** Definimos os **polinomios de Bernoulli**, e denotámolos por  $\hat{B}_k$ , aos polinomios que cumpren as seguintes ecuacións:

$$\hat{B}_0(x) = 1, \tag{3.26}$$

$$\hat{B}_1(x) = x - \frac{1}{2}, \tag{3.27}$$

$$\hat{B}'_i(x) = i\hat{B}_{i-1}(x) \quad i \geq 1, \tag{3.28}$$

$$\hat{B}_{2l+1}(0) = \hat{B}_{2l+1}(1) = 0 \quad l \geq 1. \tag{3.29}$$

### Cálculo dos polinomios de Bernoulli

Vexamos como se calculan os polinomios de Bernoulli. Os polinomios  $\hat{B}_0(x)$  e  $\hat{B}_1(x)$  xa están indicados. Centrémonos agora en calcular os  $\hat{B}_i(x)$  para  $i \geq 2$ , empezamos calculando  $\hat{B}_2$ ,  $\hat{B}_3$ . Pola ecuación (3.28) sabemos que

$$\hat{B}'_2(x) = 2\hat{B}_1(x) = 2x - 1, \quad (3.30)$$

o que, integrando a ambos lados, nos leva a que

$$\hat{B}_2(x) = x^2 - x + k, \quad k \in \mathbb{R}. \quad (3.31)$$

Repetindo o cálculo para  $i = 3$ ,  $\hat{B}_3(x)$ :

$$\hat{B}'_3(x) = 3\hat{B}_2(x) = 3x^2 - 3x + 3k. \quad (3.32)$$

Volvemos a integrar a ambos lados, obtendo

$$\hat{B}_3(x) = x^3 - \frac{3}{2}x^2 + 3kx + k', \quad k, k' \in \mathbb{R}. \quad (3.33)$$

Agora ben, como  $i = 3$  é impar, tomando  $l = 1$  na ecuación (3.29)

$$\hat{B}_3(0) = \hat{B}_3(1) = 0 \iff \begin{cases} k' = 0 \\ 1 - \frac{3}{2} + 3k = 0 \end{cases} \iff \begin{cases} k' = 0 \\ k = \frac{1}{6} \end{cases}. \quad (3.34)$$

En consecuencia, temos as expresións de  $\hat{B}_2$  e  $\hat{B}_3$

$$\hat{B}_2(x) = x^2 - x + \frac{1}{6}, \quad (3.35)$$

$$\hat{B}_3(x) = 3x^3 - \frac{3}{2}x^2 + \frac{1}{2}x. \quad (3.36)$$

Seguindo o proceso anterior de forma recorrente podemos calcular explicitamente calquera dos polinomios de Bernoulli a partir dos polinomios anteriores.

A finalidade dos polinomios de Bernoulli, no noso caso, é o cálculo dos números de Bernoulli, que veremos na seguinte definición.

**Definición 3.9.** Definimos os **números de Bernoulli** como a avaliación en 0 dos polinomios de Bernoulli, é dicir,  $B_i = \hat{B}_i(0)$  con  $i \in \mathbb{N}$ .

*Observación 3.10.* Os números de Bernoulli de índice impar con  $i \geq 3$  son nulos. Isto é evidente pois tense que cumprir a ecuación (3.29).

*Observación 3.11.* Para os polinomios de Bernoulli  $B_i(x)$  con  $i > 1$  cúmprese que

$$B_j(1) = B_j(0) = B_j. \quad (3.37)$$

### 3.3. Fórmula de Euler-Maclaurin

Esta sección tamén se pode atopar en Burden e Faires [10]. Antes de entrar no resultado que nos proporciona a fórmula de Euler-Maclaurin debemos recordar a regra do trapecio composto que xa definimos no exemplo 1.12. Sexa un intervalo limitado  $(a, b)$  non baleiro e definimos unha partición uniforme de  $[a, b]$  de  $n$  nodos con

$$x_i = a + (i - 1)h, \quad i = 1, \dots, n, \quad h = \frac{b - a}{n - 1}. \quad (3.38)$$

Con isto, dada unha integral  $\int_a^b f(x) dx$  obtemos unha aproximación seguindo a seguinte ecuación

$$T(h) \approx \frac{h}{2} \left[ f(a) + \sum_{i=2}^{n-1} f(x_i) + f(b) \right], \quad (3.39)$$

que é a xa mencionada fórmula dos trapecios composta.

**Proposición 3.12** (Fórmula de Euler-Maclaurin). *Sexa  $f \in C^{2k}([a, b])$ ,  $k \in \mathbb{N}$ . Cúmrese a seguinte igualdade, denominada **fórmula de Euler-Maclaurin**:*

$$T(h) = \int_a^b f(x) dx + \sum_{l=1}^{k-1} \frac{B_{2l}}{2l!} h^{2l} [f^{(2l-1)}(b) - f^{(2l-1)}(a)] + \frac{B_{2k}}{2k!} h^{2k} (b - a) f^{(2k)}(\xi), \quad (3.40)$$

para un certo  $\xi \in (a, b)$ , onde os  $B_i$  son os números de Bernoulli.

*Demostración.* Esta demostración será unha xeralización da proposta por Stoer e Bulirsch no terceiro capítulo da súa obra [6]. Pola ecuación (3.28), temos que

$$\hat{B}_n(x) = \frac{1}{n+1} \hat{B}'_{n+1}(x). \quad (3.41)$$

Usamos o Teorema do cambio de variable do cálculo integral, para pasar do intervalo  $[a, b]$  ao intervalo  $[0, 1]$ , mediante a función

$$\varphi(t) = a + (b - a)t \quad \varphi'(t) = b - a, \quad t \in [0, 1]. \quad (3.42)$$

Usando este cambio, obtemos

$$\int_a^b f(x) dx = (b - a) \int_0^1 f(a + (b - a)t) dt = (b - a) \int_0^1 f(a + (b - a)t) \hat{B}_0(t) dt. \quad (3.43)$$

Integrando por partes tomando

$$u = f(a + (b - a)t), \quad dv = \hat{B}_0(t) dt, \quad du = (b - a) f'(a + (b - a)t) dt \quad v = \hat{B}_1(t),$$

e tendo en conta que  $B_1 = 1/2$ , realizamos os seguintes cálculos

$$\begin{aligned}
& (b-a) \int_0^1 f(a+(b-a)t) \hat{B}_0(t) dt = \\
& (b-a) \left[ \hat{B}_1(t) f(a+(b-a)t) \Big|_0^1 - (b-a) \int_0^1 \hat{B}_1(t) f'(a+(b-a)t) dt \right] = \quad (3.44) \\
& = (b-a) \frac{1}{2} [f(b) - f(a)] - (b-a)^2 \int_a^b \hat{B}_1(t) f'(a+(b-a)t) dt.
\end{aligned}$$

A continuación operamos sobre a última integral, integrando por partes de novo, tomando

$$u = f(a+(b-a)t), \quad dv = \hat{B}_1(t) dt, \quad du = (b-a)f'(a+(b-a)t) dt, \quad v = 1/2 \hat{B}_2(t),$$

obtense

$$\begin{aligned}
& (b-a) \frac{1}{2} [f(b) + f(a)] - (b-a)^2 \int_a^b \hat{B}_1(t) f'(a+(b-a)t) dt = \\
& = (b-a) \frac{1}{2} [f(b) + f(a)] - (b-a)^2 \frac{\hat{B}_2(t)}{2} f'(a+(b-a)t) \Big|_0^1 - \\
& \quad - (b-a)^3 \int_a^b \frac{\hat{B}_2(t)}{2} f''(a+(b-a)t) dt = \\
& = (b-a) \frac{1}{2} [f(b) + f(a)] - (b-a)^2 \frac{1}{12} [f'(b) - f'(a)] + \quad (3.45) \\
& \quad + \frac{(b-a)^2}{2} \int_0^1 \hat{B}_2(t) f''(a+(b-a)t) dt = \\
& = (b-a) B_1 [f(b) + f(a)] - (b-a)^2 \frac{B_2}{2} [f'(b) - f'(a)] + \\
& \quad + \frac{(b-a)^3}{2} \int_0^1 \hat{B}_2(t) f''(a+(b-a)t) dt.
\end{aligned}$$

Se repetimos o proceso obtemos

$$\begin{aligned}
& (b-a) B_1 [f(b) + f(a)] - (b-a)^2 \frac{B_2}{2} [f'(b) - f'(a)] + \\
& \quad + \frac{(b-a)^3}{2} \int_0^1 \hat{B}_2(t) f''(a+(b-a)t) dt = \\
& = (b-a) B_1 [f(b) + f(a)] - (b-a)^2 \frac{B_2}{2} [f'(b) - f'(a)] + \quad (3.46) \\
& \quad + \frac{(b-a)^3 B_3}{6} [f''(b) - f''(a)] + \int_0^1 \hat{B}_3(t) f''(a+(b-a)t) dt.
\end{aligned}$$

Pola Observación 3.10, os números de Bernoulli  $B_i$  de índice impar con  $i \geq 3$  son nulos, polo tanto  $B_3 = 0$ . Isto sucede de xeito análogo para os seguintes números der Bernoulli de índice impar polo tanto, as derivadas asociadas a estes termos non interveñen no cálculo das correccións.

Este proceso pódese repetir sucesivamente sempre que a función sexa derivable, é dicir, que

$f \in C^{2k}([a, b])$ . Finalmente, obteriamos

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{2}[f(b) - f(a)] - \sum_{l=1}^n (b-a)^{2l} \frac{B_{2l}}{2l!} [f^{2l-1}(b) - f^{2l-1}(a)] + \frac{(b-a)^{2n}}{2n!} \int_0^1 \hat{B}_{2n}(t) f^{2n}(a + (b-a)t) dt, \quad (3.47)$$

grazas a que como xa dixemos na Observación 3.11,  $\hat{B}_i(1) = \hat{B}_i(0) = B_i$  para  $i > 1$ . O último termo da suma podése expresar como

$$\frac{B_{2n}}{2n!} (b-a)^{2n} [f^{2n-1}(1) - f^{2n-1}(0)] = \frac{B_{2n}}{2n!} (b-a)^{2n} \int_0^1 f^{2n}(a + (b-a)t) dt. \quad (3.48)$$

Entón, se agrupamos este termo coa última expresión da fórmula anterior, obtemos

$$\frac{(b-a)^{2n}}{2n!} \int_0^1 [\hat{B}_{2n}(t) - B_{2n}] f^{2n}(a + (b-a)t) dt. \quad (3.49)$$

Polo Teorema do valor medio para o cálculo integral, podemos asegurar que existe  $\xi \in (a, b)$  tal que

$$\begin{aligned} \frac{(b-a)^{2n}}{2n!} \int_0^1 [\hat{B}_{2n}(t) - B_{2n}] f^{2n}(a + (b-a)t) dt &= \\ &= \frac{(b-a)^{2n}}{2n!} f^{2n}(\xi) \int_0^1 [\hat{B}_{2n}(t) - B_{2n}] dt = \\ &= -\frac{B_{2n}(b-a)^{2n+1}}{2n!} f^{2n}(\xi). \end{aligned} \quad (3.50)$$

A igualdade última igualdad dedúcese de que  $B_{2n}(t) = B'_{2n+1}(t)/(2n+1)$  e  $B_{2n+1}(0) = 0 = B_{2n+1}(1)$ . Polo tanto, desfacendo o cambio de variable, se na fórmula do trapecio composto tomamos  $h = (b-a)/n - 1$ , é dicir  $n = 2$ , polo que estaríamos aplicando o trapecio simple, obteriamos o resultado do enunciado para o trapecio simple

$$\begin{aligned} T(h) = \frac{h}{2}[f(b) + f(a)] &= \int_a^b f(x) dx + \sum_{l=1}^{k-1} \frac{h^{2l} B_{2l}}{2l!} [f^{2l-1}(b) - f^{2l-1}(a)] + \\ &+ \frac{B_{2k} h^{2k}}{2k!} (b-a) f^{2k}(\xi). \end{aligned} \quad (3.51)$$

Para os  $h = \frac{b-a}{n-1}$ , que non sexan trapecio simple teriamos que aplicar a mesma fórmula nos intervalos correspondentes, denotemos  $T_1(h), \dots, T_{n-1}(h)$ , a aplicación da fórmula nos intervalos dados polos nodos equidistantes  $x_1, \dots, x_n$

$$\begin{aligned} T(h) = \sum_{i=1}^{n-1} T_i(h) &= \frac{h}{2}[f(b) + f(a) + 2 \sum_{i=2}^{n-1} f(x_i)] = \\ \sum_{i=1}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) &+ \sum_{l=1}^{k-1} \left( \frac{h^{2l} B_{2l}}{2l!} \sum_{i=1}^{n-1} [f^{2l-1}(x_{i+1}) - f^{2l-1}(x_i)] \right) + \\ &+ \frac{B_{2k} h^{2k}}{2k!} \sum_{i=1}^{n-1} f^{2k}(\xi_i)(x_{i+1} - x_i), \end{aligned} \quad (3.52)$$

con  $\xi_i \in (x_i, x_{i+1})$  para  $i = 1, \dots, n-1$ . Por último, usando unha versión discreta do Segundo teorema do valor medio do cálculo integral, que establece que, se existen  $\xi_1, \dots, \xi_n$  tales que  $\xi_i \in (a_i, b_i)$  entón

$$\sum_{i=1}^n c_i f(\xi_i) = f(\xi) \sum_{i=1}^n c_i, \quad (3.53)$$

para algún  $\xi \in (\min\{a_i, \dots, a_n\}, \max\{b_i, \dots, b_n\})$ . Logo, podemos decir que

$$\frac{h}{2} \int_a^b f(x) + \sum_{i=1}^{k-1} \frac{h^{2l} B_{2l}}{2l!} [f^{2l-1}(b) - f^{2l-1}(a)] + \frac{B_{2k} h^{2k}}{2k!} (b-a) f^{2k}(\xi), \quad (3.54)$$

para algún  $\xi \in (a, b)$ . Polo tanto, cúmprese par calquera cantidade de nodos.  $\square$

*Observación 3.13.* Cando integramos funcións periódicas, sempre que estas sexan o suficientemente suaves, nun intervalo de lonxitude igual ao seu período e aproximamos dita integral aplicando a regra do trapecio composta, obtemos unha orde de converxencia moi alta. Isto explícase a través da fórmula de Euler-Maclaurin, xa que as derivadas da función nos extremos coinciden

$$f^{(l)}(a) = f^{(l)}(b) \quad \forall l \in \mathbb{N}. \quad (3.55)$$

Deste xeito, se observamos a ecuación (3.40), vemos que os termos de corrección asócianse a diferenzas das derivadas de orde impar nos extremos

$$\sum_{l=1}^{k-1} \frac{B_{2l}}{2l!} h^{2l} [f^{2l-1}(b) - f^{2l-1}(a)] = 0. \quad (3.56)$$

En consecuencia, a aproximación mellora a orde ata  $\mathcal{O}(h^{2k})$ .

### 3.4. Método de Romberg

Nesta sección traballaremos, se  $f \in C^2([a, b])$ , a partir do trapecio composto que nos garante unha orde de converxencia de  $\mathcal{O}(h^2)$  e buscaremos o xeito de mellorar a orde a través do método de Romberg. Usando a fórmula de Euler-Maclaurin vista na Proposición 3.12, podemos expresar para unha función  $f \in C^{2k}([a, b])$  a fórmula do trapecio composto como

$$T(h) = \int_a^b f(x) dx + \sum_{l=1}^{k-1} \alpha_l h^{2l} + \mathcal{O}(h^{2k}), \quad (3.57)$$

onde

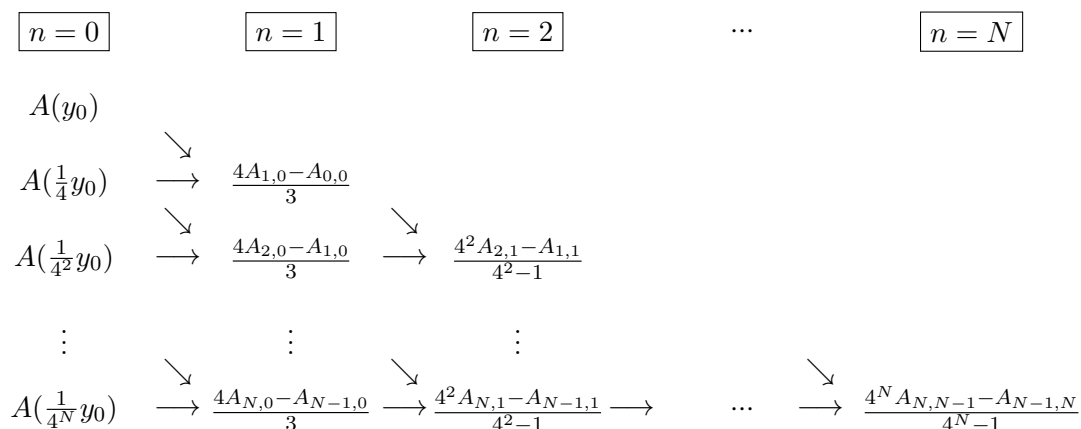
$$\alpha_l = \frac{B_{2l}}{2l!} [f^{2l-1}(b) - f^{2l-1}(a)] \quad l = 1, \dots, k-1. \quad (3.58)$$

Se denotamos como  $\alpha_0 = \int_a^b f(x) dx$ ,  $y = h^2$  e  $A(y) = T(h)$ , temos un desenvolvemento asintótico como o visto na definición 3.2:

$$T(h) = A(y) = \alpha_0 + \alpha_1 y + \dots + \alpha_k y^{k-1} + \mathcal{O}(y^{2k}). \quad (3.59)$$

Polo tanto, temos un desenvolvemento asintótico que nos permite empregar o método de extrapolación de Richardson, visto na sección anterior, para aproximar o  $\alpha_0$ , é dicir, para aproximar o valor da integral.

Tomaremos inicialmente un paso  $h_0 = (b - a)/n_0$ , con  $n_0 \in \mathbb{N}$  (normalmente tómase  $n_0 = 1$ ) para iniciar co trapecio simple e eliximos un  $r = 1/4$  para subdividir cada subintervalo entre dous, xa que  $y = h^2$ . Vexamos como é o proceso esquematicamente se empezamos con  $n_0 = 1$ :



### 3.5. Programación do método de Romberg

Para programar este método empregaremos dous *scripts*. O primeiro calcula a primeira columna do esquema do método de Romberg, aplicando a regra do trapecio composta para os distintos valores de  $h$ . O segundo é o programa principal, no que se chama á función mencionada e ademais constrúe a recurrencia do método. Ambos *scripts* recóllense no Anexo A.11 (programa principal) e no Anexo A.12 (función dos trapecios compostos). A continuación, introducimos un exemplo construindo o esquema paso a paso, e despois unha táboa que reflicte o erro dependendo do número de niveis. En todos os exemplos empréganse  $n_0 = 1$  e  $r = 1/4$ .

**Exemplo 3.14.** Aproximamos a integral da función  $f(x) = \cos(x) \exp(x + 1) \ln(x/2)$  en  $[2, 5]$  usando cinco niveis. Sabemos que o valor da integral é  $-\sinh(\pi)$ . Vexamos como decrece o erro.

| 1         | 2          | 3          | 4          | 5                   |
|-----------|------------|------------|------------|---------------------|
| -72.83439 |            |            |            |                     |
| -33.27560 | -20.08933  |            |            |                     |
| -16.63780 | -11.091867 | -10.492036 |            |                     |
| -12.75972 | -11.467027 | -11.492038 | -11.50791  |                     |
| -11.84708 | -11.542867 | -11.547923 | -11.548810 | -11.548970639574124 |

Cadro 3.1: Método de Romberg para aproximar  $\int_2^5 \cos x \exp(x+1) \ln(x/2) dx$

Con esta táboa podemos ver que usando só cinco niveis obtemos un erro de  $2.3128 \times 10^{-4}$ . Ademais podemos apreciar o decrecemento do erro fixándonos nos valores da diagonal da táboa, que serían os valores se empregamos a cantidade de niveis correspondente. Agora facemos outra pequena táboa na que só mostraremos os erros con distinta cantidade de niveis.

| Nivel | 5                       | 6                       | 7                         | 8                         | 9                         |
|-------|-------------------------|-------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| Erro  | $2.3128 \times 10^{-4}$ | $6.2853 \times 10^{-7}$ | $-2.1904 \times 10^{-10}$ | $-3.5765 \times 10^{-14}$ | $-3.7913 \times 10^{-15}$ |

Cadro 3.2: Erros da aproximación de  $\int_2^5 \cos x \exp(x+1) \ln(x/2) dx$  dependendo da cantidade de niveis.

**Exemplo 3.15.** Neste exemplo traballamos cunha función periódica, do mesmo xeito que fixemos anteriormente coa fórmula de Gauss. En particular, consideraremos de novo a función

$$f(x) = \exp(\cos(x)) \quad (3.60)$$

no intervalo  $[-\pi, \pi]$ . Volvemos a usar o método de Romberg con cinco niveis e con  $n_0 = 1$ . As conclusións que queremos resaltar obsérvanse claramente ao analizar a táboa que constrúe o método.

| 1                        | 2                  | 3             | 4             | 5                        |
|--------------------------|--------------------|---------------|---------------|--------------------------|
| 2.311454699581843        |                    |               |               |                          |
| 9.695461572464490        | 12.1567            |               |               |                          |
| <b>7.989323439822038</b> | <b>7.4206</b>      | <b>7.1048</b> |               |                          |
| <b>7.954927772701779</b> | <b>7.9434</b>      | <b>7.9783</b> | <b>7.9921</b> |                          |
| <b>7.954926521012847</b> | <b>7.954926103</b> | <b>7.9556</b> | <b>7.9553</b> | <b>7.955186630462124</b> |

Cadro 3.3: Método de Romberg para a aproximar  $\int_{-\pi}^{\pi} \exp(\cos(x))$

Podemos ver que pasa algo que xa se anticipou na Sección 2.4.1. A regra dos trapecios composta, que vemos reflexada na primeira columna, resulta moi eficiente para aproximar funcións

periódicas cando integramos nun intervalo de lonxitude o seu período como xa vimos na observación 3.13. En cambio, ao aplicar o método de Romberg, pérdese esta converxencia ao operar cos valores resultantes do primer nivel. En consecuencia, non sería óptimo aplicar este método cando nos atopemos con situacións deste tipo.



## Capítulo 4

# Algunhas fórmulas de Newton-Cotes compostas con correccións extremais

O obxectivo de este capítulo é modificar a regra do trapezio composta e a regra de Simpson composta co fin de obter unha mellor aproximación. As modificacións realizaranse sabendo o valor dunhas certas derivadas nos extremos dos intervalos. O capítulo divídese en dúas seccións, unha primeira sección que estuda a regra do trapezio composta definida no exemplo 1.12 e outra que realiza o mesmo proceso sobre a regra de Simpson composta, que definiremos ao comezo da sección.

### 4.1. Correccións extremais na regra do trapezio composta

Antes de comezar recordemos a fórmula do trapezio composta vista no capítulo anterior na ecuación (3.39). Sexan  $(a, b)$  un intervalo limitado non baleiro e a partición uniforme

$$x_i = a + (i - 1)h, \quad i = 1, \dots, n, \quad h = \frac{b - a}{n - 1}. \quad (4.1)$$

A regra do trapezio composta considera a seguinte aproximación de  $\int_a^b f(x) dx$

$$T(h) = \frac{h}{2} \left[ f(a) + \sum_{i=2}^{n-1} f(x_i) + f(b) \right]. \quad (4.2)$$

Esta sección apóiase a fórmula de Euler-Maclaurin, que definimos na Proposición 3.12. Recordemos a expresión: sexa  $f \in C^{2k}([a, b])$ , con  $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ , entón para un certo  $\xi \in (a, b)$ , cúmprese que

$$T(h) = \int_a^b f(x) dx + \sum_{l=1}^{k-1} \frac{B_{2l}}{2l!} h^{2l} [f^{2l-1}(b) - f^{2l-1}(a)] + \frac{B_{2k}}{2k!} h^{2k} (b - a) f^{2k}(\xi), \quad (4.3)$$

onde os  $B_i$  son os números de Bernoulli. De forma natural proporcionáanos unha aproximación de orde 2. Non obstante, nesta sección buscaremos crear fórmulas de orde superior evaluando as derivadas impares nos extremos do intervalo de integración, aumentando en dous o orde de converxencia por cada derivada que coñezamos. Vexamos a construción deste proceso.

Sexa unha función  $f \in C^{2k}[(a, b)]$ , con  $k \geq 1$ . Ademais, supoñamos que coñecemos o valor da derivada da función nos extremos, é dicir,  $f'(a)$  e  $f'(b)$ . Con isto, podemos expresar a ecuación (4.3) como

$$\begin{aligned} T(h) - \frac{B_2}{2} h^2 [f'(b) - f'(a)] &= \\ &= \int_a^b f(x) dx + \sum_{l=2}^{k-1} \frac{B_{2l}}{2l!} h^{2l} [f^{(2l-1)}(b) - f^{(2l-1)}(a)] + \frac{B_{2k}}{2k!} h^{2k} (b-a) f^{(2k)}(\xi) = \\ &= \int_a^b f(x) dx + \mathcal{O}(h^4). \end{aligned} \tag{4.4}$$

Como podemos apreciar, pasamos de ter unha aproximación de orde dous a unha aproximación de orde catro. Se aplicamos este proceso consecutivamente obteriamos unha aproximación de orde  $2k$ . É dicir, se sabemos o valor de  $f^{(2l-1)}(a)$  e  $f^{(2l-1)}(b)$  para  $l = 1, \dots, k-1$ , podemos despxear na ecuación (4.3) o sumatorio para obter a expresión

$$\begin{aligned} T(h) - \sum_{l=1}^{k-1} \frac{B_{2l}}{2l!} h^{2l} [f^{(2l-1)}(b) - f^{(2l-1)}(a)] &= \int_a^b f(x) dx + \frac{B_{2k}}{2k!} h^{2k} (b-a) f^{(2k)}(\xi) = \\ &= \int_a^b f(x) dx + \mathcal{O}(h^{2k}), \end{aligned} \tag{4.5}$$

para un  $\xi \in (a, b)$ . Como os números de Bernoulli son coñecidos, teremos unha aproximación de orde  $2k$ .

*Observación 4.1.* Se nos fixamos na ecuación (4.5), podemos observar que o erro da fórmula de cuadratura é

$$\frac{B_{2k}}{2k!} h^{2k} (b-a) f^{(2k)}(\xi) \tag{4.6}$$

para un  $\xi \in (a, b)$ . Agora ben, no caso concreto de querer aproximar a integral dun polinomio, podemos dar o seu valor exacto se sabemos a cantidade necesaria de valores das derivadas nos extremos, pois a partir dun certo índice, a derivada é nula en calquera punto do intervalo. Sexa  $p$  un polinomio de grao  $n$ , entón para dar o valor exacto usando este método necesitamos saber o valor das derivadas de orde impar, dende a primeira ata a  $n$ -ésima, nos extremos do intervalo.

**Exemplo 4.2.** Neste exemplo representáase a expresión de dúas aproximacións dunha integral nun intervalo limitado. Supoñamos primeiro que temos unha función  $f \in C^4([a, b])$  e ademais

sabemos os valores da derivada nos extremos. Entón como sabemos que  $B_1 = 1/6$ ,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= T(h) - \frac{h^2 B_2}{2} (f'(b) - f'(a)) + \mathcal{O}(h^4) = \\ &= T(h) + \frac{h^2}{12} (f'(b) - f'(a)) + \mathcal{O}(h^4) = T_4(h) + \mathcal{O}(h^4), \end{aligned} \quad (4.7)$$

denotando  $T_4(h)$  a aproximación de orde 4 obtida seguindo o proceso descrito anteriormente. Supoñamos agora que  $f \in C^6([a, b])$  e, ademais, que sabemos o valor da primeira e da terceira derivada nos extremos. Entón sabendo que  $B_2 = -1/30$  e denotando por  $T_6(h)$  a aproximación de orde 6, temos que

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= T(h) - \frac{h^2 B_2}{2} (f'(b) - f'(a)) - \frac{h^4 B_4}{24} (f'''(b) - f'''(a)) + \mathcal{O}(h^6) = \\ &= T_4(h) + \frac{h^4}{720} (f'''(b) - f'''(a)) + \mathcal{O}(h^6) = T_6(h) + \mathcal{O}(h^6). \end{aligned} \quad (4.8)$$

#### 4.1.1. Implementación das correccións extremas para a regra do trapezio composta

Neste apartado implementamos as correccións extremas usando Matlab. Estudamos como se comporta o erro en función do número de derivadas coñecidas nos extremos do intervalo. Para a implementación do método desenvolvemos dous *scripts*, un que actúa como programa principal e, no que se constrúe o método, pódese ver no Anexo A.13. E ademais, unha función encargada de calcular a aproximación coa regra do trapezio composta e, pódese consultar en Anexo A.14. Vexamos un par de exemplos.

**Exemplo 4.3.** Para este exemplo imos a tomar a función periódica

$$f(x) = \exp(\sin x) \quad (4.9)$$

en  $[0, 1]$ . Destacamos que o seu valor é 1.63186960841805, que obteremos integrando simbólicamente en matlab, usando a función *int()*. Co obxectivo de analizar o comportamento do erro, realizamos tres táboas diferentes que cambia n segundo a información das derivadas nos extremos. Na primeira estudamos a orde de decrecemento do erro en función do número de nodos que emprega a regra de Trapezio composta, coñecendo só o valor da primeira derivada nos extremos.

| Número de nodos | Valor da integral aproximada | Erro                     |
|-----------------|------------------------------|--------------------------|
| 2               | <b>1.632238588410558</b>     | $-3.689 \times 10^{-4}$  |
| 20              | <b>1.631869643604053</b>     | $-3.518 \times 10^{-8}$  |
| 200             | <b>1.631869608421569</b>     | $-3.517 \times 10^{-12}$ |
| 1000            | <b>1.631869608418066</b>     | $-5.934 \times 10^{-15}$ |

Cadro 4.1: Correccións extremas coñecendo a primeira derivada nos extremos.

Se analizamos os resultados, observamos que cada vez que multiplicamos por dez o número de nodos, o expoñente do erro diminúe en catro. Se nos fixamos na fórmula (4.7) teriamos a seguinte aproximación

$$\int_a^b f(x) dx = T(h) - \frac{h^2 B_2}{2} (f'(b) - f'(a)) + \mathcal{O}(h^4), \quad (4.10)$$

confirmando a orde de decrecemento de  $h^4$ . Agora imos comparar o mesmo método, pero neste caso coñecendo o valor da primeira e da terceira derivada nos extremos.

| Número de nodos | Valor da integral aproximada | Erro                     |
|-----------------|------------------------------|--------------------------|
| 2               | <b>1.631886892555461</b>     | $-1.728 \times 10^{-5}$  |
| 20              | <b>1.631869608434468</b>     | $-1.641 \times 10^{-11}$ |
| 200             | <b>1.631869608418052</b>     | $-3.832 \times 10^{-16}$ |

Cadro 4.2: Correccións extremas coñecendo a primeira e terceira derivada nos extremos.

Agora, vemos que o erro é orde 6. Se escribimos a aproximación teórica (4.8) correspondente a esta táboa

$$\int_a^b f(x) dx = T_4(h) + \frac{h^4}{720} (f'''(b) - f'''(a)) + \mathcal{O}(h^6), \quad (4.11)$$

podemos confirmar a nosa percepción sobre a orde de decrecemento do erro. Por último, e para ilustrar o potencial deste método, realizamos a fórmula coñecendo o valor da primeira, terceira e quinta derivada nos extremos.

| Número de nodos | Valor da integral aproximada | Erro                     |
|-----------------|------------------------------|--------------------------|
| 2               | <b>1.631870484817713</b>     | $-8.763 \times 10^{-7}$  |
| 20              | <b>1.631869608418052</b>     | $-8.598 \times 10^{-15}$ |

Cadro 4.3: Correccións extremas coñecendo a primeira, terceira e quinta derivada nos extremos.

Nesta última táboa podemos apreciar que orde do erro é de  $\mathcal{O}(h^8)$ , tal e como indica a aproximación teórica obtida en (4.5) para  $k = 4$

$$\int_a^b f(x) dx = T_6(h) - \frac{h^6 B_6}{6!} (f^{(5)}(b) - f^{(5)}(a)) + \mathcal{O}(h^8). \quad (4.12)$$

En conclusión, vemos que canta máis información sobre as derivadas teñamos da función podemos crear mellores métodos de aproximación.

## 4.2. Correccións extremas na regra de Simpson composta

Nesta sección trateremos, ao igual que para a regra do trapecio composta, de obter as correccións extremas da regra de Simpson composta. Primeiro, deduciremos a fórmula de Simpson

para despois traballar sobre ela. O estudo da regra de Simpson recóllese no capítulo 4 de Burden e Faires [9]

### 4.2.1. Regra de Simpson

A **regra de Simpson simple** consiste en aproximar  $\int_a^b f(x) dx$  pola integral dun polinomio cuadrático que pase polo valor da función nos extremos e no punto medio do intervalo de integración. Polo tanto, os nodos da fórmula son  $x_1 = a$ ,  $x_2 = (b + a)/2$  e  $x_3 = b$ . Consideremos o desenvolvemento en serie de Taylor de orde 3 de  $f$  arredor de  $x_2$ . Entón, para cada  $x \in [a, b]$ , existe  $\xi(x) \in [a, b]$  tal que

$$f(x) = f(x_2) + f'(x_2)(x - x_2) + \frac{f''(x_2)}{2}(x - x_2)^2 + \frac{f'''(x_2)}{6}(x - x_2)^3 + \frac{f^{(4)}(\xi(x))}{24}(x - x_2)^4. \quad (4.13)$$

Se substituímos o desenvolvemento de Taylor anterior e integramos obtemos

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_a^b f(x_2) + \int_a^b f'(x_2)(x - x_2) + \int_a^b \frac{f''(x_2)}{2}(x - x_2)^2 + \int_a^b \frac{f'''(x_2)}{6}(x - x_2)^3 + \\ &\quad + \frac{1}{24} \int_a^b f^{(4)}(\xi(x))(x - x_2)^4 dx = \\ &= \left[ f(x_2)x + f'(x_2)\frac{(x - x_2)^2}{2} + \frac{f''(x_2)}{6}(x - x_2)^3 + \frac{f'''(x_2)}{24}(x - x_2)^4 \right] \Big|_a^b + \\ &\quad + \frac{1}{24} \int_a^b f^{(4)}(\xi(x))(x - x_2)^4 dx. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Como  $(x - x_2)^4$  nunca é negativo en  $[a, b]$ , o Segundo teorema do valor medio do cálculo integral implica que

$$\frac{1}{24} \int_a^b f^{(4)}(\xi(x))(x - x_2)^4 dx = \frac{f^{(4)}(\xi_1)}{24} \int_a^b (x - x_2)^4 dx = \frac{f^{(4)}(\xi_1)}{120} (x - x_2)^5 \Big|_a^b, \quad (4.15)$$

para algún  $\xi_1 \in (a, b)$ . Como  $h = x_3 - x_2 = x_2 - x_1$  temos que

$$(x_3 - x_2)^2 - (x_1 - x_2)^2 = (x_3 - x_2)^4 - (x_1 - x_2)^4 = 0, \quad (4.16)$$

mentras que

$$(x_3 - x_1)^3 - (x_1 - x_2)^3 = 2h^3 \quad e \quad (x_3 - x_2)^5 - (x_1 - x_2)^5 = 2h^5 \quad (4.17)$$

Polo tanto, a ecuación (4.14) pódese reescribir como

$$\int_a^b f(x) dx = 2hf(x_2) + \frac{h^3}{3}f''(x_2) + \frac{h^5}{60}f^{(4)}(\xi_1). \quad (4.18)$$

Agora, se aplicamos a fórmula do punto medio da segunda derivada dada pola expresión

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}[f(x_0 - h) - 2f(x_0) + f(x_0 + h)] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi), \quad (4.19)$$

para un  $\xi \in [x_0 - h, x_0 + h]$ . Aplicando esta fórmula na ecuación (4.18) temos que

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= 2hf(x_1) + \frac{h^3}{3} \left[ \frac{1}{h^2}[f(x_1) - 2f(x_2) + f(x_3)] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_2) \right] + \frac{h^5}{60}f^{(4)}(\xi_1) = \\ &= \frac{h^3}{3}[f(x_1) + 4f(x_2) + f(x_3)] - \frac{h^5}{12} \left[ \frac{1}{3}f^{(4)}(\xi_2) - \frac{1}{5}f^{(4)}(\xi_1) \right] \end{aligned} \quad (4.20)$$

para un  $\xi_1, \xi_2 \in (a, b)$ . Usando unha versión discreta do Segundo teorema do valor medio do cálculo integral, definida na ecuación (3.53), e tendo en conta que  $h = (b - a)/2$  podemos escribir a ecuación (4.20) como

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b - a}{6} [f(x_1) + 4f(x_2) + f(x_3)] - \frac{(b - a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi), \quad (4.21)$$

para algún  $\xi \in (a, b)$ .

Para construír a **regra de Simpson composta** debemos seleccionar un número impar de nodos, pois dividiremos o intervalo de integración nun número par de subintervalos. Necesitamos que o número de intervalo sexa par xa que aplicaremos a regra de Simpson simple en cada par consecutivo de intervalos, como podemos ver representado por cores no seguinte grafo

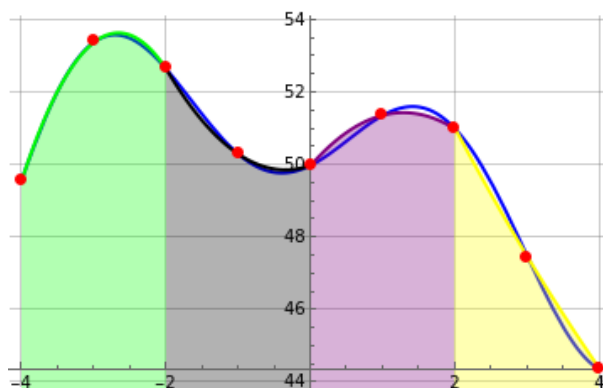


Figura 4.1: Representación gráfica regra de Simpson composta

Temos que o valor de  $h$  é  $h = (b - a)/(n - 1)$ , entón  $x_j = a + (j - 1)h$ , con  $j = 1, \dots, n$ . Polo tanto, aplicamos a regra de Simpson simple  $(n - 1)/2$  veces, pois como xa dixemos, empregámola cada dous subintervalos. Polo tanto, sexa  $f \in C^k([a, b])$  con  $k \geq 4$ , dividimos a integral no intervalo  $[a, b]$  en sumas de integrais nos subintervalos  $[x_{2j-1}, x_{2j+1}]$  con  $j = 1, \dots, (n - 1)/2 - 1$ ,

aplicando en cada un a regra do trapezio simple

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \sum_{j=1}^{(n-1)/2} \int_{x_{2j-1}}^{x_{2j+1}} f(x) dx = \\ &= \sum_{j=1}^{(n-1)/2} \left[ \frac{h}{3} [f(x_{2j-1}) + 4f(x_{2j}) + f(x_{2j+1})] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi_j) \right], \end{aligned} \quad (4.22)$$

para algúns  $\xi_j \in [x_{2j-1}, x_{2j+1}]$ . Tendo en conta que os extremos de cada subintervalo  $[x_{2j-1}, x_{2j+1}]$  con  $j = 2, \dots, (n-3)/2$ , son nodos para dous intervalos de integración, podemos simplificar a fórmula anterior

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left[ f(a) + f(b) + 2 \sum_{j=1}^{(n-1)/2-1} f(x_{2j+1}) + 4 \sum_{j=1}^{(n-1)/2} f(x_{2j}) \right] - \frac{h^5}{90} \sum_{j=1}^{(n-1)/2} f^{(4)}(\xi_j) \quad (4.23)$$

para algúns  $\xi_j \in [x_{2j-1}, x_{2j+1}]$ . Por último, aplicando de novo a ecuación (3.53) obtemos que

$$\sum_{i=1}^{(n-1)/2} \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi_i) = \frac{h^5}{180} (n-1) f^{(4)}(\xi) \quad (4.24)$$

para algún  $\xi \in [a, b]$ . Como  $h = (b-a)/(n-1)$ ,

$$E(f) = -\frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\xi). \quad (4.25)$$

*Observación 4.4.* O termo de erro para a regra de Simpson composta é  $\mathcal{O}(h^4)$ , mentras que para a regra simple era  $\mathcal{O}(h^5)$ . Non obstante, estes índices non son comparables xa que na regra simple o valor de  $h$  é constante, mentras que para a regra composta depende do número de nodos que decidamos implementar, polo que podemos obter un erro moito menor.

#### 4.2.2. Correccións extremas

Unha vez vistas as regras de Simpson simple e composta, vexamos como podemos obter unha orde maior ao igual ca fixemos coa regra do trapezio composta coñecendo os valores das derivadas nos extremos. Sexa unha función  $f \in C^k([a, b])$  con  $k \geq 4$ , estudemos como se pode mellorar o erro.

Salgado e Steven establecen e demostran no capítulo 14 de [1] o seguinte Teorema

**Teorema 4.5** (Fórmula de Euler-Maclaurin para a regra de Simpson composta). *Supoñamos  $k, n \in \mathbb{N}$ , send  $n$  un número impar maior que 1, e  $f$  unha función tal que  $f \in C^{2k+2}([a, b])$ . Se definimos*

$$h = \frac{b-a}{n-1}. \quad (4.26)$$

Entón

$$E_n(f) = - \sum_{j=2}^k \frac{4 - 2^{2j}}{3} \frac{B_{2j} h^{2j}}{(2j)!} \left[ f^{2j-1}(b) - f^{2j-1}(a) \right] - \frac{4 - 2^{2k+2}}{3} \frac{B_{2k+2} h^{2k+2}}{(2k+2)!} (d-c) f^{2k+2}(\eta) \quad (4.27)$$

para algún  $\eta \in [a, b]$ .

**Exemplo 4.6.** Calculemos a fórmula que aproxime mediante a regra de Simpson composta e as correccións extremais unha aproximación de orde 6 e 8, que denoaremos por  $S_6(h)$  e  $S_8(h)$  respectivamente. Sexa entón  $f \in C^8([a, b])$ , calculemos primeiro os números de Bernoulli  $B_4$  e  $B_6$ . A expresión dos polinomios de Bernoulli correspondentes é

$$\hat{B}_4(x) = x^4 - 2x^3 + x^2 - \frac{1}{30}, \quad (4.28)$$

$$\hat{B}_6(x) = x^6 - 3x^5 + \frac{5}{2}x^4 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{42}, \quad (4.29)$$

polo que, os números de Bernoulli toman os valores

$$B_4 = -\frac{1}{30}, \quad (4.30)$$

$$B_6 = \frac{1}{42}. \quad (4.31)$$

Polo tanto, a regra de cuadratura de orde 6 asociada á regra de Simpson composta con correccións extremais é

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \frac{h}{3} \left[ f(a) + f(b) + 2 \sum_{j=1}^{(n-1)/2-1} f(x_{2j+1}) + 4 \sum_{j=1}^{(n-1)/2} f(x_{2j}) \right] + \\ &\quad + \frac{4 - 2^4}{3} \frac{h^4}{4! \cdot 30} (f^3(b) - f^3(a)) + \mathcal{O}(h^6) = \\ &= \frac{h}{3} \left[ f(a) + f(b) + 2 \sum_{j=1}^{(n-1)/2-1} f(x_{2j+1}) + 4 \sum_{j=1}^{(n-1)/2} f(x_{2j}) \right] - \\ &\quad - \frac{h^4}{180} (f^3(b) - f^3(a)) + \mathcal{O}(h^6) = S_6(h) + \mathcal{O}(h^6). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Análogamente, a regra de orde 8 é

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= S_6(h) - \frac{4 - 2^6}{3} \frac{h^6}{6! \cdot 42} [f^5(b) - f^5(a)] + \mathcal{O}(h^8) = \\ &= S_6(h) + \frac{h^6}{1512} [f^5(b) - f^5(a)] + \mathcal{O}(h^8) = S_8(h) + \mathcal{O}(h^8). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Entón, sabendo o valor da terceira e quinta derivada nos extremos podemos dar unha aproximación de orde 8.

### 4.2.3. Programación das correccións extremas para a regra de Simpson composta

Nesta última sección implementamos, como xa fixemos coa regra do trapecio composta, as correccións extremas, e estudamos o comportamento do erro. Para iso, contamos con dous *scripts*, un que, ademais de ser o programa principal, calcule as correccións extremas e outro que se encarge de calcular as aproximacións empregando a regra de Simpson composta. Os *scripts* pódense consultar no Anexo A.15 o programa principal e no Anexo A.16 a función que implementa a regra de Simpson.

**Exemplo 4.7.** Para este exemplo empregaremos a función

$$f(x) = \operatorname{sen}\left(\frac{1}{x}\right) \quad (4.34)$$

en  $[\pi/3, 2\pi/3]$ , mediante cálculo simbólico en Matlab obtemos que o valor da integral aproximando por truncamento é 0.6377536774018180. Faremos dúas táboas diferentes, unha na que aplicaremos a regra de Simpson composta con correccións extremas de orde 6 e outra de orde 8.

Compre destacar que a orde da fórmula é respecto o parámetro  $h$  non ao número de nodos. Entón, se queremos ver o número de nodos que debemos empregar para visualizar o resultado esperado debemos despregalo da variación do valor de  $h$ . Supoñamos que queremos dividir o valor de  $h$  entre 10, entón o valor inicial de  $h$  é

$$h_1 = \frac{b-a}{n-1}, \quad (4.35)$$

e o seguinte valor a tomar

$$h_2 = \frac{h_1}{10} = \frac{b-a}{10(n-1)} = \frac{b-a}{10n-10}. \quad (4.36)$$

Polo tanto, se supoñemos que para o primer calculo empregamos 3 nodos, é dicir, aplicar a regra de Simpson simple, e denotando por  $n_2$  o número de nodos utilizados para o novo valor de  $h$ , obtemos a cantidade de nodos que necesitamos empregar

$$h_1 = \frac{b-a}{2} \implies h_2 = \frac{b-a}{20} \iff \frac{b-a}{20} = \frac{b-a}{n_2-1} \iff n_2 = 21. \quad (4.37)$$

Para realizar a aproximación de orde 6, necesitamos coñecer o valor da terceira derivada nos extremos da función, e obtemos a seguinte táboa de erros:

| Número de nodos | Valor da aproximada      | Erro                     |
|-----------------|--------------------------|--------------------------|
| 3               | <b>0.638381387363309</b> | $6.277 \times 10^{-4}$   |
| 21              | <b>0.637753679092562</b> | $-1.690 \times 10^{-9}$  |
| 201             | <b>0.637753677401819</b> | $-1.247 \times 10^{-15}$ |

Cadro 4.4: Correccións extremas coñecendo a primeira derivada nos extremos.

Na táboa podemos apreciar un erro de orde  $\mathcal{O}(h^6)$ , o cal está explicado no exemplo 4.6, e segue a fórmula

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left[ f(a) + f(b) + 2 \sum_{j=1}^{(n-1)/2-1} f(x_{2j+1}) + 4 \sum_{j=1}^{(n-1)/2} f(x_{2j}) \right] - \frac{h^4}{45} (f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)) + \mathcal{O}(h^6) \quad (4.38)$$

Se queremos realizar unha fórmula de orde 8, debemos coñecer o valor da terceira e quinta derivada nos extremos do intervalo de integración. Obtemos a seguinte táboa de erros

| Número de nodos | Valor da aproximada      | Erro                    |
|-----------------|--------------------------|-------------------------|
| 3               | <b>0.636658182548037</b> | $1.095 \times 10^{-3}$  |
| 21              | <b>0.637753677369358</b> | $3.246 \times 10^{-11}$ |
| 201             | <b>0.637753677401817</b> | $5.291 \times 10^{-16}$ |

Cadro 4.5: Correccións extremas coñecendo a primeira derivada nos extremos.

Nesta última táboa podemos observar un erro de orde 8, que coincide co comportamento teórico visto no exemplo 4.6, que establece que a fórmula empregada é

$$\int_a^b f(x) dx = S_6(h) + \frac{h^6}{1512} [f^{(5)}(b) - f^{(5)}(a)] + \mathcal{O}(h^8). \quad (4.39)$$

Para concluír podemos dicir que, ao igual que co trapecio composto, o coñecemento do valor das derivadas impares (excepto a primeira) nos extremos apórtannos moita información, e permítenos estudar o erro das integrais con maior precisión.

## Anexo A

# Programación dos métodos de cuadratura

Listing A.1: Programa principal do método de Gauss en  $(-1, 1)$

```
1 clear all
2 format long
3 n=5;
4 syms x
5
6 % Funci n :
7 f=@(x) cos(x);
8
9
10 % Valor da integral
11 Iex=vpa(int(f,x,-1,1),40)
12
13 # Gauss
14 [I,x,w]=gauss(f,n)
15
16 % Erro
17 e = vpa(Iex-I,16)
18
19 %Representaci n gr fica
20 grafo(x,f,n,w)
```

Listing A.2: Método de Gauss para o intervalo  $(-1, 1)$

```

1  function [I,x,w] = gauss(f,n) % (n+1)-pt Gauss quadrature of f
2  beta = .5./sqrt(1-(2*(1:(n)).^(-2))); % 3-term recurrence coeffs
3  T = diag(beta,1) + diag(beta,-1); % Matriz Jacobiana
4  [V,D] = eig(T); % Descomposición de autovalores e autovectores
5  x = diag(D); [x,i] = sort(x); % nodos
6  w = 2 * V(1,i).^2; % Coeficiente de Christoffel
7  I = w*feval(f,x);

```

Listing A.3: Representación gráfica do método de Gauss en  $(-1,1)$ 

```

1  function grafo(x,f,n,w)
2  x_plot = linspace(-1,1,1000); % Creamos un vector de moitos
   puntos para pintar a función f sobre eles
3  y_plot = arrayfun(f, x_plot); % Avaliar f nos puntos elexidos
4
5  % Graficamos a función
6  figure;
7  plot(x_plot, y_plot, 'b', 'LineWidth', 2); hold on; % Línea
   azul para f(x)
8
9  % Graficar os nodos
10 y_nodos = arrayfun(f, x); % Avaliar f en los nodos
11
12 line(x, y_nodos, 'Color', 'r', 'LineStyle', 'none', 'Marker', '
   o', 'MarkerSize', 10); % pintamos os nodos avaliados
13
14 mu=-1;
15 for i = 1:n
16     % Debuxar a línea que conecta o nodo co seu valor en f(x)
17     line([x(i), x(i)], [0, y_nodos(i)], 'Color', 'black', '
   LineStyle', '--', 'LineWidth', 1.5);
18
19     %Rectángulos
20     patch([mu,mu+w(i),mu+w(i),mu], ...
21           [0, 0, y_nodos(i), y_nodos(i)], ... % Base sobre el eje
   x
22           [0.5, 0.7, 1], 'EdgeColor', 'black', 'LineWidth', 2, '
   FaceAlpha', 0.5); % Transparente)

```

```

23     mu=mu+w(i);
24     end
25
26     xlabel('x'); ylabel('f(x)');
27     title(sprintf('Cuadratura de Gauss con %d nodos', n+1));
28     legend('f(x)', 'Nodos de Gauss');
29     grid on; hold off;
30
31     xlim([-1, 1]); % Limitar el eje x a [-1, 1]
32     ylim([min(y_plot), max(y_plot)]);
33 end

```

Listing A.4: Programa principal do método de Gauss en (a,b)

```

1  clear all
2  format long
3
4  a=-pi;
5  b=pi;
6  n=5;
7  syms x
8
9  f=@(x) cos(x);
10
11
12 % Valor da integral
13 Iex=vpa(int(f,x,a,b),40)
14
15 % Transformación afín
16 g = @(t) ((b-a)/2)*t + (a+b)/2;
17
18 [I,x,w]=gauss(f,g,n,a,b)
19
20 %ERRO
21 e = vpa(Iex-I,16)
22
23 %Representación gráfica
24 grafo(x,f,n,w,a,b)

```

Listing A.5: Representación gráfica do método de Gauss en  $(-1,1)$ 

```

1  function grafo(x,f,n,w)
2  x_plot = linspace(-1,1,1000); % Creamos un vector de moitos
   puntos para pintar a funci n f sobre eles
3  y_plot = arrayfun(f, x_plot); % avaliar f nos puntos elexidos
4
5  % Graficamos a funci n
6  figure;
7  plot(x_plot, y_plot, 'b', 'LineWidth', 2); hold on; % Li a
   azul para f(x)
8
9  % Graficar os nodos
10 y_nodos = arrayfun(f, x); % avaliar f en los nodos
11
12 line(x, y_nodos, 'Color', 'r', 'LineStyle', 'none', 'Marker', '
   o', 'MarkerSize', 10); %pintamos os nodos avaliados
13
14 for i = 1:n+1
15     % Debuxar a li a que conecta o nodo co seu valor en f(x)
16     line([x(i), x(i)], [0, y_nodos(i)], 'Color', 'black', '
   LineStyle', '--', 'LineWidth', 1.5);
17
18     % Debuxar os rect ngulos
19     patch([x(i)-w(i)/2, x(i)+w(i)/2, x(i)+w(i)/2, x(i)-w(i)/2],
   ...
20           [0, 0, y_nodos(i), y_nodos(i)], ... % Base sobre el
   eje x
21           [0.5, 0.7, 1], 'EdgeColor', 'black', 'LineWidth', 2,
   'FaceAlpha', 0.5); % Transparente
22 end
23
24 xlabel('x'); ylabel('f(x)');
25 title(sprintf('Cuadratura de Gauss con %d nodos', n));
26 legend('f(x)', 'Nodos de Gauss');
27 grid on; hold off;
28
29 xlim([-1, 1]); % Limitar el eje x a [-1, 1]
30 ylim([min(y_plot), max(y_plot)]);

```

```
31 end
```

Listing A.6: Método de Gauss nun intervalo  $(a, b)$ 

```
1 function [I,x,w] = gauss(f,g,n,a,b) % (n+1)-pt Gauss quadrature of
  f
2 beta = .5./sqrt(1-(2*(1:n)).^(-2)); % 3-term recurrence coeffs
3 T = diag(beta,1) + diag(beta,-1); % Matriz Jacobiana
4 [V,D] = eig(T); % Descomposici n de autovalores e autovectores
5 x = diag(D); [x,i] = sort(x); % nodos
6 w = 2 * V(1,i).^2; % Coeficiente de Christoffel
7 w = (b-a)/2 * w;
8 x= g(x);
9 I = w*feval(f,x);
```

Listing A.7: Representación gráfica do método de Gauss en  $(a, b)$ 

```
1 function grafo(x,f,n,w,a,b)
2   x_plot = linspace(a,b,1000); % Creamos un vector de moitos
   puntos para pintar a funci n f sobre eles
3   y_plot = arrayfun(f, x_plot); % Avaliar f nos puntos elexidos
4
5   % Graficamos a funci n
6   figure;
7   plot(x_plot, y_plot, 'b', 'LineWidth', 2); hold on; % Li a
   azul para f(x)
8
9   % Graficar os nodos
10  y_nodos = arrayfun(f, x); % Avaliar f en los nodos
11
12  line(x, y_nodos, 'Color', 'r', 'LineStyle', 'none', 'Marker', '
   o', 'MarkerSize', 10); %pintamos os nodos avaliados
13
14  mu=a;
15  for i = 1:n+1
16     % Debuxar a li a que conecta o nodo co seu valor en f(x)
17     line([x(i), x(i)], [0, y_nodos(i)], 'Color', 'black', '
   LineStyle', '--', 'LineWidth', 1.5);
18
19     %Rectangulos
```

```

20     patch([mu,mu+w(i),mu+w(i),mu], ...
21           [0, 0, y_nodos(i), y_nodos(i)], ... % Base sobre el eje
           x
22           [0.5, 0.7, 1], 'EdgeColor', 'black', 'LineWidth', 2, '
           FaceAlpha', 0.5); % Transparente)
23     mu=mu+w(i);
24     end
25
26
27     xlabel('x'); ylabel('f(x)');
28     title(sprintf('Cuadratura de Gauss con %d nodos', n));
29     legend('f(x)', 'Nodos de Gauss');
30     grid on; hold off;
31
32     xlim([a, b]); % Limitar el eje x a [a,b]
33     ylim([min(y_plot), max(y_plot)]);
34     end

```

Listing A.8: Regra do trapecio composta

```

1  clear all
2  format long
3
4  a=-1;
5  b=1;
6  n=6;
7  h=(b-a)/(n-1);
8  syms x
9
10 %Funci n
11 f=@(x) cos(x);
12
13 % Valor da integral
14 Iex=vpa(int(f,x,-1,1),16);
15
16 % Nodos
17 x=a+(0:n-1)*h
18 fe=feval(f,x);
19

```

```

20 % Calculo da aproximaci n
21 I=h/2*(fe(1)+fe(n))+h*sum(fe(2:n-1))
22
23 %ERRO
24 e = vpa(Iex-I,16)
25
26 % Representaci n gr fica
27 w = repmat(h, 1, n);
28 grafo_Trapeccio(a,b,x,f,n,w)

```

Listing A.9: Representación gráfica da regra do trapezio composta

```

1 function grafo_Trapeccio(a,b,x,f,n,w)
2     x_plot = linspace(a,b,1000); % Creamos un vector de moitos
3     puntos para pintar a funci n f sobre eles
4     y_plot = arrayfun(f, x_plot); % Avaliar f nos puntos elexidos
5
6     % Graficamos a funci n
7     figure;
8     plot(x_plot, y_plot, 'b', 'LineWidth', 2); hold on; % Li a
9     azul para f(x)
10
11    % Graficar os nodos
12    y_nodos = arrayfun(f, x); % Avaliar f en los nodos
13
14    line(x, y_nodos, 'Color', 'r', 'LineStyle', 'none', 'Marker', '
15    o', 'MarkerSize', 10); %pintamos os nodos avaliados
16
17    mu=a;
18    for i = 1:n-1
19        %Rectangulos
20        patch([mu,mu+w(i),mu+w(i),mu], ...
21            [0, 0, y_nodos(i+1), y_nodos(i)], ... % Base sobre el
22            eje x
23            [0.5, 0.7, 1], 'EdgeColor', 'black', 'LineWidth', 2, '
24            FaceAlpha', 0.5); % Transparente)
25        mu=mu+w(i);
26    end
27
28

```

```

23     xlabel('x'); ylabel('f(x)');
24     title(sprintf('Cuadratura por Trapecio composto con %d nodos',
25                 n));
26     legend('f(x)', 'Nodos por Trapecio Composto');
27     grid on; hold off;
28
29     xlim([a, b]); % Limitar el eje x a [-1, 1]
30     ylim([min(y_plot), max(y_plot)]);
31 end

```

Listing A.10: Representación gráfica do erro fronte o número de nodos para a fórmula de Gauss

```

1 clear all
2 format long
3
4 a=-1.5;
5 b=1.5;
6 syms x
7
8 % Funci ns
9 f_1=@(x) cos(x);
10 f_2=@(x) x.^8+x.^5+x.^2+x+5;
11 f_3=@(x) exp(x);
12
13 Iex_1=int(f_1,x,a,b);
14 Iex_2=int(f_2,x,a,b);
15 Iex_3=int(f_3,x,a,b);
16
17 syms t
18 itmax=10;
19 % Transformaci n af n
20 g = @(t) ((b-a)/2)*t + (a+b)/2;
21
22 n=1;
23 e_1=zeros(10, 1);
24 e_2=zeros(10, 1);
25 e_3=zeros(10, 1);
26
27 while n<=itmax

```

```

28     [I,x,w]=gauss(f_1,g,n,a,b);
29     e_1(n) = vpa(abs(Iex_1-I),16);
30     [I,x,w]=gauss(f_2,g,n,a,b);
31     e_2(n) = vpa(abs(Iex_2-I),16);
32     [I,x,w]=gauss(f_3,g,n,a,b);
33     e_3(n) = vpa(abs(Iex_3-I),16);
34
35     n=n+1;
36 end
37
38 % Os valores que sexan 0 asinamoslle e-20 para que a funci n
    semilogy pinte os valores
39
40 e_1(e_1 == 0) = 1e-20;
41 e_2(e_2 == 0) = 1e-20;
42 e_3(e_3 == 0) = 1e-20;
43
44 %Grafo
45
46 figure
47 semilogy((1:itmax), e_1((1:itmax),1), '.r', 'MarkerSize', 12)
48 hold on
49 box on
50 semilogy((1:itmax), e_2((1:itmax),1), '.b', 'MarkerSize', 12)
51 semilogy((1:itmax), e_3((1:itmax),1), '.g', 'MarkerSize', 12)
52
53 grid on
54 xlabel('N mero de nodos')
55 ylabel('Erro absoluto')
56 legend('Erro do coseno', 'Erro de  $x.^8+x.^5+x.^2+x+5$ ', 'Erro da
    exponencial', 'Location', 'northeast')
57 set(gca, 'FontName', 'Times', 'FontSize', 12)

```

Listing A.11: Programación do método de Romberg

```

1     clear all
2     format long
3
4     a=-1;

```

```

5  b=1;
6  N=10;
7  r=1/4;
8  syms x
9
10 f=@(x) pi.*exp(pi*x).*cos(pi*x);
11
12
13 % Valor da integral
14 Iex=int(f,x,a,b)
15
16 % Calculamos primeiro os trapecios
17 A=zeros(N,N);
18
19 for i=0:N-1
20     [I]=trapecio(a,b,i,N+1,f);
21     A(i+1,1)=I;
22 end
23 for n=2:N
24     for m=n:N
25         A(m,n)=(4^(n-1)*A(m,n-1)-A(m-1,n-1))/(4^(n-1)-1);
26     end
27 end
28 I=A(N,N);
29 e=vpa(Iex-I,16)

```

Listing A.12: Trapecios aplicados para o método de Romberg

```

1  function [I]=trapecio(a,b,i,n,f)
2  h=(b-a)/2^i
3
4  j=1;
5  x(1)=a;
6  while x(j)<b
7      j=j+1;
8      x(j)=x(j-1)+h;
9  end
10 m=length(x);
11 fe=feval(f,x);

```

```

12 I=h/2*(fe(1)+fe(m));
13 if m>1
14     I=I+h*sum(fe(2:m-1));
15 end

```

Listing A.13: Programa principal das correccións extremas para a regra do trapecio composta.

```

1 clear all
2 clc
3 format long
4
5 k=3;
6 syms x
7 n=200;
8 a=0;
9 b=1;
10
11 h=(b-a)/n;
12 f = @(x) exp(cos(x));
13
14
15 der_a = zeros(2*k, 1);
16 der_b = zeros(2*k, 1);
17
18 % Valor da integral
19 Iex=vpa(int(f,x,a,b),40)
20
21 %Calculo do vector de derivadas
22 for i = 1:2*k
23     derivada = diff(f, x, i);           % derivada simb lica de
24         orden i
25     der_a(i) = double(subs(derivada, x, a)); % evaluar en a
26     der_b(i) = double(subs(derivada, x, b)); % evaluar en b
27 end
28 [I]=trapecio(a,b,n,f);
29
30 for l=1:k-1
31     I = I - (bernoulli(2*l)/factorial(2*l)) * h^(2*l) * (der_b(2*l
32         -1) - der_a(2*l-1));

```

```

31 end
32 e = vpa(Iex-I,16)

```

Listing A.14: Trapecio composto para correccións extremas

```

1 function [I]=trapecio(a,b,i,f)
2 h=(b-a)/i;
3 j=1;
4 x(1)=a;
5 while x(j)<b
6     j=j+1;
7     x(j)=x(j-1)+h;
8 end
9 m=length(x);
10 fe=feval(f,x);
11 I=h/2*(fe(1)+fe(m));
12 if m>1
13     I=I+h*sum(fe(2:m-1));
14 end

```

Listing A.15: Programa principal para a implementación das correccións extremas para a regra de Simpson composta

```

1 clear all
2 clc
3 format long
4
5 k=3;
6 syms x
7 n=3; %n mero impar de nodos
8 a=pi/3;
9 b=2*pi/3;
10
11
12 h=(b-a)/(n-1);
13
14 f= @(x) sin(1/x);
15
16 der_a = zeros(2*k, 1);
17 der_b = zeros(2*k, 1);

```

```

18
19 % Valor da integral
20 Iex=vpa(int(f,x,a,b),40)
21
22 %Calculo do vector de derivadas
23 for i = 1:2*k
24     derivada = diff(f, x, i);           % derivada simb lica de
        orden i
25     der_a(i) = double(subs(derivada, x, a)); % avaliar en a
26     der_b(i) = double(subs(derivada, x, b)); % avaliar en b
27 end
28
29 %Simpson
30 [I,x]=simpson(a,b,n,f);
31
32 for j=2:k-1
33     I = I - (4-2^(2*j))/3*bernoulli(2*j)*h^(2*j)/factorial(2*j)*
        der_b(2*j-1)-der_a(2*j-1));
34 end
35
36 e = vpa(Iex-I,16)

```

Listing A.16: Regra de Simpson composta

```

1 function [I,x]=simpson(a,b,n,f)
2 h=(b-a)/(n-1);
3 for i=1:n
4     x(i)=a+h*(i-1);
5 end
6
7 if n==3
8     I=h/(3) *(f(x(1))+4*f(x(2))+f(x(3)));
9 else
10    I=h/(3) *(f(x(1))+f(x(n)));
11    for i=1:(n-1)/2-1
12        I=I+2*h/3*f(x(2*i+1));
13    end
14    for i=1:(n-1)/2
15        I=I+4*h/3*f(x(2*i));

```

```
16     end
17 end
```

# Bibliografía

- [1] Abner J. Salgado e Steven M. Wise. *Classical Numerical Analysis: A Comprehensive Course*. Cambridge University Press, Cambridge, 2023.
- [2] Alfio Quarteroni, Riccardo Sacco e Fausto Saleri. *Matematica Numerica*. 4<sup>a</sup> ed., Springer Milan, 2014.
- [3] Eugenio Hernández Rodríguez, M. Jesús Vázquez Tapia e M. Ángeles Zurro Martín. *Álgebra Lineal y Geometría*. 3<sup>a</sup> ed., Pearson Educación, México D.F., 2012.
- [4] Gábor Szegő. *Orthogonal Polynomials*. 4<sup>a</sup> ed., American Mathematical Society, Providence, 1978.
- [5] J. Bukac, T. Buric e N. Elezovic. Stirling's formula revisited via some classical and new inequalities. *Communicated by J. Pecaric*, 2010.
- [6] Josef Stoer e Roland Bulirsch. *Introduction to Numerical Analysis*. Traducido por W. Gautschi, R. Bartels e C. Witzgall, 3<sup>a</sup> ed., Springer-Verlag, New York, 2002.
- [7] Lloyd N. Trefethen. *Is Gauss Quadrature Better than Clenshaw–Curtis?* SIAM Review, Society for Industrial and Applied Mathematics, USA, **50**(1):67–87, 2008. <https://doi.org/10.1137/060659831>
- [8] Ó. López Pouso e J. Segura. Uniform relations between the Gauss-Legendre nodes and weights. *Journal of Inequalities and Applications*, SpringerOpen, **2025**, 40(2025). <https://doi.org/10.1186/s13660-025-03283-w>
- [9] Philip J. Davis e Philip Rabinowitz. *Methods of Numerical Integration*. Academic Press, New York, 1975.
- [10] Richard L. Burden e J. Douglas Faires. *Numerical Analysis*. 3<sup>a</sup> ed., Prindle, Weber & Schmidt, Boston, 1985.
- [11] Walter Rudin. *Principios de análisis matemático*. 3<sup>a</sup> ed., McGraw-Hill, México, 1980.