y así, para obtener $P(x; x_0, x_1, x_3)$ necesitamos manejar $P(x; x_0, x_1)$, $x - x_1$, $P(x; x_0, x_3)$, $x - x_3$.

Si se desea calcular únicamente el valor concreto de $P(x; x_0, x_1, x_2, x_3)$ en un punto $x=c$ basta sustituir x por c en todos los cálculos hechos y al final se obtendrá $P(c; x_0, x_1, x_2, x_3)$, es decir, el valor deseado.

Naturalmente esta elección de B y C en el teorema anterior para llegar a A no es única. Podríamos tomar por ejemplo $B = \{x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}\}$ y $C = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ y da lugar a otro método distinto llamado método o algoritmo de Neville.

5ª PARTE: INTEGRACION NUMERICA

TEMA 12º: INTEGRACION NUMERICA

Encontrar una fórmula explícita que nos de la primitiva de muchas funciones no es siempre posible. Por otra parte, en muchos problemas el integrando $f(x)$ no es conocido más que en determinados puntos o viene dado como solución de alguna ecuación diferencial que no puede resolverse explícitamente. Por este motivo estudiaremos procesos numéricos para aproximar el valor de la integral definida $\int_a^b f(x)\,dx$.

1. FORMULAS DE NEWTON - COTES

A) El grupo de fórmulas de Newton-Cotes que se estudia a continuación es el más importante y, al mismo tiempo, el más sencillo, por cuanto en cada una de ellas se toma como valor aproximado de $\int_a^b f$ el de $\int_a^b P$ siendo $P(x)$ el polinomio de interpolación de f correspondiente a una partición $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ de $[a,b]$, con puntos igualmente separados. Las condiciones suficientes para estimar el error son, como ocurría en la interpolación, relativamente fuertes y las fórmulas que lo expresan, teóricamente muy sencillas, aunque su demostración es difícil y se omitirá.

1.1. TEOREMA: (de Newton-Cotes)

Sea $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ una partición de $[a,b]$ con puntos igualmente separados

$$\Delta x_k = x_{k+1} - x_k = h = \frac{b-a}{n}$$

y $P(x)$ el polinomio de interpolación de f correspondiente a esta partición. Entonces, si $f \in \mathcal{C}^{n+1}[a,b]$ cuando n es impar o $f \in \mathcal{C}^{n+2}[a,b]$ cuando n es par se verifica

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b P(x)\,dx + \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(c)\,A(x)\,dx =$$

$$= \int_a^b P(x)\,dx + \begin{cases} + \dfrac{f^{(n+1)}(c_1)}{(n+1)!}\displaystyle\int_a^b A(x)\,dx & \text{si } n \text{ es impar} \\ + \dfrac{f^{(n+2)}(c_2)}{(n+2)!}\displaystyle\int_a^b A(x)\left(x - \frac{b+a}{2}\right)dx & \text{si } n \text{ es par} \end{cases}$$

siendo $c, c_1, c_2 \in \,]a,b[\,$, $A(x) = (x-a)(x-x_1)\cdots(x-b)$

Conviene tener en cuenta que la primera de las igualdades es evidente (polinomio de Newton) y la que requiere una demostración laboriosa es la última igualdad del enunciado.

Para el cálculo efectivo de las fórmulas precedentes interesa hacer en las integrales el siguiente cambio de variables:

$$x = a + \frac{b-a}{n} t = a + th \quad \text{de donde} \quad dx = h\,dt$$

con lo que se obtiene

$$\int_a^b f(x)\,dx = h \int_0^n f(a+th)\,dt =$$

$$= \sum_{k=0}^{n} \frac{f(a+kh)}{k(k-1)\cdots(k-k+1)(k-k-1)\cdots(k-n)}\, h \int_0^n t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)\,dt \; +$$

$$+ \begin{cases} + \dfrac{f^{(n+1)}(c_1)}{(n+1)!}\, h^{n+2} \displaystyle\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)\,dt & \text{si } n \text{ es impar} \\ + \dfrac{f^{(n+2)}(c_2)}{(n+2)!}\, h^{n+3} \displaystyle\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)(t-\tfrac{n}{2})\,dt & \text{si } n \text{ es par.} \end{cases}$$

Las primeras fórmulas de Newton-Cotes son las siguientes

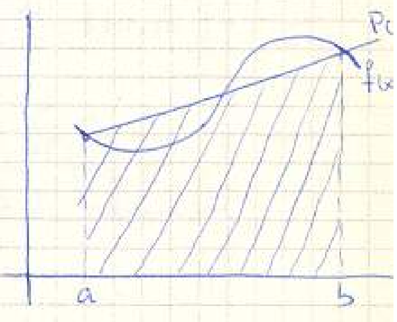
Para $n=1$

$$\int_a^b f = \frac{h}{2}\left[f(a) + f(b)\right] - \frac{h^3}{12} f''(c) \quad , \quad h = b-a$$

Para $n=2$: $\displaystyle\int_a^b f = \frac{h}{3}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] - \frac{h^5}{90} f^{IV}(c) \;,\; h = \frac{b-a}{2}$

Para $n=3$: $\displaystyle\int_a^b f = \frac{3}{8} h\left[f(a) + f\left(\frac{2a+b}{3}\right) + f\left(\frac{a+2b}{3}\right) + f(b)\right] - \frac{3h^5}{80} f^{IV}(c) \;,\; h = \frac{b-a}{3}$

B) Veamos la interpretación geométrica de las dos primeras formulas de Newton-Cotes:

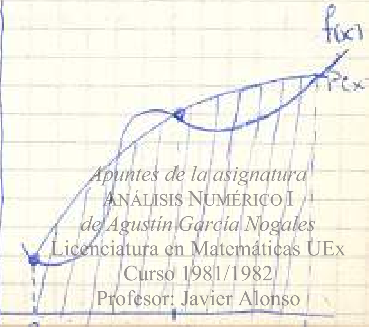


Para $n=1$: el número real $\frac{h}{2}[f(a)+f(b)]$ que se toma como valor aproximado de $\int_a^b f$ es el área del trapecio rayado en la figura, por lo que recibe el nombre de fórmula de los trapecios.

En la segunda ($n=2$), que se conoce con el nombre de fórmula de Simpson, el número real

$$\frac{h}{3}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]$$

representa el área limitada por la parábola que pasa por los puntos $(a, f(a))$, $\left(\frac{a+b}{2}, f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right)$, $(b, f(b))$.



c) Las fórmulas de los trapecios y de Simpson no suelen utilizarse como se ha explicado sino en forma generalizada que consiste en hacer una partición $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ (con n par en la fórmula de Simpson) de $[a,b]$, con un número de puntos igualmente separados que está en función del error que se estime en cada caso como aceptable, y aplicar entonces las citadas fórmulas a cada uno de los subintervalos:

$[x_k, x_{k+1}]$ en el caso de la fórmula de los trapecios

$[x_k, x_{k+2}]$, k par, en el caso de la fórmula de Simpson.

Sumando los valores obtenidos para cada uno de estos subintervalos resulta:

C.1. FORMULA DE LOS TRAPECIOS GENERALIZADA:

$$\int_a^b f(x)\,dx = h\left[\frac{1}{2}f(a) + f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2}f(b)\right] -$$
$$- \frac{h^3}{12}\left[f''(c_1) + f''(c_2) + \cdots + f''(c_n)\right]$$

siendo $h = \frac{b-a}{n}$, $x_k = a + kh$, $c_k \in]x_{k-1}, x_k[$.

Ahora bien, dada la continuidad en $]a,b[$ de f'' se verifica que
$\exists c \in]a,b[\;/\; f''(c_1) + f''(c_2) + \cdots + f''(c_n) = n f''(c)$
de donde resulta finalmente que el error puede expresarse en la forma $-\frac{nh^3}{12} f''(c)$, $c \in]a,b[$.

C.2. FORMULA DE SIMPSON GENERALIZADA:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left[f(a) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(b)\right] -$$
$$- \frac{h^5}{90}\left[f^{IV}(c_1) + f^{IV}(c_3) + \cdots + f^{IV}(c_{n-1})\right]$$

siendo $h = \frac{b-a}{n}$, $x_k = a + kh$, $c_k \in]x_{k-1}, x_{k+1}[$, k par.

Por ser f^{IV} continua en $]a,b[$ se verifica que
$\exists c \in]a,b[\;/\; f^{IV}(c_1) + \cdots + f^{IV}(c_{n-1}) = \frac{n}{2} f^{IV}(c)$
y el error puede expresarse por

$$-\frac{nh^5}{180} f^{IV}(c), \quad c \in]a,b[.$$

2. INTEGRACION NUMERICA CON PUNTOS BASE NO EQUIDISTANTES

A) Las fórmulas de integración desarrolladas en el apartado anterior partían de la base de que los puntos x_i estaban igualmente espaciados en el intervalo $[a,b]$. La fórmula de integración desarrollada en el aptdo 1.A) es de la forma

$$\int_a^b f \simeq \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) \qquad (\mathrm{I})$$

donde los $n+1$ valores w_i son, digamos, los pesos correspondientes a los $n+1$ valores de la función $f(x_i)$. Los valores x_i, por estar igualmente separados, quedan perfectamente determinados. Sin embargo, si las abscisas x_i de los puntos base no se determinan de ese modo y no se fija ninguna otra restricción sobre ellas habrá $2n+2$ parámetros a determinar (los w_i y los x_i) que prodrían ser aparentemente suficientes para determinar un polinomio de grado $2n+1$. Las fórmulas de cuadratura gaussiana que se expondrán más adelante tienen una forma idéntica a la de (I), es decir, se reducen a una suma ponderada de $n+1$ valores de la función. Las abscisas x_i no están igualmente espaciadas, pero se escogerán de forma que la suma de los $n+1$ valores de la función ya ponderados proporcione el valor exacto de la integral cuando $f(x)$ sea un polinomio de grado $2n+1$ o menor.

Antes de pasar al desarrollo de estas fórmulas de integración recordemos la definición de los polinomios ortogonales de Legendre:

Los polinomios de Legendre son ortogonales en el intervalo $[-1,1]$ con respecto a la función peso $w(x)=1$, es decir

$$\int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x)\,dx = 0 \quad \text{si } n\neq m, \qquad \int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx \neq 0, \ \forall n.$$

Los primeros polinomios de Legendre son

$$P_0(x) = 1$$
$$P_1(x) = x$$
$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1)$$
$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3-3x)$$
$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3)$$

La fórmula general de recurrencia es

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

B) CUADRATURA DE GAUSS-LEGENDRE:

Como se ha hecho anteriormente se calcula el valor de la integral $\int_a^b f$ aproximando f por un polinomio de interpolación de grado n $P_n(x)$ y se integra como sigue

$$\int_a^b f = \int_a^b P_n + \int_a^b R_n$$

En este caso, R_n es el error correspondiente al polinomio de interpolación de grado n. Como las abscisas x_i de los puntos base no están todavía especificadas, se utiliza la expresión de Lagrange para el polinomio interpolador con el término de error correspondiente, que admite puntos bases espaciados arbitrariamente

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i) + \left[\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\right]\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad a<\xi<b, \quad (\mathrm{II})$$

en donde $l_i(x) = \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}$.

Para simplificar en lo posible el desarrollo sin restar generalidad al resultado se transforma el intervalo de integración $[a,b]$ al $[-1,1]$ por medio de un adecuado cambio de variables. Admitiendo que todos los puntos base están comprendidos en el intervalo de integración, es decir

$$a \le x_0, x_1, \ldots, x_n \le b$$

Sea la nueva variable z tal que $-1\le z\le 1$ definida por

$$z = \frac{2x-(a+b)}{b-a} \qquad (\mathrm{III})$$

Se define a continuación la nueva función

$$F(z) = f(x) = f\left(\frac{(b-a)z+(a+b)}{2}\right)$$

Entonces (II) se transforma en

$$F(z) = \sum_{i=0}^{n} l_i(z) F(z_i) + \prod_{i=0}^{n}(z-z_i)\frac{F^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

en donde $l_i(z) = \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{z-z_j}{z_i-z_j}$ y $-1<\xi<1$

En la fórmula anterior z_i no es más que el valor x_i de la abscisa del punto base transformada de acuerdo con (III).

Si se supone ahora que $f(x)$ es un polinomio de grado $2n+1$, como

Se indicó en A) el término $\frac{F^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$ debe ser un polinomio de grado n como máximo, ya que $\sum_{i=0}^{n} l_i(z)F(z_i)$ es un polinomio de grado n como máximo y $\prod_{i=0}^{n}(z-z_i)$ es un polinomio de grado n+1.

Sea $\frac{F^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} = q_n(z)$, donde $q_n(z)$ es un polinomio de grado n

Entonces $F(z) = \sum_{i=0}^{n} l_i(z)F(z_i) + \left[\prod_{i=0}^{n}(z-z_i)\right] q_n(z)$ (IV)

Integrando ambos miembros en (IV) entre -1 y 1 se obtiene

$$\int_{-1}^{1} F(z)\,dz = \int_{-1}^{1}\sum_{i=0}^{n} l_i(z)F(z_i)\,dz + \int_{-1}^{1}\left[\prod_{i=0}^{n}(z-z_i)\right] q_n(z)\,dz. \qquad (V)$$

Prescindiendo de la última integral de (V) se obtiene

$$\int_{-1}^{1} F(z)\,dz \cong \sum_{i=0}^{n} F(z_i)\int_{-1}^{1} l_i(z)\,dz = \sum_{i=0}^{n} \omega_i F(z_i) \qquad (VI)$$

donde $\omega_i = \int_{-1}^{1} l_i(z)\,dz = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{z-z_j}{z_i-z_j}\,dz.$ (VI')

Observar que (VI) tiene la forma deseada y que la segunda integral de (V)

$$\int_{-1}^{1}\left[\prod_{i=0}^{n}(z-z_i)\right] q_n(z)\,dz \qquad (VII)$$

es la expresión del error para la fórmula de integración o cuadratura (VI)

A continuación el objetivo es escoger los z_i (equivalentemente, los x_i) de tal modo que el error (VII) se anule.

Para calcular estos valores z_i se hará uso de las propiedades de ortogonalidad de los polinomios de Legendre.

En primer lugar se desarrollan los dos polinomios $q_n(z)$ y $\prod_{i=0}^{n}(z-z_i)$ en función de los polinomios de Legendre.

Sean:

$$\prod_{i=0}^{n}(z-z_i) = b_0P_0(z) + b_1P_1(z) + \dots + b_{n+1}P_{n+1}(z) = \sum_{i=0}^{n+1} b_iP_i(z) \quad (VIII)$$

y $q_n(z) = c_0P_0(z) + \dots + c_nP_n(z) = \sum_{i=0}^{n} c_iP_i(z)$.

Se deduce entonces que

$$q_n(z)\prod_{i=0}^{n}(z-z_i) = \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n} b_ic_j P_i(z)P_j(z) + b_{n+1}\sum_{i=0}^{n} c_iP_i(z)P_{n+1}(z)$$

y la integral (VII) toma el valor

$$\int_{-1}^{1}\left[\prod_{i=0}^{n}(z-z_i)\right] q_n(z)\,dz = \int_{-1}^{1}\sum_{i=0}^{n} b_ic_i[P_i(z)]^2dz = \sum_{i=0}^{n} b_ic_i\int_{-1}^{1}[P_i(z)]^2dz.$$

por la ortogonalidad de los polinomios de Legendre.

Una forma de anular esta expresión consiste en especificar que los $n+1$ primeros coeficientes b_i, $i=0,1,\dots,n$ sean ceros. El coeficiente b_{n+1} de $P_{n+1}(z)$ todavía queda indeterminado. Sin embargo, debe ser tal que

$$b_{n+1} P_{n+1}(z) = \prod_{i=0}^{n} (z-z_i) \qquad (IX)$$

en virtud de (VIII). Se deduce de (IX) que $z_0, z_1, \dots, z_n$ deben ser las raices de $b_{n+1} P_{n+1}(z)$. De esta forma, los $n+1$ puntos base a utilizar en la fórmula de integración (VI) son las $n+1$ raices del correspondiente polinomio de Legendre de grado $n+1$. El peso relativo asignado a cada valor de la función $F(z_i)$ viene dado por

$$\omega_i = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{z-z_j}{z_i-z_j}\, dz \qquad (VI')$$

Las fórmulas de integración (VI) con puntos bases dados por las raices z_i y pesos ω_i dados por (VI') se llaman "FÓRMULAS DE CUADRATURA DE GAUSS-LEGENDRE".

C) UTILIDAD DE LA FORMULA DE CUADRATURA DE GAUSS-LEGENDRE:

Podría pensarse que la utilidad del método de Gauss-Legendre queda reducida al caso en que f sea un polinomio de grado $2n+1$ en cuyo caso el error cometido es cero. Sin embargo, esto no es así. Veamos por qué:

Consideremos el polinomio de interpolación de grado $2n+1$, P_{2n+1}, de la función $f(x)$, en $2n+2$ puntos, entre los que se encuentran las $n+1$ raices del polinomio de Legendre de grado $n+1$.

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b P_{2n+1}(x)\,dx + \int_a^b R_{2n+1}(x)\,dx.$$

Mediante la cuadratura de Gauss-Legendre podemos calcular el polinomio de interpolación de grado n, P_n, de la función P_{2n+1} en puntos no equidistantes (raices del polinomio de Legendre) con lo cual

$$\int_a^b P_{2n+1}(x)\,dx = \int_a^b P_n(x)\,dx$$

y por tanto $\displaystyle\int_a^b f = \int_a^b P_n + \int_a^b R_{2n+1}$

De esta forma, aproximando f mediante el polinomio de interpolación de grado n, $P_n(x)$, en los n+1 puntos que son raíces del polinomio de Legendre de grado n+1 se comete un error del mismo orden que el que se cometería interpolando con un polinomio de grado 2n+1 pero en puntos arbitrarios.