



FACULTADE DE MATEMÁTICAS

Traballo Fin de Grao

UNHA INTRODUCCIÓN Á INTEGRACIÓN NUMÉRICA. FÓRMULAS DE GAUSS.

Antía Álvarez González

Curso 2021-2022

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

GRAO DE MATEMÁTICAS

Traballo Fin de Grao

**UNHA INTRODUCCIÓN Á
INTEGRACIÓN NUMÉRICA.
FÓRMULAS DE GAUSS.**

Antía Álvarez González

Xullo, 2022

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

Traballo proposto

Área de Coñecemento: Matemática Aplicada
Título: Unha introdución á integración numérica. Fórmulas de Gauss.
Breve descrición do contido
Realízase unha introdución aos métodos de cuadratura de tipo interpolatorio-polinómico, para despois profundar na análise destas fórmulas ata chegar ás denominadas fórmulas de Gauss.

Índice

Resumo	VIII
Introdución	XI
1. Preliminares	1
1.1. Fórmulas de tipo interpolatorio-polinómico	1
1.2. Fórmulas de Newton-Cotes	5
1.2.1. Expresión do erro nas fórmulas de Newton-Cotes	8
1.2.2. Obtención das fórmulas de Newton-Cotes	9
1.3. Fórmulas de Newton-Cotes compostas	12
2. Fórmulas de Gauss	15
2.1. Polinomios ortogonais	16
2.2. Fórmulas de cuadratura de Gauss	24
2.2.1. Máximo grao de exactitude	24
2.2.2. Unicidade das fórmulas de Gauss	26
2.2.3. Estimación do erro nas fórmulas de Gauss	27
2.3. Cálculo das fórmulas de cuadratura gaussianas	27
3. Integración de Romberg	33
3.1. Extrapolación de Richardson	34

3.2. Integración de Romberg	34
Bibliografía	39

Resumo

Neste traballo trátanse as fórmulas de cuadratura de tipo interpolatorio-polinómico. Primeiro realízase unha breve introdución, na que se motiva o seu uso e se definen unha serie de conceptos que se empregarán ao longo do traballo, para despois profundar no seu estudo. Inicialmente, veranse as fórmulas de Newton-Cotes, nas que os nodos de cuadratura están igualmente espaciados, para despois pasar ás fórmulas de Gauss, nas que se realiza unha escolla óptima dos nodos de cuadratura para cada caso concreto co fin de minimizar o erro cometido. Ao longo do traballo compararanse ambos tipos de fórmulas, e trátase de ver cal é preferible usar dependendo do problema a resolver. Finalmente, tras ver en profundidade os métodos anteriores, realízase unha pequena introdución á extrapolación numérica e fálase da integración de Romberg. Este método, a pesar de non ser de tipo interpolatorio-polinómico, fai uso de certo tipo de fórmulas de Newton-Cotes para obter unha aproximación inicial que despois é mellorada.

Abstract

In this work we will address the quadrature formulas of interpolatory-polynomial type. At first, it is made a brief introduction in which its use is motivated and a series of concepts that will be used along the work are defined, and then they will be studied in more detail. Initially, we will see the Newton-Cotes formulas, in which the quadrature nodes are equally spaced, and then move on to the Gaussian formulas, in which it is made an optimal choice of the quadrature nodes for each specific case in order to minimize the error. Throughout the work both types of formulas will be compared, and we will try to see which is preferable to use depending on the problem to be solved. Finally, after looking in depth at the previous methods, it is made a brief introduction to numerical extrapolation, and Romberg integration is addressed. This method, although it is not of the interpolatory-polynomial type, makes use of certain types of Newton-Cotes formulas to obtain an initial approximation which is then improved.

Introdución

O cálculo da integral de determinadas funcións pode resultar un proceso complexo empregando os métodos tradicionais de integración que derivan do Teorema Fundamental do Cálculo. Isto débese principalmente a tres motivos.

1. Que non exista unha expresión analítica da función e que unicamente se dispoña dunha táboa dos valores que toma en certos puntos.
2. Que a primitiva da función resulte difícil de calcular.
3. Que a primitiva non se poida expresar a través de funcións elementais, e que polo tanto non se poida calcular.

É nestes casos cando xorde a necesidade de empregar un método alternativo para realizar este proceso de integración.

Dito método consiste en expresar a integral mediante sumas finitas que se obteñen a partir dunha partición de puntos apropiada do intervalo de integración correspondente. Isto é o que se coñece como *fórmulas de cuadratura numérica*. Neste traballo trataranse as coñecidas como *de tipo interpolatorio-polinómico*.

No primeiro capítulo, ademais de introducir as fórmulas de cuadratura numérica de tipo interpolatorio-polinómico, falarase sobre a familia das fórmulas de Newton-Cotes. Estas caracterízanse porque a partición do intervalo integración se toma de modo que os puntos estean distribuídos de forma equidistante. A principal vantaxe que se verá é o fácil que resulta obtelas, pois en moitos caos xa están predeterminadas.

No segundo capítulo trataranse as fórmulas de Gauss. Estas diferéncianse das anteriores en que os puntos que definen a partición do intervalo de integración se toman como os óptimos para o caso particular no que se estea a traballar. Isto vai facer que a aproximación obtida neste caso sexa mellor ca a que se ten coas fórmulas de Newton-Cotes. Pola contra, o proceso das fórmulas de Gauss é habitualmente máis complexo, pois o método de obtención dos puntos que definen a partición pode complicarse dependendo da función e o intervalo do que se dispoña.

Por último, faise unha pequena introdución a fórmulas de extrapolación numérica e trátase a integración de Romberg. Para obter estas fórmulas de cuadratura aplícase un método de extrapolación coñecido como extrapolación de Richardson a certo tipo de fórmulas de Newton-Cotes para de mellorar a aproximación obtida inicialmente.

Capítulo 1

Preliminares

1.1. Fórmulas de tipo interpolatorio-polinómico

Considerarase unha función real e integrable f definida sobre un intervalo $[a, b]$ pechado e acotado. A súa integral será denotada por $I(f) = \int_a^b f(x)dx$.

As fórmulas de cuadratura numérica son da forma

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i). \quad (1.1)$$

Determinanse escollendo unha partición axeitada do intervalo $[a, b]$ dada por $n + 1$ puntos diferentes, coñecidos como *nodos de cuadratura*, que se denotan por x_0, \dots, x_n , e que deben estar ordenados de modo que $x_0 < \dots < x_n$.

Na expresión (1.1) os valores $f(x_i)$ son coñecidos para todo $i = 0, \dots, n$, e α_i son os *pesos* da fórmula de cuadratura. Estes últimos, son coeficientes que se deben determinar previamente para todo $i = 0, \dots, n$. Nesta aproximación de $I(f)$ cométese un erro $E_n(f)$, coñecido como *erro de cuadratura*, que se define como a diferenza

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f) \quad (1.2)$$

Polo tanto, o valor da integral $I(f)$ é igual a

$$I(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) + E_n(f).$$

Neste traballo trataranse principalmente as fórmulas de cuadratura de tipo *interpolatorio-polinómico*.

Definición 1.1. As fórmulas de cuadratura de tipo *interpolatorio-polinómico* son aquelas nas que se emprega un polinomio de interpolación p_n para aproximar o valor da función f . Deste

modo, reemplázase o cálculo da integral $I(f) = \int_a^b f(x)dx$ polo de $\int_a^b p_n(x)dx$, de modo que se considera a seguinte aproximación para a integral:

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

A principal vantaxe deste tipo de fórmulas é a que a integración de polinomios é un proceso que, polo xeral, non require de cálculos demasiado complexos.

Nótese ademais que o erro de cuadratura, que xa se definiu na expresión (1.2), se pode reescribir nas fórmulas de tipo interpolatorio-polinómico como segue:

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f) = \int_a^b (f(x) - p_n(x))dx,$$

é dicir, como a integral do erro cometido na interpolación da función f .

Fixados $n + 1$ nodos calesquera situados sobre o intervalo $[a, b]$, tomarase como polinomio de interpolación p_n o polinomio interpolatorio de Lagrange relativo a eses $n + 1$ nodos.

Definición 1.2. O *polinomio interpolatorio de Lagrange relativo a $n + 1$ puntos*, calcúlase mediante

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i)l_i(x),$$

onde $l_i(x)$ é o *polinomio característico de Lagrange asociado ao nodo x_i* , que se define como

$$l_i(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \frac{x - x_k}{x_i - x_k}. \quad (1.3)$$

Para cada función f e conxunto de $n + 1$ puntos, existe un único polinomio interpolatorio de Lagrange que cumpre esta definición. Pódese ver a proba deste resultado, por exemplo, en Stoer e Bulirsch (2010).

A partir deste polinomio, a fórmula de cuadratura para o cálculo da integral $I(f)$ pódese reescribir como

$$I_n(f) = \int_a^b \sum_{i=0}^n f(x_i)l_i(x)dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b l_i(x)dx. \quad (1.4)$$

Nótese que esta fórmula ten a forma $I_n(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$, onde x_i son os nodos de cuadratura e

$\alpha_i = \int_a^b l_i(x)dx$ son os pesos para cada $i = 0, \dots, n$, polo que claramente é do tipo interpolatorio-polinómico. De acordo con isto, obtense un método para o cálculo dos pesos de cuadratura a través da integración dos polinomios característicos de Lagrange asociados a cada un dos nodos. Móstrase a continuación un exemplo que ilustra proceso.

Exemplo 1.3. *Cálculo dos pesos de cuadratura empregando os polinomios característicos de Lagrange para unha fórmula de cuadratura de dous nodos nun intervalo $[a, b]$.*

Considéranse os nodos de cuadratura $x_0 = a$ e $x_1 = b$. Polo tanto, os pesos calcúlanse como

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= \int_a^b l_0(x) dx = \int_a^b \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx = \int_a^b \frac{x - b}{a - b} dx = \\ &= \left[\frac{1}{a - b} \left(\frac{x^2}{2} - bx \right) \right]_a^b = \frac{b - a}{2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \int_a^b l_1(x) dx = \int_a^b \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} dx = \int_a^b \frac{x - a}{b - a} dx = \\ &= \left[\frac{1}{b - a} \left(\frac{x^2}{2} - ax \right) \right]_a^b = \frac{b - a}{2}\end{aligned}$$

de modo que $\alpha_0 = \alpha_1 = \frac{b - a}{2}$. □

A seguinte definición será de gran importancia para determinar como de exacta é unha aproximación, e poder comparar así as distintas clases de fórmulas de tipo interpolatorio-polinómico que se verán posteriormente.

Definición 1.4. O *grao de exactitude* ou *de precisión* dunha fórmula de cuadratura defínese como o maior número enteiro positivo r para o cal a fórmula de cuadratura é exacta para todo polinomio de grao $\leq r$, é dicir, para o cal $E_n(x^k) = 0$ para cada $k = 0, 1, \dots, r$.

Teorema 1.5. *Unha fórmula de cuadratura da forma $\sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$ de $n + 1$ puntos é de tipo interpolatorio-polinómico se e só se ten, polo menos, grao de exactitude n .*

Demostración. (\Rightarrow) Dados $n + 1$ puntos situados no intervalo $[a, b]$ e unha fórmula de cuadratura $I_n(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$ de tipo interpolatorio-polinómico, xa se viu que os seus pesos se poden calcular mediante

$$\alpha_i = \int_a^b l_i(x) dx, \quad i = 0, \dots, n,$$

sendo l_i o polinomio característico de Lagrange asociado ao nodo x_i para cada $i = 0, \dots, n$.

Denotarase P_n como o conxunto dos polinomios de grao menor ou igual que n . Como todo polinomio $p \in P_n$ de grao n coincide co seu polinomio de interpolación relativo aos puntos x_0, \dots, x_n , tense que

$$p(x) = \sum_{i=0}^n p(x_i) l_i(x),$$

e polo tanto integrando esto, como $\alpha_i = \int_a^b l_i(x)dx$, queda

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

polo que a fórmula é exacta para o polinomio $p \in P_n$.

(\Leftarrow) Para probar o recíproco, suporase que a fórmula é exacta para todo polinomio de P_n . En particular, ten que selo para $l_k \in P_n$ de grao n , e así:

$$\int_a^b l_k(x)dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i l_k(x_i) = \sum_{i=0}^n \alpha_i \delta_{ki} = \alpha_k, \quad k = 0, \dots, n,$$

logo a fórmula é de tipo interpolatorio-polinómico, xa que os pesos se calculan como se viu en (1.4). \square

Nótese que a través deste resultado, se proporciona un método que permite a obtención dos pesos de cuadratura sen calcular a integral dos polinomios característicos de Lagrange, $\int_a^b l_i(x)dx$, para cada $i = 0, \dots, n$. Dada unha fórmula de cuadratura de $n + 1$ nodos, polo teorema previo, esta terá grao de exactitude n , e polo tanto será exacta para todo monomio x^k tal que $0 \leq k \leq n$. Polo tanto, se x_0, \dots, x_n son os $n + 1$ nodos, debe satisfacerse o seguinte sistema linear de $n + 1$ ecuacións

$$\begin{cases} \alpha_0 + \alpha_1 + \dots + \alpha_n = \int_a^b 1dx \\ \alpha_0 x_0 + \alpha_1 x_1 + \dots + \alpha_n x_n = \int_a^b xdx \\ \vdots \\ \alpha_0 x_0^n + \alpha_1 x_1^n + \dots + \alpha_n x_n^n = \int_a^b x^n dx \end{cases} \quad (1.5)$$

que tamén se pode expresar matricialmente como

$$V\alpha = d, \quad (1.6)$$

onde α é o vector de pesos,

$$d = (d_0, d_1, \dots, d_n)^T,$$

con

$$d_k = \int_a^b x^k dx, \quad k = 0, \dots, n,$$

e V é a matriz de Vandermonde trasposta:

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_0 & x_1 & \dots & x_n \\ x_0^2 & x_1^2 & \dots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \dots & x_n^n \end{pmatrix}.$$

O sistema (1.6) terá solución única se o determinante da matriz V é non nulo, é dicir, se se cumpre

$$\det(V) = \prod_{1 \leq j < i \leq n} (x_i - x_j) \neq 0,$$

o cal debe suceder porque os nodos de cuadratura escóllense todos distintos dous a dous.

Empregando os mesmos parámetros ca no Exemplo 1.3, móstrase a cotinuación o proceso do cálculo dos pesos de cuadratura empregando o novo método proporcionado polo sistema (1.5).

Exemplo 1.6. *Cálculo dos pesos de cuadratura a través do sistema (1.5).*

Os nodos de cuadratura son $x_0 = a$ e $x_1 = b$. O sistema linear mencionado queda neste caso como

$$\begin{cases} \alpha_0 + \alpha_1 = \int_a^b 1 \, dx = b - a \\ \alpha_0 a + \alpha_1 b = \int_a^b x \, dx = \frac{b^2 - a^2}{2} \end{cases}$$

Resolvéndoo, vese que os pesos obtidos son

$$\alpha_0 = \alpha_1 = \frac{b - a}{2}.$$

que coinciden cos do Exemplo 1.3. □

1.2. Fórmulas de Newton-Cotes

Dentro das fórmulas de cuadratura de tipo interpolatorio-polinómico, estudarase primeiro a familia das fórmulas de Newton-Cotes. Caracterízase porque se empregan $n+1$ nodos distribuídos de xeito equidistante sobre o intervalo $[a, b]$. Dado un paso h determinado (que se define como a distancia entre dous nodos), calcúlanse como $x_i = x_0 + ih$, para cada $i = 0, \dots, n$. Existen dous tipos de fórmulas de Newton-Cotes dependendo de como se escollan os extremos do intervalo:

- **Pechadas:** inclúense os extremos do intervalo de integración, polo que se toma $x_0 = a, x_n = b$ e $h = (b - a)/n$ para $n \geq 1$.
- **Abertas:** non se inclúen os extremos do intervalo de integración, polo que $x_0 = a + h, x_n = b - h$ e $h = (b - a)/(n + 2)$ para $n \geq 0$.

Proposición 1.7. *Nas fórmulas de Newton-Cotes, os pesos de cuadratura só dependen dos valores de h e de n .*

Demostración. Introdúcese o cambio de variable $x = \Psi(t) = x_0 + th$.

No caso pechado considéranse os nodos $x_k = a + kh$ para cada $k = 0, \dots, n$, e polo tanto

$$\frac{x - x_k}{x_i - x_k} = \frac{a + th - (a + kh)}{a + ih - (a + kh)} = \frac{t - k}{i - k}.$$

Entón, como para $n \geq 1$

$$l_i(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \frac{t-k}{i-k} = \varphi_i(t), \quad 0 \leq i \leq n,$$

os pesos de cuadratura pódense expresar como

$$\alpha_i = \int_a^b l_i(x) dx = \int_0^n \varphi_i(t) h dt = h \int_0^n \varphi_i(t) dt. \quad (1.7)$$

Polo tanto, a fórmula de cuadratura queda como

$$I_n(f) = h \sum_{i=0}^n w_i f(x_i), \quad w_i = \int_0^n \varphi_i(t) dt. \quad (1.8)$$

Para o caso aberto, considéranse os nodos $x_k = a + h(k+1)$, e denotando os extremos do intervalo $[a, b]$ por $x_{-1} = a$ e $x_{n+1} = b$, e co mesmo cambio de variable que antes, os pesos son $\alpha_i = h \int_{-1}^{n+1} \varphi_i(t) dt$. Así, a fórmula de cuadratura neste caso quedará como

$$I_n(f) = h \sum_{i=0}^n w_i f(x_i), \quad w_i = \int_{-1}^{n+1} \varphi_i(t) dt. \quad (1.9)$$

Tendo en conta que $\varphi_i(t) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \frac{t-k}{i-k}$ dedúcese, por como están definidos os coeficientes w_i en (1.8) e (1.9) para cada $i = 0, \dots, n$, que no cálculo de $I_n(f)$ unicamente se teñen en conta os valores de h e de n . \square

Obsérvese que a proba deste resultado proporciona un novo método para o cálculo dos pesos de cuadratura das fórmulas de Newton-Cotes, a través da expresión (1.7). O exemplo que se dá a continuación ilustra este proceso. Débese destacar ademais o fácil que resulta o cálculo dos pesos mediante este método en comparación cos vistos anteriormente, polo que tamén se compara co método que deriva do sistema linear (1.5).

Exemplo 1.8. *Cálculo dos pesos de cuadratura dunha fórmula de Newton-Cotes pechada con $n=2$.*

(a) *Mediante a forma proporcionada polo sistema (1.5).*

Neste caso $h = \frac{b-a}{2}$, polo que os nodos de cuadratura son $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ e $x_2 = b$. Considérase polo tanto o seguinte sistema de ecuacións

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 = \int_a^b 1 dx = b - a \\ \alpha_0 a + \alpha_1 \frac{a+b}{2} + \alpha_2 b = \int_a^b x dx = \frac{b^2 - a^2}{2} \\ \alpha_0 a^2 + \alpha_1 \frac{(a+b)^2}{4} + \alpha_2 b^2 = \int_a^b x^2 dx = \frac{b^3 - a^3}{3} \end{array} \right.$$

con solución

$$\alpha_0 = \alpha_2 = \frac{b-a}{6}$$

$$\alpha_1 = \frac{2(b-a)}{3}.$$

(b) *Forma proporcionada pola expresión (1.7).*

Recórdese que $n = 2$ e que $h = \frac{b-a}{2}$, polo que os pesos se calculan como

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= h \int_0^2 \varphi_0(t) dt = h \int_0^2 \frac{t-1}{0-1} \frac{t-2}{0-2} dt = \frac{h}{2} \int_0^2 (t-1)(t-2) dt = \\ &= \frac{h}{2} \left[\frac{t^3}{3} - \frac{3t^2}{2} + 2t \right]_0^2 = \frac{b-a}{4} \frac{2}{3} = \frac{b-a}{6}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= h \int_0^2 \varphi_1(t) dt = h \int_0^2 \frac{t-0}{1-0} \frac{t-2}{1-2} dt = -h \int_0^2 t(t-2) dt = \\ &= -h \left[\frac{t^3}{3} - t^2 \right]_0^2 = -\frac{b-a}{2} \left(-\frac{4}{3} \right) = \frac{2(b-a)}{3}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\alpha_2 &= h \int_0^2 \varphi_2(t) dt = h \int_0^2 \frac{t-0}{2-1} \frac{t-1}{2-1} dt = \frac{h}{2} \int_0^2 t(t-1) dt = \\ &= \frac{h}{2} \left[\frac{t^3}{3} - \frac{t^2}{2} \right]_0^2 = \frac{b-a}{4} \frac{2}{3} = \frac{b-a}{6}\end{aligned}$$

Claramente, os pesos obtidos coinciden cos de (a). □

Volvendo á Proposición 1.7, o feito de que os pesos de cuadratura das fórmulas de Newton-Cotes só dependan de h e de n , implica que, tanto a función f como o intervalo de integración que se consideren, non teñan relevancia na obtención destes coeficientes. Isto implica que ditos pesos poidan ser calculados previamente á aplicación da fórmula de cuadratura. De feito, os pesos xa están predeterminados para moitos valores de n . Móstranse nas seguinte táboa os pesos α_i nas fórmulas de Newton-Cotes para diferentes valores de n , primeiro no caso pechado e posteriormente no aberto.

n	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4
1	$\frac{b-a}{2}$	$\frac{b-a}{2}$			
2	$\frac{b-a}{6}$	$\frac{2(b-a)}{3}$	$\frac{b-a}{6}$		
3	$\frac{b-a}{8}$	$\frac{3(b-a)}{8}$	$\frac{3(b-a)}{8}$	$\frac{b-a}{8}$	
4	$\frac{7(b-a)}{90}$	$\frac{16(b-a)}{45}$	$\frac{6(b-a)}{45}$	$\frac{16(b-a)}{45}$	$\frac{7(b-a)}{90}$

Cadro 1.1: Pesos nas fórmulas de Newton-Cotes pechadas

n	α_0	α_1	α_2	α_3
0	$b - a$			
1	$\frac{b-a}{2}$	$\frac{b-a}{2}$		
2	$\frac{2(b-a)}{3}$	$-\frac{b-a}{3}$	$\frac{2(b-a)}{3}$	
3	$\frac{11(b-a)}{24}$	$\frac{b-a}{24}$	$\frac{b-a}{24}$	$\frac{11(b-a)}{24}$

Cadro 1.2: Pesos nas fórmulas de Newton-Cotes abertas

Nótese que os pesos son simétricos, é dicir, que, no caso pechado tense que $\alpha_i = \alpha_{n-i}$ para $i = 0, \dots, n-1$ e no caso aberto, $\alpha_i = \alpha_{n-i}$ para $i = 0, \dots, n$.

Ademais, tamén existe a presenza de pesos negativos. No caso aberto, a partir de $n = 2$ e no pechado, a pesar de que non se mostra no Cadro 1.1, a partir de $n = 8$. Isto repercute de forma negativa nas fórmulas de cuadratura, xa que dá lugar a inestabilidades.

1.2.1. Expresión do erro nas fórmulas de Newton-Cotes

Xa se viu no Teorema 1.5 que ao aproximar unha integral $I(f)$ a través dunha fórmula de cuadratura de tipo interpolatorio-polinómico $I_n(f)$ de $n + 1$ puntos, non se comete erro se a función f ten grao $\leq n$. O seguinte resultado proporciona a expresión do erro nas fórmulas de Newton-Cotes, no caso de que este exista. Denotarase

$$\pi_n(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n),$$

onde x_0, x_1, \dots, x_n son os $n + 1$ nodos da fórmula de cuadratura.

Teorema 1.9. *Sexa unha función $f \in \mathcal{C}^{n+2}([a, b])$ e unha fórmula de Newton-Cotes con n par. O seu erro vén dado pola expresión*

$$E_n(f) = \frac{M_n}{(n+2)!} h^{n+3} f^{(n+2)}(\xi), \quad \xi \in (a, b), \quad (1.10)$$

de modo que se a fórmula é pechada

$$M_n = \int_0^n t \pi_n(t) dt < 0,$$

e se é aberta,

$$M_n = \int_{-1}^{n+1} t \pi_n(t) dt > 0.$$

Sexa agora unha función $f \in \mathcal{C}^{n+1}([a, b])$ e unha fórmula de Newton-Cotes cun valor impar para n . O seu erro vén dado por

$$E_n(f) = \frac{K_n}{(n+1)!} h^{n+2} f^{(n+1)}(\xi), \quad \xi \in (a, b), \quad (1.11)$$

de modo que se a fórmula é pechada

$$K_n = \int_0^n \pi_n(t) dt < 0,$$

e se é aberta

$$K_n = \int_{-1}^{n+1} \pi_n(t) dt > 0.$$

A demostración deste teorema pódese atopar en Isaacson e Keller (1994).

A partir deste resultado pódese deducir o grao de exactitude das fórmulas de Newton-Cotes para os casos n par e impar, xa que non é o mesmo posto, que os seus erros de cuadratura non se calculan da mesma forma. Por ser as fórmulas de Newton-Cotes do tipo interpolatorio-polinómico, xa se viu no Teorema 1.5 que, para $n + 1$ puntos, o seu grao de exactitude é polo menos n . Se n é impar, na expresión (1.11) vese que o erro é nulo cando $f^{(n+1)} = 0$, polo que a fórmula ten grao de exactitude n , como se acaba de deducir a partir do Teorema 1.5. En cambio, para o caso n par, razonando de forma análoga a partir de (1.10), dedúcese que a fórmula ten grao de exactitude $n + 1$, xa que, como o erro é nulo para $f^{(n+2)} = 0$, a fórmula de cuadratura é exacta para polinomios de grao $\leq n + 1$.

1.2.2. Obtención das fórmulas de Newton-Cotes

A continuación móstranse os casos particulares de fórmulas de Newton-Cotes pechadas que se empregan máis habitualmente na práctica. Están aplicadas a un intervalo de integración $[a, b]$ arbitrario, pechado e acotado.

- Fórmula do trapecio ($n=1$)

Neste caso tómanse dous nodos $x_0 = a$ e $x_1 = b$, $h = b - a$, e os pesos de cuadratura son $\alpha_0 = \alpha_1 = \frac{a+b}{2}$. A fórmula de cuadratura resultante é

$$I_1(f) = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)],$$

e, para $f \in \mathcal{C}^2([a, b])$, o de erro de cuadratura vén dado por

$$E_1(f) = -\frac{h^3}{12}f''(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

Esta fórmula ten grao de exactitude 1.

- Fórmula de Simpson ($n=2$)

Tómanse tres nodos $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ e $x_2 = b$ con $h = \frac{b-a}{2}$, e os pesos $\alpha_0 = \alpha_2 = \frac{b-a}{6}$ e $\alpha_1 = \frac{2(b-a)}{3}$. A fórmula de cuadratura é

$$I_2(f) = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)],$$

e, para $f \in \mathcal{C}^4([a, b])$, ten erro de cuadratura

$$E_2(f) = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

O grao de exactitude é 3.

- Fórmula de Simpson 3/8 (n=3)

Neste caso, tómanse catro nodos $x_0 = a$, $x_1 = \frac{2a+b}{3}$, $x_2 = \frac{a+2b}{3}$ e $x_3 = b$, $h = (b-a)/3$, e os pesos de cuadratura son $\alpha_0 = \alpha_3 = \frac{b-a}{8}$, $\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{3(b-a)}{8}$, polo que a fórmula queda como

$$I_3(f) = \frac{3h}{8}[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)],$$

que, para $f \in \mathcal{C}^4([a, b])$, ten erro de cuadratura

$$E_3(f) = -\frac{3h^5}{80}f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

O grao de exactitude é 3.

No seguinte exemplo, compáranse as fórmulas do trapecio e de Simpson que teñen dous e tres puntos, respectivamente, para a función $f(x) = e^x$. Ademais, tamén se consideran dous intervalos de integración de diferentes lonxitudes para mostrar as variacións do erro de cuadratura cando se varían estes dous factores.

Exemplo 1.10. *Comparación das fórmulas do trapecio e de Simpson para as integrais*

$$\int_0^2 e^x dx \text{ e } \int_0^4 e^x dx:$$

(a) O valor real da primeira integral é $I(f) = \int_0^2 e^x dx = 6.38906$ e, para as fórmulas de cuadratura consideradas, obtense

$$\text{Trapecio: } I_1(f) = 1[f(x_0) + f(x_1)] = e^0 + e^2 = 8.38906$$

$$\text{Simpson: } I_2(f) = \frac{1}{3}[f(x_0) + f(x_1) + f(x_2)] = \frac{1}{3}(e^0 + 4e^1 + e^2) = 6.42073$$

Pode verse que o erro se reduce considerablemente, pasando de -2 a -0.03167 , tomando unicamente un punto máis.

(b) No segundo caso, o valor real da integral é $I(f) = \int_0^4 e^x dx = 53.59815$, e para as fórmulas de cuadratura consideradas,

$$\text{Trapecio: } I_1(f) = 2[f(x_0) + f(x_1)] = 2(e^0 + e^4) = 111.19630$$

$$\text{Simpson: } I_2(f) = \frac{2}{3}[f(x_0) + f(x_1) + f(x_2)] = \frac{2}{3}(e^0 + 4e^2 + e^4) = 56.76958$$

Volve reducirse o erro de forma considerable, xa que pasa de -57.59815 a -3.17143 . Nesta ocasión, ao tomar un intervalo de integración maior, o erro de cuadratura obtido coa fórmula de Simpson segue sendo elevado, polo que sería favorable considerar unha fórmula de máis puntos.

□

No caso aberto, destácanse os seguintes casos particulares.

- Fórmula do punto medio (n=0)

Tense un único nodo, $x_0 = \frac{b+a}{2}$, que se calcula como o punto medio do intervalo de integración $[a, b]$, $h = \frac{b-a}{2}$ e o peso é $\alpha_0 = b - a$. Entón a fórmula resultante é

$$I_0(f) = 2hf(x_0),$$

que para $\mathcal{C}^2([a, b])$ ten erro de cuadratura

$$E_0(f) = \frac{h^3}{3} f''(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

O seu grao de exactitude é 1.

- n=1

Os nodos de cuadratura son $x_0 = \frac{2a+b}{3}$, $x_1 = \frac{a+2b}{3}$, $h = \frac{b-a}{3}$, e os pesos $\alpha_0 = \alpha_1 = \frac{b-a}{2}$, polo que, para $\mathcal{C}^2([a, b])$, a fórmula é

$$I(f) = \frac{3h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] + \frac{3h^3}{4} f''(\xi), \quad \xi \in (a, b)$$

con grao de exactitude 2.

- n=2

Os nodos son $x_0 = \frac{3a+b}{4}$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ e $x_2 = \frac{a+3b}{4}$, $h = \frac{b-a}{4}$, e os pesos $\alpha_0 = \alpha_2 = \frac{2(b-a)}{3}$ e $\alpha_1 = \frac{b-a}{3}$. Polo tanto, para $\mathcal{C}^4([a, b])$,

$$I(f) = \frac{4h}{3} [2f(x_0) - f(x_1) + 2f(x_2)] + \frac{14h^5}{45} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

Ten grao de exactitude 3.

No Exemplo 1.10 ilústrase un dos principais problemas que xorden cando se empregan as fórmulas de Newton-Cotes. Ao considerar intervalos de integración moi longos, tamén é necesario considerar moitos puntos no intervalo para unha correcta aproximación do valor real da integral. Pero xa se viu que cando o número de nodos n é elevado, os pesos α_i , $i = 0, \dots, n$ poden tomar valores negativos, e que polo tanto un pequeno erro nas avaliacións $f(x_i)$ poida derivar en erros moi altos na aproximación da integral, causando así inestabilidades. Polo tanto, non por aumentar o número de nodos, se vai conseguir converxencia nestas fórmulas.

É por este motivo polo que, alternativamente a estas, se empregan as fórmulas de Newton-Cotes compostas. A súa obtención é similar a das simples, pero non é necesario empregar fórmulas de graos moi altos para obter unha correcta aproximación da integral, o que evita as inestabilidades mencionadas anteriormente.

1.3. Fórmulas de Newton-Cotes compostas

A idea principal consiste en dividir o intervalo de integración $[a, b]$ en m subintervalos de igual lonxitude, para despois aplicar sobre cada un deles unha fórmula de Newton-Cotes de baixa orde como as que se mencionaron previamente.

Para $m \geq 1$ dado, defínense m subintervalos de lonxitude $H = (b - a)/m$ mediante os puntos $y_j = a + jH$, $j = 0, \dots, m$. Cada un destes intervalos vólvese dividir en $n \geq 1$ subintervalos de lonxitude $h = H/n$ delimitados polos puntos $x_k = a + kh$, $k = 0, \dots, mn$. A partir desto, a integral quedará

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=1}^m \int_{y_{j-1}}^{y_j} f(x)dx,$$

e aproximando cada unha das integrais $\int_{y_{j-1}}^{y_j} f(x)dx$ mediante unha fórmula de Newton-Cotes pechada de $n + 1$ puntos como segue

$$I_{n,j}(f) = \int_{y_{j-1}}^{y_j} f(x)dx = \sum_{i=0}^n \alpha_{i,j} f(y_{j-1} + ih) + E_{n,j}(f),$$

a fórmula de cuadratura composta quedará finalmente como

$$I_{n,m}(f) = \sum_{j=1}^m \sum_{i=0}^n \alpha_{i,j} f(y_{j-1} + ih).$$

Os pesos $\alpha_{i,j}$ son independentes de j , xa que, como antes, só dependen de h e de n .

Destácanse os dous casos de fórmulas de Newton-Cotes compostas usados máis habitualmente, para $n = 1$ e $n = 2$.

- Fórmula do trapecio composta

$$H = \frac{b-a}{m}, \quad h = H, \quad y_j = a + jH = x_j, \quad j = 0, \dots, m.$$

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \sum_{j=1}^m \int_{y_{j-1}}^{y_j} f(x)dx = \sum_{j=1}^m \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx \\ &= \sum_{j=1}^m \left\{ \frac{h}{2} [f(x_{j-1}) + f(x_j)] - \frac{h^3}{12} f''(\xi_j) \right\}, \quad \xi_j \in (x_{j-1}, x_j) \\ &= \frac{h}{2} \left[f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{m-1} f(x_j) + f(x_m) \right] - \frac{mh^3}{12} f''(\xi) \\ &= \frac{h}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{j=1}^{m-1} f(x_j) + f(b) \right] - \frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi), \quad \xi \in (a, b). \end{aligned}$$

- Fórmula de Simpson composta

$$H = \frac{b-a}{m}, \quad h = \frac{H}{2}, \quad y_j = a + jH = a + j2h = x_{2j}, \quad j = 0, \dots, m.$$

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \sum_{j=1}^m \int_{y_{j-1}}^{y_j} f(x)dx = \sum_{j=1}^m \int_{x_{2j-2}}^{x_{2j}} f(x)dx \\ &= \sum_{j=1}^m \left\{ \frac{h}{3} [f(x_{2j-2}) + 4f(x_{2j-1}) + f(x_{2j}) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi_j)] \right\}, \quad \xi_j \in (x_{2j-2}, x_{2j}) \\ &= \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{2j-2}) + 4f(x_{2m-1}) + f(x_{2m})] - \frac{mh^5}{90} f^{(4)}(\xi) \\ &= \frac{h}{3} \left[f(a) + 4 \sum_{j=1}^m f(x_{2j-1}) + 2 \sum_{j=1}^{m-1} f(x_{2j}) + f(b) \right] - \frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a, b). \end{aligned}$$

É importante ter en conta o feito de que o erro de cuadratura total que se comete ao integrar a función ao longo do intervalo $[a, b]$ é igual á suma dos erros cometidos en cada un dos m subintervalos. Tense o seguinte resultado.

Teorema 1.11. *Sexa unha fórmula de Newton-Cotes composta con n par. Se $f \in \mathcal{C}^{n+2}([a, b])$,*

$$E_{n,m}(f) = \frac{b-a}{(n+2)!} \frac{M_n}{(n+2)^{n+3}} H^{n+2} f^{(n+2)}(\xi), \quad \xi \in (a, b),$$

$$M_n = \int_0^n t \pi_n(t) dt < 0,$$

con grao de exactitude $n+1$.

Para unha fórmula de Newton-Cotes composta con n impar, se $f \in \mathcal{C}^{n+1}([a, b])$,

$$E_{n,m}(f) = \frac{b-a}{(n+1)!} \frac{K_n}{n^{n+2}} H^{n+1} f^{(n+1)}(\xi), \quad \xi \in (a, b),$$

$$K_n = \int_0^n \pi_n(t) dt < 0,$$

e ten grao de exactitude n .

Pódese atopar a proba deste resultado en Quarteroni et al. (2000).

No Teorema 1.11 pódese ver claramente que o grao de exactitude dunha fórmula de Newton-Cotes composta coincide co da súa análoga simple. É dicir, no caso impar teñen grao de exactitude n , e no caso par $n+1$.

Cabe destacar que, fixado o valor de n , o erro cometido $E_{n,m}(f) \rightarrow 0$ cando $m \rightarrow \infty$ (ou equivalentemente, cando $H \rightarrow 0$, xa que $H = (b-a)/m$). Isto asegura a converxencia do método

ao valor exacto de $I(f)$, xa que en tal caso o erro estará próximo a cero. Recórdese que isto era algo que non ocorría coas fórmulas simples, e é esta a principal vantaxe na utilización das fórmulas compostas.

Na práctica, é conveniente escoller valores baixos para n (habitualmente $n \leq 2$), para así asegurar que os pesos sexan positivos, e que polo tanto, os erros de cuadratura en cada un dos subintervalos se minimicen, e que non se teñan inestabilidades coma no caso das simples.

Exemplo 1.12. *Uso da fórmula de Simpson composta para aproximar a integral $\int_0^4 e^x dx$.*

Para comprobar a efectividade das fórmulas de Newton-Cotes compostas, calcularase o valor desta integral tomando primeiro dous subintervalos e despois catro. Tendo en conta que o valor real da integral é

$$I(f) = \int_0^4 e^x dx = 53.59815 ,$$

verase que cantos máis subintervalos de $[0, 4]$ se escollan, máis se acercará o resultado obtido a este.

Considerando os subintervalos $[0, 2]$ e $[2, 4]$ tense que $h = 1$, de modo que

$$\begin{aligned} \int_0^4 e^x dx &= \int_0^2 e^x dx + \int_2^4 e^x dx \\ &\approx \frac{1}{3}[f(x_0) + 4(f(x_1) + f(x_3)) + 2f(x_2) + f(x_4)] \\ &= \frac{1}{3}(e^0 + 4e^1 + 2e^2 + 4e^3 + e^4) \\ &= 53.86385 . \end{aligned}$$

Neste caso o erro de cuadratura correspóndese con $I(f) - I_{2,2}(f) = -0.26570$.

Considérense agora os subintervalos $[0, 1]$, $[1, 2]$, $[2, 3]$ e $[3, 4]$, con $h = 1/2$, de modo que

$$\begin{aligned} \int_0^4 e^x dx &= \int_0^1 e^x dx + \int_1^2 e^x dx + \int_2^3 e^x dx + \int_3^4 e^x dx \\ &\approx \frac{1}{6}[f(x_0) + 4(f(x_1) + f(x_3) + f(x_5) + f(x_7)) + \\ &\quad + 2(f(x_2) + f(x_4) + f(x_6)) + f(x_8)] \\ &= \frac{1}{6}(e^0 + e^{1/2} + e^1 + e^{3/2} + e^2 + e^{5/2} + e^3 + e^{7/2} + e^4) \\ &= 53.61622 . \end{aligned}$$

Neste caso obtense un erro de cuadratura de $I(f) - I_{2,4}(f) = -0.01807$.

Comparando este resultado co do Exemplo 1.10b, no que o erro de cuadratura era -3.17143 , vese claramente a mellora na aproximación ao usar as fórmulas de Newton-Cotes compostas. \square

Capítulo 2

Fórmulas de Gauss

Ata o momento probouse que, dada unha colección de $n + 1$ puntos diferentes, é posible determinar unha fórmula de cuadratura numérica con grao de exactitude n , que excepcionalmente pode aumentar a $n + 1$ no caso en que n sexa par. Neste capítulo trataranse as fórmulas de cuadratura de máximo grao de precisión, que son as de Gauss. Dados $n + 1$ puntos situados sobre o intervalo $[a, b]$, son a forma

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i).$$

Por ser fórmulas con grao de exactitude $\geq n$, son tamén do tipo interpolatorio-polinómico.

A diferenza das fórmulas vistas anteriormente, agora os nodos de cuadratura non están equiespaciados, senón que se escollen os $n + 1$ nodos e os $n + 1$ pesos óptimos en cada caso particular para obter un maior grao de precisión. Ao dispor destes $2n + 2$ parámetros (nodos e pesos), vaise conseguir que o grao de precisión chegue ata $2n + 1$. De feito, é este o máximo grao de precisión que se pode acadar cunha fórmula de cuadratura numérica.

Neste capítulo consideraranse integrais da forma

$$I(f) = \int_a^b w(x)f(x)dx, \tag{2.1}$$

onde $w(x)$ é unha *función peso*. Considerala resultará máis práctico para o posterior cálculo das integrais e os diferentes elementos das fórmulas de cuadratura gaussianas.

Definición 2.1. Unha *función peso* definida nun intervalo $[a, b]$ é unha función $w : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ que cumpre as seguintes propiedades:

1. $w(x)$ debe ser non negativa e medible en $[a, b]$.

2. Os momentos, definidos por

$$\mu_k := \int_a^b w(x)x^k dx,$$

existen e son finitos para todo $k = 0, 1, \dots$.

3. Dado un polinomio $q(x)$ non negativo en $[a, b]$, se $\int_a^b w(x)q(x)dx = 0$, entón $q(x) = 0$.

Equivalentemente a esta condición, pódese considerar $\int_a^b w(x) > 0$.

Estas tres propiedades pódense resumir en que $w(x)$ debe ser unha función positiva e continua en $[a, b]$.

Certas funcións peso, por ser habitualmente usadas na práctica, son xa coñecidas. Polo tanto, moitos dos cálculos que serán necesarios posteriormente para a obtención das fórmulas de cuadratura gaussianas, xa están realizados. Móstranse a continuación algunhas das funcións peso máis famosas, cos seus intervalos de integración correspondentes.

Tipo de fórmula	Función peso	Intervalo
Gauss-Jacobi	$w(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta, \alpha, \beta > -1$	$[-1, 1]$
Gauss-Legendre	$w(x) = 1$	$[-1, 1]$
Gauss-Chebyshev de primeira especie	$w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	$[-1, 1]$
Gauss-Chebyshev de segunda especie	$w(x) = \sqrt{1-x^2}$	$[-1, 1]$
Gauss-Laguerre	$w(x) = x^\alpha e^{-x}, \alpha > -1$	$[0, \infty)$
Gauss-Hermite	$w(x) = e^{-x^2}$	$(-\infty, \infty)$

Cadro 2.1: Funcións peso usadas habitualmente

Nótese que para as fórmulas de tipo interpolatorio-polinómico vistas previamente tamén é posible tomar integrais da forma (2.1) xa que, tendo en conta que $w(x) > 0$ e continua, basta considerar

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b w(x) \frac{f(x)}{w(x)} dx.$$

2.1. Polinomios ortogonais

As fórmulas de cuadratura gaussianas están fundamentalmente baseadas na teoría de polinomios ortogonais, xa que os seus nodos se calculan como os ceros de ditos polinomios. Danse a continuación unha serie de definicións para posteriormente explicar este concepto.

Denotarase o *espazo vectorial de funcións integrables* no intervalo $[a, b] \subset \mathbb{R}$ respecto da función peso $w(x)$ por $L_w^2 = L_w^2[a, b]$, de modo que

$$L_w^2 = L_w^2[a, b] = \left\{ f : [a, b] \longrightarrow \mathbb{R}, \int_a^b w(x)f^2(x)dx < \infty \right\}.$$

Neste espazo, dadas dúas funcións $f, g \in L_w^2$, defínese a aplicación $\langle \cdot, \cdot \rangle_w$ do seguinte modo:

$$\begin{aligned} \langle \cdot, \cdot \rangle_w : L_w^2 \times L_w^2 &\longrightarrow \mathbb{R} \\ \langle f, g \rangle_w &= \int_a^b w(x)f(x)g(x)dx. \end{aligned}$$

Esta aplicación verifica os axiomas do produto escalar, xa que dadas calesquera funcións $f, g, h \in L_w^2$ cúmprese:

1. Simetría: $\langle f, g \rangle_w = \langle g, f \rangle_w$.
2. Bilinealidade: $\langle \alpha f + \beta g, h \rangle_w = \alpha \langle f, h \rangle_w + \beta \langle g, h \rangle_w, \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}$.
3. Definida positiva: $\langle f, f \rangle_w \geq 0$.

Polo tanto, a aplicación $\langle \cdot, \cdot \rangle_w$, é un produto escalar.

Definición 2.2. Dise que $f, g \in L_w^2$ son *ortogonais* respecto da función peso $w(x)$ (ou respecto do produto escalar $\langle \cdot, \cdot \rangle_w$) se

$$\langle f, g \rangle_w = \int_a^b w(x)f(x)g(x)dx = 0.$$

Visto isto, xa se está en condicións de definir os polinomios ortogonais. Denotarase P_n como o *espazo de polinomios de grao menor ou igual que n* , que é un subespazo de L_w^2 . Polo tanto, o produto escalar de polinomios será unha operación definida en $P_n \times P_n \longrightarrow \mathbb{R}$.

Definición 2.3. Dise que un polinomio $p_n(x)$ de grao n é *ortogonal en $[a, b]$ respecto da función peso $w(x)$* con todos os polinomios de grao menor ou igual que $n - 1$ se

$$\int_a^b w(x)p_n(x)q_{n-1}(x)dx = 0,$$

onde $q_{n-1}(x)$ pode ser calquera polinomio de grao $\leq n - 1$.

Definición 2.4. Dise que unha sucesión de polinomios $\{p_n\}_{n=0}^{\infty}$, onde $p_n(x)$ é un polinomio de grao n , é unha *sucesión de polinomios ortogonais* respecto de $w(x)$ se cumpre

$$\begin{aligned} \langle p_j, p_k \rangle_w &= \int_a^b w(x)p_j(x)p_k(x)dx = 0, \quad \text{para } j \neq k \\ \langle p_j, p_k \rangle_w &= \int_a^b w(x)p_j(x)p_k(x)dx > 0, \quad \text{para } j = k. \end{aligned}$$

sendo $j, k = 0, 1, 2, \dots$

Dirase que esta sucesión é *ortonormal* se ademais para todo $j, k = 0, 1, \dots$ se ten

$$\langle p_j, p_k \rangle_w = \int_a^b w(x) p_j(x) p_k(x) dx = 1, \quad \text{para } j = k.$$

A proposición que se enuncia a continuación, vai ser moi importante para a determinación dos polinomios ortogonais.

Proposición 2.5. *Un polinomio $p_n(x)$ ortogonal respecto de $w(x)$, que debe satisfacer a Definición 2.3, existe é único salvo factor multiplicativo.*

Demostración. Verase que é posible atopar a_0, \dots, a_{n-1} reais de modo que

$$\int_a^b w(x) [a_0 + a_1 x + \dots + a_{n-1} x^{n-1} + x^n] x^k dx = 0$$

para $k = 0, \dots, n-1$.

Polo tanto téñense as seguintes n ecuacións (unha para cada valor de k):

$$\begin{cases} \int_a^b w(x) [a_0 + a_1 x + \dots + a_{n-1} x^{n-1} + x^n] dx = 0 \\ \int_a^b w(x) [a_0 x + a_1 x^2 + \dots + a_{n-1} x^n + x^{n+1}] dx = 0 \\ \vdots \\ \int_a^b w(x) [a_0 x^{n-1} + a_1 x^n + \dots + a_{n-1} x^{2n-2} + x^{2n-1}] dx = 0. \end{cases} \quad (2.2)$$

Recórdese que, para cada $k = 0, 1, \dots, 2n-1$, os momentos están definidos mediante

$$\mu_k = \int_a^b w(x) x^k dx.$$

Polo tanto, as ecuacións (2.2) pódense escribir como o seguinte sistema linear

$$\begin{cases} a_0 \mu_0 + a_1 \mu_1 + \dots + a_{n-1} \mu_{n-1} = -\mu_n \\ a_0 \mu_1 + a_1 \mu_2 + \dots + a_{n-1} \mu_n = -\mu_{n+1} \\ \vdots \\ a_0 \mu_{n-1} + a_1 \mu_n + \dots + a_{n-1} \mu_{2n-2} = -\mu_{2n-1} \end{cases} \quad (2.3)$$

onde a_0, \dots, a_{n-1} son as incógnitas. A continuación verase que o sistema (2.3) é non singular e que ten unha única solución. Para probar isto, suporase que o sistema (2.3) é singular, e que polo tanto

$$\begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{n-1} \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mu_{n-1} & \mu_n & \cdots & \mu_{2n-2} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.4)$$

Isto equivale a atopar n constantes reais b_0, b_1, \dots, b_{n-1} , non todas iguais a cero, tales que exista unha combinación linear das filas de (2.4) igual a cero, e que polo tanto se teña o seguinte sistema linear

$$\begin{cases} b_0\mu_0 + b_1\mu_1 + \dots + b_{n-1}\mu_{n-1} = 0 \\ b_0\mu_1 + b_1\mu_2 + \dots + b_{n-1}\mu_n = 0 \\ \vdots \\ b_0\mu_{n-1} + b_1\mu_n + \dots + b_{n-1}\mu_{2n-2} = 0 \end{cases}$$

ou equivalentemente,

$$\begin{cases} \int_a^b w(x)[b_0 + b_1x + \dots + b_{n-1}x^{n-1} + x^n]dx = 0 \\ \int_a^b w(x)[b_0x + b_1x^2 + \dots + b_{n-1}x^n + x^{n+1}]dx = 0 \\ \vdots \\ \int_a^b w(x)[b_0x^{n-1} + b_1x^n + \dots + b_{n-1}x^{2n-2} + x^{2n-1}]dx = 0. \end{cases}$$

Multiplicando a primeira destas ecuacións por b_0 , a segunda por b_1 , e así sucesivamente, obtense que

$$\int_a^b w(x)[b_0 + b_1x + \dots + b_{n-1}x^{n-1} + x^n]^2 dx = 0 \quad (2.5)$$

Como b_0, b_1, \dots, b_{n-1} non son todas iguais a cero, o polinomio $x^n + b_{n-1}x^{n-1} + \dots + b_1x + b_0$ é distinto de cero. Polo tanto, por como se viu na Definición 2.1 que debe ser a función peso $w(x)$,

$$\int_a^b w(x)[x^n + b_{n-1}x^{n-1} + \dots + b_1x + b_0]^2 dx > 0.$$

Esto último contradí a expresión (2.5), polo que as constantes b_0, b_1, \dots, b_{n-1} tal e como foron escollidas non poden existir. Polo tanto, o sistema de ecuacións (2.2) é non singular e ten unha única solución, polo que os coeficientes a_0, a_1, \dots, a_{n-1} son únicos, o que implica que o polinomio

$$x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_1x + a_0$$

tamén o sexa, salvo factor multiplicativo. □

Este resultado, implica que, sen perda de xeneralidade, se poidan considerar polinomios ortogonais $p_n(x)$ de grao n , $n \geq 1$, mónicos (é dicir, con coeficiente principal igual a 1), da forma

$$p_n(x) = x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_1x + a_0,$$

onde a_0, \dots, a_{n-1} son números reais, e que ademais as sucesións de polinomios ortogonais tamén sexan únicas salvo factor multiplicativo. Polo tanto, a paartir de agora os polinomios ortogonais que se van considerar serán mónicos.

A proba da Proposición 2.5 proporciona un método para o cálculo dos polinomios ortogonais para unha función peso e un intervalo de integración determinados. Ilústrase este proceso no seguinte exemplo.

Exemplo 2.6. *Cálculo do polinomio de Legendre de 3º grao.*

Considéranse a función peso $w(x) = 1$ e o intervalo de integración $[-1, 1]$. Os momentos calcúlanse mediante

$$\mu_k = \int_a^b w(x)x^k dx, \quad k = 0, 1, \dots, 2n - 1$$

e neste caso correspóndense con

$$\begin{aligned} \mu_0 &= 2, \quad \mu_2 = \frac{2}{3}, \quad \mu_4 = \frac{2}{5}, \\ \mu_1 &= \mu_3 = \mu_5 = 0. \end{aligned}$$

Polo tanto, o sistema de ecuacións correspondente (calculado de igual modo que (2.3)) é

$$\begin{cases} 2a_0 + 0a_1 + \frac{2}{3}a_2 = 0 \\ 0a_0 + \frac{2}{3}a_1 + 0a_2 = -\frac{2}{5} \\ \frac{2}{3}a_0 + 0a_1 + \frac{2}{5}a_2 = 0 \end{cases}$$

de onde se obteñen os valores

$$a_0 = 0, \quad a_1 = -\frac{3}{5}, \quad a_2 = 0$$

para os coeficientes de $P_3^{(0)}(x)$. Chégase a que o polinomio buscado é

$$P_3^{(0)}(x) = x^3 - \frac{3}{5}x.$$

□

Cando os valores de n son altos, a resolución dun sistema como o do Exemplo 2.6 resulta un proceso moito máis complexo. O seguinte resultado, que establece unha relación de recurrencia para o cálculo dos polinomios ortogonais, fai que estes se poidan calcular dunha forma moito máis sinxela. Ademais, posteriormente tamén se verá que esta relación será de gran importancia para a obtención dos pesos e nodos de cuadratura nas fórmulas gaussianas.

Teorema 2.7. *Sexa unha función peso $w(x)$ definida en $[a, b]$, a sucesión de polinomios ortogonais $\{p_n\}_{n=0}^{\infty}$ satisfai a seguinte relación de recurrencia de tres termos:*

$$\begin{aligned} p_{k+1}(x) &= (x - a_k)p_k(x) - b_k p_{k-1}(x) \quad k \geq 0, \\ p_{-1}(x) &= 0, \quad p_0(x) = 1, \end{aligned} \tag{2.6}$$

de modo que

$$a_k = \frac{\langle xp_k, p_k \rangle_w}{\langle p_k, p_k \rangle_w} \quad k \geq 0, \quad (2.7)$$

$$b_k = \frac{\langle p_k, p_k \rangle_w}{\langle p_{k-1}, p_{k-1} \rangle_w} \quad k \geq 1, \quad (2.8)$$

denotando $b_0 = \int_a^b w(x) dx$.

Demostración. Os polinomios constrúense mediante a ortogonalización de Gram-Schmidt, e seguiráse un proceso inductivo partindo de que $p_0(x) = 1$.

Supóñase que, por hipótese de indución, todos os polinomios ortogonais como os anteriores están contruídos ata certo $i \leq k$. Pola Proposición 2.5, estes polinomios son únicos para cada $i = 0, \dots, k$.

Queda probar que existe un único polinomio de grao $k + 1$ tal que

$$\langle p_{k+1}, p_i \rangle_w = 0 \quad \text{para todo } i \leq k, \quad (2.9)$$

que satisfaga a relación de recurrencia (2.6).

Calquera polinomio $p_{k+1} \in P_{k+1}$ pódese escribir, dadas c_0, \dots, c_{k-1} constantes reais, como

$$p_{k+1}(x) = (x - a_k)p_k(x) + c_{k-1}p_{k-1}(x) + c_{k-2}p_{k-2}(x) + \dots + c_0p_0(x),$$

xa que o seu coeficiente principal e os de todos os polinomios p_i , $i \leq k$ son iguais a 1, posto que sa se viu que son mómicos. Como ademais $\langle p_i, p_j \rangle_w = 0$ para $j \leq k$, $i \neq j$, partindo de (2.9), obtense que

$$\langle p_{k+1}, p_k \rangle_w = \langle p_k, xp_k \rangle_w - a_k \langle p_k, p_k \rangle_w = 0 \quad (2.10)$$

$$\langle p_{k+1}, p_{i-1} \rangle_w = \langle xp_{i-1}, p_k \rangle_w + c_{i-1} \langle p_{i-1}, p_{i-1} \rangle_w = 0, \quad i \leq k. \quad (2.11)$$

Téñense os produtos escalares $\langle p_k, p_k \rangle_w = 0$ e $\langle p_{i-1}, p_{i-1} \rangle_w = 0$ para $i = 1, \dots, k$, xa que p_k^2 e p_{i-1}^2 son polinomios non negativos. Polo tanto, as dúas ecuacións anteriores teñen unha única solución. Despexando na primeira delas obtense a expresión (2.7) para os coeficientes a_k .

Agora, pola hipótese de indución, da relación de recurrencia (2.6),

$$p_i(x) = (x - a_{i-1})p_{i-1}(x) - b_{i-1}p_{i-2}(x), \quad i \leq k.$$

Polo tanto, resolvendo isto para $xp_{i-1}(x)$, obtense que $\langle xp_{i-1}, p_k \rangle_w = \langle p_i, p_k \rangle_w$ para $i \leq k$, e despexando en (2.11),

$$c_{i-1} = -\frac{\langle p_i, p_k \rangle_w}{\langle p_{i-1}, p_{k-1} \rangle_w} = \begin{cases} -b_k & \text{se } i = k \\ 0 & \text{se } j < k, \end{cases}$$

e obtense a expresión (2.8) para o cálculo dos coeficientes b_k . \square

Os coeficientes a_k e b_k que se acaban de definir no Teorema 2.7 son constantes e reais, con $b_k > 0$ para todo $k = 0, \dots, n$, e permiten representar a sucesión de polinomios de forma única e compacta.

A seguinte proposición, é unha propiedade importante sobre os ceros dos polinomios ortogonais, xa que estes ceros van ser os nodos na fórmula de cuadratura gaussiana correspondente.

Proposición 2.8. *Sexa $p_n(x)$ o polinomio de grao n ortogonal con todos os polinomios de grao $\leq n - 1$ no intervalo $[a, b]$ para $w(x)$. Entón, todos os ceros de $p_n(x)$ son reais, simples, e están no intervalo aberto (a, b) .*

Demostración. Supóñase que $p_n(x)$ ten un total de $s \leq n$ ceros diferentes, de modo que se pode escribir este polinomio como

$$p_n(x) = (x - x_0)^{m_0}(x - x_1)^{m_1} \dots (x - x_{s-1})^{m_{s-1}},$$

onde m_i é a multiplicidade de x_i para $i = 0, \dots, s - 1$, e $m_0 + \dots + m_{s-1} = n$. Ademais, tamén se suporá que estes ceros están nomeados de modo que x_0, \dots, x_{k-1} , $k \leq s$ son os ceros con multiplicidade impar, é dicir, aqueles nos que $p_n(x)$ cambia de signo.

Se $k = n$, todos os ceros de $p_n(x)$ son reais, distintos (é dicir, simples), e están en (a, b) . Polo tanto queda probada a proposición.

Se pola contra, se supón que $k < n$, verase a continuación que non pode ser posible. Neste caso, tómasse o polinomio

$$q_k(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{k-1})$$

(se $k = 0$, considerarase $q_0(x) = 1$), que cambia de signo en (a, b) nos mesmos puntos que $p_n(x)$, polo que o produto $q_k(x)p_n(x)$ non cambia de signo en (a, b) . Entón,

$$\int_a^b w(x)q_k(x)p_n(x)dx \neq 0. \quad (2.12)$$

Pero, como $k < n$, e $p_n(x)$ é ortogonal con todos os polinomios de grao $\leq n - 1$, tense que, por ser $q_k(x)$ un polinomio de grao $k \leq n - 1$,

$$\int_a^b w(x)q_k(x)p_n(x)dx = 0.$$

Isto contradí a expresión (2.12), e polo tanto, $k < n$ non pode ser posible, e necesariamente os n ceros de $p_n(x)$ son simples. \square

A continuación móstranse as principais familias clásicas polinomios ortogonais, que están asociadas ás funcións peso e intervalos do Cadro 2.1, e para os cales os coeficientes a_k e b_k son coñecidos de forma explícita, e polo tanto, tamén a sucesión de polinomios ortogonais asociada.

Polinomios ortogonais de Jacobi

Recórdese que a súa función peso asociada é $w(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$, $\alpha, \beta > -1$, e o intervalo de integración é $[-1, 1]$. Os polinomios de Jacobi de grao n adoitan denotarse por $P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$. Pola Proposición 2.8, sábese que os seus n ceros son reais e simples, e que están situados sobre o intervalo aberto $(-1, 1)$. Variando os valores de α e de β , obtéñense outras dúas familias de polinomios, que son as máis usadas nas cuadraturas gaussianas:

Os *polinomios de Legendre* danse cando $\alpha = \beta = 0$, polo que a función peso é $w(x) = 1$ e o intervalo de integración, $[-1, 1]$. Denotaranse por $P_n^{(0)}(x)$. A relación de recurrencia é neste caso

$$P_{k+1}^{(0)}(x) = xP_k^{(0)}(x) - \frac{k^2}{(2k-1)(2k+1)}P_{k-1}^{(0)}(x), \quad k \geq 0$$

polo que os correspondentes coeficientes son

$$a_k = 0, \quad k \geq 0 \quad \text{e} \quad b_k = \frac{k^2}{(2k-1)(2k+1)}, \quad 1k \geq 1. \quad (2.13)$$

Os *polinomios de Chebyshev de primeira especie* obtéñense tomando $\alpha = \beta = -1/2$. Adoitan denotarse por $T_n(x)$. Os coeficientes da relación de recurrencia son $a_k = 0$ para $k \geq 0$, e

$$b_k = \begin{cases} 1/2, & \text{se } k = 1 \\ 1/4, & \text{se } k \geq 2. \end{cases}$$

Polinomios ortogonais de Laguerre

Neste caso, a función peso é $w(x) = x^\alpha e^{-x}$, $\alpha > -1$ e o intervalo $[0, \infty)$. Estes polinomios denótanse por $L_n^{(\alpha)}(x)$. Pola Proposición 2.8, as súas n raíces son reais e simples están situadas no intervalo aberto $(0, \infty)$. Neste caso a relación de recurrencia que se establece é

$$L_{k+1}^{(\alpha)}(x) = (2k + \alpha + 1 - x)L_k^{(\alpha)}(x) - k(k + \alpha)L_{k-1}^{(\alpha)}(x), \quad k \geq 0,$$

e polo tanto, os coeficientes son $a_k = 2k + \alpha + 1$, $k \geq 0$ e $b_k = k(k + \alpha)$, $k \geq 1$.

Polinomios ortogonais de Hermite

Considéranse a función peso $w(x) = e^{-x^2}$ e o intervalo $(-\infty, \infty)$. Os polinomios de Hermite de grao n denótanse por $H_n(x)$. Pola Proposición 2.8, os seus n ceros son reais e simples e sitúanse en todo \mathbb{R} , xa que é o intervalo de integración. Polo tanto, a relación de recurrencia queda dada por

$$H_{k+1}(x) = xH_k(x) - \frac{k}{2}H_{k-1}(x), \quad k \geq 0,$$

onde os coeficientes son $a_k = 0$, $k \geq 0$ e $b_k = \frac{k}{2}$, $k \geq 1$.

2.2. Fórmulas de cuadratura de Gauss

2.2.1. Máximo grao de exactitude

A principal vantaxe á hora de usar as fórmulas de cuadratura gaussiana é que se alcanza un grao de exactitude de $2n + 1$, que, como se verá, é o máximo posible cando se está a falar de fórmulas integración numérica de $n + 1$ puntos.

Agora mostrarase que as fórmulas de cuadratura construídas cos nodos e os pesos calculados como se viu na sección anterior alcanzan este grao máximo de exactitude, e que non é posible superalo. Para probar esto danse os seguintes resultados. Antes, recórdase a definición do seguinte polinomio asociado aos $n + 1$ nodos de cuadratura x_0, \dots, x_n , xa que se empregará de novo en algunhas demostracións:

$$\pi_n = \prod_{i=0}^n (x - x_i).$$

Teorema 2.9. *Sexa k un número natural tal que $1 \leq k \leq n + 1$. Unha fórmula de cuadratura da forma*

$$I(f) = \int_a^b w(x)f(x)dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) + E_n(f)$$

ten grao de exactitude polo menos $n + k$ se e só se se cumpren as seguintes condicións:

1. *A fórmula de cuadratura é de tipo interpolatorio-polinómico.*
2. *Para todo polinomio $q(x) \in P_{k-1}$ se cumpre*

$$\langle \pi_n, q \rangle_w = \int_a^b w(x)\pi_n(x)q(x)dx = 0, \quad (2.14)$$

é dicir que $\pi_n(x)$ e $q(x)$ son polinomios ortogonais respecto de $w(x)$.

Demostración. (\Rightarrow) A primeira condición próbase no Teorema 1.5.

Para probar a segunda condición, considerárase un polinomio $q(x) \in P_k$. Polo tanto, o máximo grao que poderá alcanzar o polinomio $\pi_n(x) \cdot q(x)$ será $n+k$. Por hipótese, a fórmula de cuadratura ten grao de exactitude $n + k$, logo tense

$$\int_a^b w(x)\pi_n(x)q(x)dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i \pi_n(x_i)q(x_i) = 0,$$

que vale 0 porque $\pi_n(x_i) = 0$ para $i = 0, \dots, n$. Polo tanto, pola definición de ortogonalidade, pode dicirse que $\pi_n(x)$ é ortogonal respecto de $w(x)$ con todos os polinomios de grao $\leq n$.

(\Leftarrow) Sexa $p(x)$ un polinomio de grao $\leq n + k$ para certo valor $1 \leq k \leq n + 1$. Dividindo este polinomio $p(x)$ entre $\pi_n(x)$,

$$p(x) = q(x)\pi_n(x) + r(x), \quad q \in P_{k-1}, \quad r \in P_n.$$

Tendo en conta que $\pi_n(x_i) = 0$ para todo $i = 0, \dots, n$, tense que

$$p(x_i) = q(x_i)\pi_n(x_i) + r(x_i) = r(x_i), \quad i = 0, \dots, n.$$

Usando a condición 2, é dicir, que $\pi_n(x)$ é ortogonal con todos os polinomios de grao menor ou igual que n ,

$$\int_a^b w(x)\pi_n(x)q(x)dx = 0. \quad (2.15)$$

Como a fórmula de cuadratura é de tipo interpolatorio-polinómico e ten $n + 1$ puntos, xa se viu no primeiro capítulo, no Teorema 1.5, que é exacta para polinomios de grao n , logo

$$\int_a^b w(x)r(x)dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i r(x_i). \quad (2.16)$$

Polo tanto, a partir destas últimas expresións (2.15) e (2.16), tense que

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x)p(x)dx &= \int_a^b w(x)\pi_n(x)q(x)dx + \int_a^b w(x)r(x)dx = \\ &= \int_a^b w(x)r(x)dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i r(x_i) = \sum_{i=0}^n \alpha_i p(x_i), \end{aligned}$$

e pódese ver que a fórmula de cuadratura é exacta para calquera polinomio de grao $n + k$, onde $1 \leq k \leq n + 1$. \square

Corolario 2.10. *Nas condicións do Teorema 2.9, o máximo grao de exactitude da fórmula de cuadratura é $2n + 1$, e conséguese se e so se os $n + 1$ nodos son os ceros do polinomio ortogonal de grao $n + 1$ respecto da función peso $w(x)$ en $[a, b]$ e os pesos de cuadratura verifican*

$$\alpha_i = \int_a^b w(x)l_i(x)dx, \quad i = 0, \dots, n,$$

onde $l_i(x)$ son os polinomios característicos de Lagrange, que xa se definiron en (1.3).

Demostración. Tomando $k = n + 1$, tense que o grao de exactitude da fórmula é $2n + 1$. Verase que existe polo menos un polinomio de grao $2n + 2$ para o cal a fórmula non é exacta.

Considerarase o polinomio $\pi_n(x) \in P_{n+1}$, polo tanto $\pi_n^2(x) \in P_{2n+2}$. Claramente, por como xa se viu que debe ser a función peso $w(x)$,

$$\int_a^b w(x)\pi_n^2(x)dx > 0, \quad (2.17)$$

xa que $\pi_n^2(x)$ é un polinomio positivo en $[a, b]$. Pero por outra parte, estase supoñendo que a fórmula de cuadratura é exacta para $\pi_n^2(x)$, logo

$$\int_a^b w(x)\pi_n^2(x)dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i \pi_n^2(x_i) = 0, \quad (2.18)$$

o cal é unha contradición con (2.17). Polo tanto a fórmula de cuadratura non pode ter grao de exactitude $2n + 1$.

Nótese que na expresión (2.18), a segunda igualdade dáse porque x_0, \dots, x_n son os $n + 1$ ceros do polinomio $\pi_n(x)$. \square

Tamén en relación coa converxencia das fórmulas de Gauss, enúnciase o seguinte resultado sobre os pesos de cuadratura, que será importante ter en conta cando se fale da converxencia desta familia de fórmulas.

Proposición 2.11. *Nas condicións do Teorema 2.9, todos os pesos de cuadratura nas fórmulas de Gauss son positivos. Ademais, cúmprese*

$$\alpha_0 + \alpha_1 + \dots + \alpha_n = \int_a^b w(x)dx.$$

A proba da primeira parte pódese atopar en Stroud (1974), e da segunda en Martínez-Finkelshtein e Moreno-Balcázar (1999).

Recórdese que nas fórmulas de Newton-Cotes, tanto nas pechadas como nas abertas, a partir de certos valores de n existía a presenza de pesos de cuadratura negativos, e que este feito ocasionaba irregularidades en canto converxencia do método. Coas fórmulas de Gauss, isto non sucede, posto que a Proposición 2.11 asegura a positividade de todos os pesos de cuadratura.

2.2.2. Unicidade das fórmulas de Gauss

Agora probarase a unicidade das fórmulas de Gauss, é dicir, que para un intervalo $[a, b]$ e unha función peso $w(x)$ determinadas, existe unha única fórmula de cuadratura de $n + 1$ puntos con grao de exactitude $2n + 1$.

Teorema 2.12. *Se unha fórmula de cuadratura é exacta para todos os polinomios de grao $\leq 2n + 1$, os nodos deben ser os ceros do polinomio $p_{n+1}(x)$, ortogonal con todos os polinomios de grao $\leq n$ para o intervalo de integración $[a, b]$ e a función peso $w(x)$.*

Demostración. Sexa unha fórmula

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i), \quad (2.19)$$

exacta para polinomios de grao $\leq 2n + 1$. Considerando o polinomio

$$\pi_n(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i),$$

se $q_n(x)$ é un polinomio arbitrario de grao n , a fórmula (2.19) será exacta para $\pi_n(x)q_n(x)$. Polo tanto, como $\pi_n(x) = 0$ para $i = 0, \dots, n$, tense que

$$\int_a^b w(x)\pi_n(x)q_n(x)dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i \pi_n(x_i)q_n(x_i) = 0.$$

Equivalentemente a esta última expresión, pode dicirse que $\pi_n(x)$ é ortogonal con todos os polinomios de grao n . Pola Proposición 2.5 da unicidade dos polinomios ortogonais, dado un intervalo de integración e unha función peso determinados, tense que $\pi_n(x) = p_{n+1}(x)$, onde $p_{n+1}(x)$ é o polinomio ortogonal de grao $n + 1$ asociado ao intervalo $[a, b]$ e á función peso $w(x)$. \square

2.2.3. Estimación do erro nas fórmulas de Gauss

O teorema que se enuncia a continuación, cuxa proba se pode atopar en Stoer e Bulirsch (2010), dá a estimación do erro para as cuadraturas gaussianas.

Teorema 2.13. *Sexa unha función $f \in C^{2n+2}([a, b])$, o erro de cuadratura da fórmula está dado por*

$$E_n(f) = \int_a^b w(x)f(x)dx - \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \langle p_{n+1}, p_{n+1} \rangle_w, \quad \xi \in (a, b). \quad (2.20)$$

Neste tipo de fórmulas, a diferenza das de Newton-Cotes, canto maior é o número de nodos, menor é o erro cometido. É dicir, $E_n(f) \rightarrow 0$ cando $n \rightarrow \infty$. Isto implica que os resultados obtidos coas fórmulas de Gauss sexan máis exactos que os de Newton-Cotes, xa que o grao de precisión se duplica. Este feito unido a que, como xa se viu na Proposición 2.11, os pesos de cuadratura das fórmulas gaussianas son sempre positivos, fai que as aproximacións obtidas sexan considerablemente mellores. O problema que se atopa coas fórmulas de Gauss tratarase a continuación, e é a dificultade no cálculo dos pesos e dos nodos de cuadratura.

2.3. Cálculo das fórmulas de cuadratura gaussianas

Ata este momento, viuse que para obter as fórmulas de cuadratura gaussianas é necesario, primeiro calcular o polinomio ortogonal asociado ao intervalo e á función peso que correspondan, e a partir deste calcular os nodos e os pesos da fórmula. Os nodos recórdese que se corresponden

cos ceros deste polinomio ortogonal, e os pesos calcúlanse mediante os métodos proporcionados no primeiro capítulo para as fórmulas de tipo interpolatorio-polinómico. Para ver isto, proporciónase o seguinte exemplo.

Exemplo 2.14. *Cálculo dos ceros e dos pesos do polinomio ortogonal obtido no Exemplo 2.6.*

(a) Recórdese que o polinomio ortogonal do que se está a falar é o polinomio de Legendre de 3º grao, é dicir,

$$P_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$$

Os seus ceros pódense atopar resolvendo a ecuación

$$x^3 - \frac{3}{5}x = 0,$$

e téñense polo tanto os seguintes valores:

$$x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \quad x_1 = 0, \quad x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}.$$

(b) Para calcular os seus pesos, seguirase o mesmo proceso que no Exemplo 1.6, xa que as fórmulas de cuadratura gaussianas son do tipo interpolatorio-polinómico. Polo tanto, débese resolver o seguinte sistema linear

$$\begin{cases} \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 = 2 \\ \alpha_0 \left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \alpha_1 0 + \alpha_2 \sqrt{\frac{3}{5}} = 0 \\ \alpha_0 \frac{3}{5} + \alpha_1 0 + \alpha_2 \frac{3}{5} = \frac{2}{3}. \end{cases}$$

Obtéñense entón os seguintes valores para os pesos de cuadratura.

$$\alpha_0 = \alpha_2 = \frac{5}{9}, \quad \alpha_1 = \frac{8}{9}.$$

□

O problema que se atopa con este método que se acaba de ver é que, ao empregar valores altos para n , o cálculo dos ceros do polinomio $p_n(x)$ resulta complexo. Por eso se verá a continuación o método que se usa habitualmente na práctica para o cálculo dos nodos e dos pesos de cuadratura. Este proceso está baseado no uso dos coeficientes a_k e b_k definidos no Teorema 2.7.

Expresando a relación de recurrencia (2.6) como

$$p_k(x) = p_{k+1}(x) + a_k p_k(x) + b_k p_{k-1}(x), \quad k = 0, \dots, n-1, \quad (2.21)$$

defínese a *matriz de Jacobi* asociada a $w(x)$ do seguinte modo:

$$J_n = \begin{pmatrix} a_0 & 1 & \cdots & \cdots & 0 \\ b_1 & a_1 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & b_{n-2} & a_{n-2} & 1 \\ 0 & \cdots & \cdots & b_{n-1} & a_{n-1} \end{pmatrix}.$$

Polo tanto, considerando o vector de polinomios

$$\mathcal{P}_n(x) = \begin{pmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \\ p_{n-2}(x) \\ p_{n-1}(x) \end{pmatrix},$$

vese que a expresión (2.21) se pode escribir matricialmente como

$$\begin{pmatrix} xp_0(x) \\ xp_1(x) \\ \vdots \\ xp_{n-2}(x) \\ xp_{n-1}(x) - p_n(x) \end{pmatrix} = J_n \mathcal{P}_n(x).$$

Deste modo, vese que para as n raíces x_0, \dots, x_{n-1} de $p_n(x)$, que xa se viu pola Proposición 2.8 que son reais e simples, se cumpre que

$$x_i \mathcal{P}_i(x_i) = J_n \mathcal{P}_n(x_i) \quad i = 0, \dots, n-1,$$

polo que se pode ver que cada x_i é un autovalor da matriz J_n , sendo $\mathcal{P}_n(x_i)$ o seu autovector asociado. Nestas condicións pódese enunciar o seguinte resultado.

Proposición 2.15. *Sexan x_0, \dots, x_{n-1} os n ceros do polinomio ortogonal p_n , estes coinciden cos autovalores da matriz J_n , e ademais, como $p_n(x_i) = 0$, entón $\mathcal{P}_n(x_i)$ é o autovector asociado a x_i para cada $i = 0, \dots, n-1$.*

Recórdese que os ceros dos polinomios ortogonais coinciden cos nodos das fórmulas de cuadratura gaussiana. Pola Proposición 2.15, sábese que estes ceros tamén se poden calcular como os autovalores de J_n . Este proceso resulta moito máis sinxelo, pois existen algoritmos que o facilitan. Polo tanto, visto isto, queda claro que os coeficientes a_k e b_k son un elemento clave para a construción das fórmulas de cuadratura gaussianas, xa que son os elementos que compoñen a matriz J_n .

Tranformando J_n nunha matriz simétrica, que será denotada por J_n^* , o problema do cálculo dos autovalores será de máis fácil solución, xa que os algoritmos para o cálculo de autovalores son máis estables para matrices deste tipo. Polo tanto, definindo J_n^* como

$$J_n^* = \begin{pmatrix} a_0 & \sqrt{b_1} & \cdots & \cdots & 0 \\ \sqrt{b_1} & a_1 & \sqrt{b_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sqrt{b_{n-2}} & a_{n-2} & \sqrt{b_{n-1}} \\ 0 & \cdots & \cdots & \sqrt{b_{n-1}} & a_{n-1} \end{pmatrix},$$

enúncianse os dous resultados que seguen.

Teorema 2.16. *Os ceros x_0, \dots, x_{n-1} do n -ésimo polinomio ortogonal p_n correspóndense cos autovalores da matriz J_n^* .*

Pódese empregar, por exemplo, o método QR para o cálculo dos autovalores de J_n^* . Por outra parte, en canto aos pesos de cuadratura α_i , $i = 0, \dots, n-1$ tense

Teorema 2.17. *Sexa $v^{(i)} := (v_0^{(i)}, \dots, v_{n-1}^{(i)})^T$ un autovector de J_n^* , asociado ao autovalor x_i , de modo que $J_n^* v^{(i)} = x_i v^{(i)}$. Supóñase que o vector $v^{(i)}$ é tal que se cumpre*

$$v^{(i)T} v^{(i)} = \langle p_0, p_0 \rangle_w = \int_a^b w(x) dx. \quad (2.22)$$

Entón, os pesos da fórmula de cuadratura están dados por

$$\alpha_i = (v_0^{(i)})^2, \quad i = 0, \dots, n-1.$$

A proba deste resultado pódese atopar en Stoer e Bulirsch (2010).

Estes dous teoremas que se acaban de ver, dan lugar a un proceso para a obtención das fórmulas de cuadratura gaussianas moito máis eficiente que o xa visto no Exemplo 2.14, xa que se evita o cálculo dos ceros dos polinomios ortogonais. No exemplo que se mostra a continuación ilústrase este novo método, de forma que se pode comparar co empregado no Exemplo 2.14.

Exemplo 2.18. *Cálculo dos nodos e dos pesos da fórmula de cuadratura de Gauss-Legendre de 3 puntos.*

Para comezar, defínese a matriz J_n^* , que neste caso é

$$J_3^* = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1/3} & 0 \\ \sqrt{1/3} & 0 & \sqrt{4/15} \\ 0 & \sqrt{4/15} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

onde os valores de a_k e b_k empregados están calculados da forma vista en (2.13), de modo que

$$a_k = 0 \text{ para } k = 0, 1, 2, \text{ e } b_1 = \frac{1}{3}, b_2 = \frac{4}{15}.$$

Polo Teorema 2.16, os nodos de cuadratura, correspóndense cos autovalores da matriz (2.23), e neste caso obtéñense os seguintes valores:

$$x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, x_1 = 0, x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}},$$

que se corresponden cos obtidos no Exemplo 2.14. Os seus autovectores asociados son

$$\begin{aligned} v^{(0)} &= \left(-\frac{\sqrt{5}}{3}, 1, -\frac{2}{3} \right)^T \\ v^{(1)} &= \left(-\frac{2\sqrt{2}}{3}, 0, \frac{\sqrt{10}}{3} \right)^T \\ v^{(2)} &= \left(\frac{\sqrt{5}}{3}, 1, \frac{2}{3} \right)^T. \end{aligned}$$

(Debido á condición (2.22) necesaria no Teorema 2.17, a norma destes vectores debe ser igual a $b_0 = \int_{-1}^1 w(x)dx = \int_{-1}^1 1dx = 2$).

Polo tanto, aplicando o resultado do Teorema 2.17 (que $\alpha_i = (v_0^{(i)})^2$), obtéñense os seguintes valores para os pesos de cuadratura:

$$\alpha_0 = \frac{5}{9}, \alpha_1 = \frac{8}{9} \text{ e } \alpha_2 = \frac{5}{9},$$

que tamén se corresponden cos valores obtidos no Exemplo 2.14. □

Por último, cabe destacar que, empregando o mencionado algoritmo *QR* para determinar os autovalores de J_n^* , o cálculo das compoñentes $v_0^{(i)}$ de cada un dos autovectores $v^{(i)}$, para $i = 0, \dots, n-1$ inclúese dentro de dito algoritmo. Isto fai que o cálculo dos nodos x_i e dos pesos α_i se poida facer simultaneamente. Este procedemento pode atoparse en Golub e Welsch (1969).

Nótese que, definindo as submatrices principais de J_n^* por

$$J_k^* = \begin{pmatrix} a_0 & \sqrt{b_1} & \cdots & \cdots & 0 \\ \sqrt{b_1} & a_1 & \sqrt{b_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sqrt{b_{k-2}} & a_{k-2} & \sqrt{b_{k-1}} \\ 0 & \cdots & \cdots & \sqrt{b_{k-1}} & a_{k-1} \end{pmatrix}$$

os seus polinomios característicos, que son da forma $p_k(x) = \det(J_k^* - xI)$, satisfán a relación de recurrencia (2.6).

Capítulo 3

Integración de Romberg

Nos dous capítulos previos estudáronse as fórmulas de integración numérica de tipo interpolatorio-polinómico, a través das cales se construía unha aproximación $I_n(f)$ para o cálculo dunha integral $I(f)$, cuxo grao de exactitude dependía do número de nodos n escollidos, de modo que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} I_n(f) = I(f).$$

Un problema que se atopa con estes métodos é que o erro cometido en moitas ocasións é difícil de calcular, pois depende do valor da derivada r -ésima $f^{(r)}(\xi)$, onde $\xi \in (a, b)$, e r varía en función do tipo de fórmula que se estea considerando.

Por este motivo, agora, en lugar de empregar o grao de exactitude para medir a precisión das fórmulas, empregárase a orde de converxencia, que se define a continuación.

Definición 3.1. A *orde de converxencia dunha sucesión* defínese como a velocidade á que dita sucesión converge ao seu límite. Sexan $\{b_n\}_{n=0}^{\infty}$ e $\{a_n\}_{n=0}^{\infty}$ dúas sucesións tales que $\lim_{n \rightarrow \infty} b_n = 0$ e $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = a$. Se existe unha constante $K > 0$ de modo que

$$|a_n - a| = K|b_n| \quad \text{para certo } n \text{ grande,}$$

dise que que $\{a_n\}_{n \geq 0}$ converge a a con orde de converxencia $\mathcal{O}(b_n)$. En lugar da sucesión $\{b_n\}_{n=0}^{\infty}$ considerarase unha sucesión de valores de h converxente a 0.

O tipo de fórmulas que se estudará a continuación coñécese como *integración de Romberg*. A diferenza dos métodos de cuadratura vistos previamente, este non é do tipo interpolatorio-polinómico, senón que emprega a extrapolación de Richardson.

3.1. Extrapolación de Richardson

A extrapolación de Richardson é un método de derivación numérica a través do cal se pretende mellorar o cálculo da derivada dunha función determinada diminuindo o erro que se obtén a través do parámetro h . Para isto, combínanse diversas aproximacións de baixa orde de dita función para obter unha mellor aproximación con maior orde.

Considérese, por exemplo, unha función $N(h)$, definida por

$$N(h) = N_0 + kh^m + \mathcal{O}(h^{m+1}), \quad (3.1)$$

onde $N(h)$ é unha aproximación de N_0 de orde m e h tende a 0. O propósito da extrapolación de Richardson é obter unha nova aproximación da cantidade N_0 de maior orde. Neste caso será de orde $m + 1$.

Substituíndo agora o parámetro h por δh para certo $0 < \delta < 1$, reescríbese a expresión (3.1) como

$$N(\delta h) = N_0 + k(\delta h)^m + \mathcal{O}(h^{m+1}). \quad (3.2)$$

Multiplicando (3.1) por δ^m e restándolle (3.2), obtense

$$\begin{aligned} \delta^m N(h) - N(\delta h) &= (\delta^m - 1)N_0 + (\delta^m - 1)\mathcal{O}(h^{m+1}) \\ \frac{\delta^m N(h) - N(\delta h)}{\delta^m - 1} &= N_0 + \mathcal{O}(h^{m+1}). \end{aligned}$$

Obsérvese que empregando este método, obtéñense aproximacións da orde que se desexe, xa que continuando o proceso que se acaba de explicar, pódense ir desenvolvendo métodos de orde $\mathcal{O}(h^{m+2}), \mathcal{O}(h^{m+3}), \dots$, ata obter unha aproximación para N_0 tan precisa como se desexe.

3.2. Integración de Romberg

Este método de cuadratura numérica está baseado na extrapolación de Richardson. Recórdese que este algoritmo se aplica para fórmulas de derivación numérica. Nesta ocasión a idea é calcular diversas aproximacións preliminares dunha integral $I(f) = \int_a^b f(x)dx$ mediante a fórmula do trapecio composta para distintos valores de n . Despois, mediante o proceso de extrapolación de Richardson, mellóranse estas primeiras aproximacións para obter un mellor resultado, cuxa orde de converxencia sexa maior.

Xa se estudou no capítulo anterior que a fórmula do trapecio composta ten un erro de orde $\mathcal{O}(h^2)$, e que, para unha función $f \in C^\infty([a, b])$, fixando un número m de subintervalos de $[a, b]$,

$m \geq 1$, e tomando $h = \frac{b-a}{m}$ e os nodos $x_j = a + jh$ para $j = 0, \dots, m$, ten a forma

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{j=1}^{m-1} f(x_j) + f(b) \right] - \frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

Como xa se mencionou, para levar a cabo este proceso, primeiro é necesario calcular r aproximacións preliminares da integral $I(f)$ mediante a fórmula do trapecio composta, nas que o número de subintervalos vén dado pola cantidade $m = 2^j$, para $j = 0, \dots, r$. Polo tanto, $h_j = \frac{b-a}{2^j}$ e os nodos son $x_j = a + jh$ para cada $j = 0, \dots, r$. Deste modo, as $r + 1$ fórmulas do trapecio necesarias para iniciar a integración de Romberg están dadas por

$$\begin{aligned} I^0 &= \frac{h_0}{2} [f(a) + f(b)] - \frac{b-a}{12} h_0^2 f''(\xi_0), \quad \xi_0 \in (a, b) \\ I^1 &= \frac{h_1}{2} [f(a) + 2f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)] - \frac{b-a}{12} h_1^2 f''(\xi_1), \quad \xi_1 \in (a, b) \\ &\vdots \\ I^r &= \frac{h_r}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{j=1}^{2^r-1} f(x_j) + f(b) \right] - \frac{b-a}{12} h_r^2 f''(\xi_r), \quad \xi_r \in (a, b). \end{aligned}$$

Tendo en conta que $I^j = R(j, 0) + E^j$ para $j = 0, \dots, r$, onde se denota I^j como a fórmula do trapecio composta de 2^j subintervalos de $[a, b]$, $R(j, 0)$ como a aproximación obtida no proceso e E^j como o erro de cuadratura cometido nela, calcúlanse os valores de $R(j, 1)$ como segue. Este será o primeiro paso do proceso.

Para un valor $j = 1, \dots, r$ arbitrario considéranse

$$\begin{aligned} I^{j-1} &= R(j-1, 0) + E^{j-1} = \\ &= \frac{h_{j-1}}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{i=1}^{2^{j-1}-1} f(x_i) + f(b) \right] - \frac{b-a}{12} h_{j-1}^2 f''(\xi_{j-1}), \quad \xi_{j-1} \in (a, b) \\ I^j &= R(j, 0) + E^j = \\ &= \frac{h_j}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{i=1}^{2^j-1} f(x_i) + f(b) \right] - \frac{b-a}{12} h_j^2 f''(\xi_j), \quad \xi_j \in (a, b). \end{aligned}$$

Tomando a derivada f'' como unha función constante, tense que $f''(\xi_{j-1}) = f''(\xi_j)$, e polo tanto

$$\frac{E^{j-1}}{E^j} = \frac{-\frac{b-a}{12} h_{j-1}^2 f''(\xi_{j-1})}{-\frac{b-a}{12} h_j^2 f''(\xi_j)} = \left(\frac{h_{j-1}}{h_j} \right)^2 \Rightarrow E^{j-1} = E^j \left(\frac{h_{j-1}}{h_j} \right)^2.$$

Tendo en conta que $I(f) = I^j = I^{j-1} \Rightarrow R(j, 0) + E^j = R(j-1, 0) + E^{j-1}$,

$$R(j, 0) + E^j = R(j-1, 0) + E^j \left(\frac{h_{j-1}}{h_j} \right)^2 \Rightarrow E^j = \frac{R(j-1, 0) - R(j, 0)}{1 - \left(\frac{h_{j-1}}{h_j} \right)^2}. \quad (3.3)$$

Ademais, é trivial que $h_{j-1} = 2h_j$. Logo substituíndo esto na expresión (3.3), obtense

$$E^j = \frac{R(j-1, 0) - R(j, 0)}{1 - 2^2} = \frac{R(j, 0) - R(j-1, 0)}{3}$$

$$R(j, 0) + E^j = R(j, 0) + \frac{R(j-1, 0) - R(j, 0)}{1 - 2^2} = I^j + \frac{I^j - I^{j-1}}{3} = \frac{4}{3}R(j, 0) + \frac{1}{3}R(j-1, 0).$$

Así, para $j = 1, \dots, r$, tense

$$R(j, 1) = \frac{4}{3}R(j, 0) - \frac{1}{3}R(j-1, 0),$$

que son r novas aproximacións da integral $I(f)$ de orde $\mathcal{O}(h^4)$.

O seguinte paso do proceso consiste na obtención das $r-1$ aproximacións $R(j, 2)$ para $j = 2, \dots, r$. Débese ter en conta que que se calcularon previamente teñen orde de converxencia $\mathcal{O}(h^4)$, polo tanto o seu erro terá a forma Ch^4 , onde C é unha constante real.

Seguindo un procedemento análogo ao anterior, obtéñense no seguinte paso da extrapolación as $r-1$ aproximacións de orde $\mathcal{O}(h^6)$, que se calculan mediante

$$R(j, 2) = \frac{16}{15}R(j, 1) - \frac{1}{15}R(j-1, 1), \quad j = 2, \dots, r.$$

En xeral as aproximacións de $I(f)$ están dadas por

$$R(j, k) = \frac{1}{4^k - 1} (4^k R(j, k-1) - R(j-1, k-1)), \quad j = 1, \dots, r$$

$$k = j, \dots, r$$

e teñen orde $\mathcal{O}(h^{2(k+1)})$, polo que no último paso deste proceso, obterase unha aproximación $R(r, r)$ con orde de converxencia $\mathcal{O}(h^{2(r+1)})$.

Na seguinte táboa ilústranse os pasos seguidos neste proceso, ademais da orde de converxencia que se obtén en cada un dos pasos da extrapolación.

	Trapecio	Extrapolación	Extrapolación		Extrapolación
j	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^4)$	$\mathcal{O}(h^6)$...	$\mathcal{O}(h^{2(r+1)})$
0	$R(0, 0)$				
1	$R(1, 0)$	$R(1, 1)$			
2	$R(2, 0)$	$R(2, 1)$	$R(2, 2)$		
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	
r	$R(r, 0)$	$R(r, 1)$	$R(r, 2)$...	$R(r, r)$

Móstrase a continuación un exemplo que fai uso deste método que se acaba de explicar.

Exemplo 3.2. *Cálculo da integral $I(f) = \int_0^\pi \sin(x)dx$ mediante o proceso de integración de Romberg, para $r = 3$.*

Primeiro débense calcular as aproximacións preliminares mediante as fórmulas do trapecio compostas de 1, 2, 4 e 8 intervalos para a función $f(x) = \sin(x)$ no intervalo $[0, \pi]$:

$$\begin{aligned} R(0,0) &= \frac{\pi}{2} [\sin 0 + \sin \pi] = 0 \\ R(1,0) &= \frac{\pi}{4} \left[\sin 0 + 2 \sin \frac{\pi}{2} + \sin \pi \right] = 1.57079633 \\ R(2,0) &= \frac{\pi}{8} \left[\sin 0 + 2 \left(\sin \frac{\pi}{4} + \sin \frac{\pi}{2} + \sin \frac{3\pi}{4} \right) + \sin \pi \right] = 1.89611890 \\ R(3,0) &= \frac{\pi}{16} \left[\sin 0 + 2 \left(\sin \frac{\pi}{8} + \dots + \sin \frac{7\pi}{8} \right) + \sin \pi \right] = 1.97423160 \end{aligned}$$

todas con orde de converxencia $\mathcal{O}(h^2)$.

A continuación, empregando a fórmula

$$R(j,1) = \frac{4}{3}R(j,0) - \frac{1}{3}R(j-1,0), \quad j = 1, 2, 3$$

calcúlanse as seguintes aproximacións, que terán orde de converxencia $\mathcal{O}(h^4)$:

$$\begin{aligned} R(1,1) &= \frac{4}{3}R(1,0) - \frac{1}{3}R(0,0) = 2.09439511 \\ R(2,1) &= \frac{4}{3}R(2,0) - \frac{1}{3}R(1,0) = 2.00455976 \\ R(3,1) &= \frac{4}{3}R(3,0) - \frac{1}{3}R(2,0) = 2.00026917 \end{aligned}$$

Análogamente, para a obtención das aproximacións de orde $\mathcal{O}(h^6)$ emprégase a fórmula correspondente

$$R(j,2) = \frac{16}{15}R(j,1) - \frac{1}{15}R(j-1,1), \quad j = 2, 3$$

e obtense

$$\begin{aligned} R(2,2) &= \frac{16}{15}R(2,1) - \frac{1}{15}R(1,1) = 1.99857073 \\ R(3,2) &= \frac{16}{15}R(3,1) - \frac{1}{15}R(2,1) = 1.99998313. \end{aligned}$$

Finalmente, a última aproximación, que terá orde de converxencia $\mathcal{O}(h^8)$, está dada por

$$R(3,3) = \frac{64}{63}R(3,2) - \frac{1}{63}R(2,2) = 2.00000555.$$

Todo este proceso pódese resumir na seguinte táboa

j	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^4)$	$\mathcal{O}(h^6)$	$\mathcal{O}(h^8)$
0	0			
1	1.57079633	2.09439511		
2	1.89611890	2.00455976	1.99857073	
3	1.97423160	2.00026917	1.99998313	2.00000555

tomando o valor $R(3,3) = 2.00000555$ como o resultado obtido na aproximación. Neste caso coñécese o valor real da integral, $I(f) = \int_0^\pi \sin(x)dx = 2$, polo que se pode comprobar facilmente que o erro cometido nesta aproximación é $I(f) - R(3,3) = -0.00000555$.

En caso de que se desexe aumentar a orde de converxencia do método, aumentarase o valor de r . Se por exemplo se toma $r = 4$, calcúlanse os valores de $R(4,k)$ para $k = 1, 2, 3, 4$, e táboa anterior queda como

j	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^4)$	$\mathcal{O}(h^6)$	$\mathcal{O}(h^8)$	$\mathcal{O}(h^{10})$
0	0				
1	1.57079633	2.09439511			
2	1.89611890	2.00455976	1.99857073		
3	1.97423160	2.00026917	1.99998313	2.00000555	
4	1.99357034	2.00001659	1.99999975	2.00000001	1.99999999

de modo que a aproximación neste caso é $R(4,4) = 1.99999999$, con orde de converxencia $\mathcal{O}(h^{10})$, e cun erro de $I(f) - R(4,4) = 0.00000001$. \square

Bibliografía

- [1] Burden, R. L., Faires, D. J. e Burden, A. M. (2015). *Numerical Analysis*, 10th ed., Cengage Learning.
- [2] Conte, S. D. e de Boor, C. (1972). *Análisis numérico elemental: Un enfoque algorítmico*, 2^a ed., McGraw-Hill.
- [3] Davis, P. J. e Rabinowitz, P. (1975). *Methods of numerical integration*, Computer Science and Applied Mathematics. Academic Press, New York.
- [4] Flores, W. M. (2010). *Introducción a los métodos numéricos*. Instituto Tecnológico de Costa Rica.
- [5] Gautschi, W. (1994). *Algorithm 726: ORTHPOL—a package of routines for generating orthogonal polynomials and Gauss-type quadrature rules*. ACM Transactions on Mathematical Software, **20**, 21–62.
- [6] Gautschi W. (1982). *On generating orthogonal polynomials*. SIAM Journal on Scientific Computing, **3**, 289–317.
- [7] Golub, G. H. e Welsch, J. H. (1969). *Calculation of Gauss quadrature rules*. Mathematics of Computation, **23**, 221–230.
- [8] Isaacson, E. e Keller, H. B. (1994). *Analysis of Numerical Methods*. Dover Publications.
- [9] Martínez, J. J. (2001). *Polinomios ortogonales, cuadratura gaussiana y problemas de valores propios*. Margarita mathematica, 595–606.
- [10] Martínez-Finkelstein, A. e Moreno-Balcázar, J. J. (1999). *Métodos numéricos: Aproximación en \mathbb{R}* . Almería, España: Servicio de Publicaciones de la Universidad de Almería.
- [11] Mañas-Mañas J. F. e Pinta M. A. (2018). *Métodos Numéricos para el Análisis Matemático con Matlab*. UTMACH.

-
- [12] Quarteroni, A., Sacco, R. e Saleri, F. (2000). *Numerical Mathematics*, Texts in Applied Mathematics, 37. Springer-Verlag, New York.
- [13] Sanz-Senra, J.M. (2010). *Diez lecciones de cálculo numérico*, 2^a ed.. Universidad de Valladolid.
- [14] Stoer, J. e Bulirsch, R. (2010). *Introduction to Numerical Analysis*, 3rd ed., Texts in Applied Mathematics, 12, Springer.
- [15] Stroud, A. H. (1974). *Numerical Quadrature and Solution of Ordinary Differential Equations*, Applied Mathematical Sciences, 10. Springer-Verlag, New York.
- [16] Viaño, J. M., Burguera, M. (2000). *Interpolación*, Lecciones de métodos numéricos, 3, Tórculo Edicións.
- [17] *Integración numérica*. (s.f.). Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional del Nordeste.
<http://www.ing.unne.edu.ar/assets/pdf/academica/departamentos/computacion/comp/IN.pdf>