Capítulo 3

Derivación e integración numéricas.

1. Introducción.
2. Derivación numérica.
3. Integración numérica basada en interpolación.
4. Integración de Gauss.
5. Integración de Romberg.

3.1. Introducción.

El problema que nos planteamos ahora es el siguiente. Supongamos que conocemos los valores de una función $\{y_0, y_1, \dots, y_n\}$ en un cierto número de puntos $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$. Nos preguntamos si esa información puede utilizarse para obtener una estimación de cómo es la derivada de esa función en un cierto punto o su integral definida en un cierto intervalo. La respuesta es sí.

No obstante, hay que ser conscientes de que, en principio, existe un número infinito de funciones distintas que cumplen que

$$f(x_k) = y_k\,,\ \ k = 0, 1, \dots, n$$

y, por tanto, tendremos infinitas posibilidades para la derivada o la integral. Si de la función que estamos analizando sólo sabemos que es una función continua de variable real, de poco servirán los valores antes indicados. Por el contrario, si sabemos que se trata de un polinomio de grado, a lo sumo, n, entonces los valores dados definen unívocamente el polinomio y tendremos la derivada o la integral exactas. En general, la información disponible en las situaciones reales no determina completamente la función y eso implica que cualquier estimación numérica de su derivada o su integral requiere de una cota de error para que tenga significado.

3.2. Derivación numérica.

En principio, podemos calcular la derivada usando su definición en términos del límite:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}\,. \tag{3.1}$$

Si $f(x)$ es un polinomio de primer grado, esta expresión proporciona el valor exacto de la derivada para cualquier $h \neq 0$. En otros casos puede ocurrir lo mismo, pero de manera totalmente fortuita. Por tanto, es necesario hacer una estimación del error que se comete al utilizar la ecuación (3.1). Para ello consideramos el teorema de Taylor

$$f(x+h) = f(x) + h\,f'(x) + \frac{h}{2}\,f''(\xi)\,, \quad \xi \in (x, x+h)\,. \tag{3.2}$$

Esta ecuación es válida si $f(x)$ y $f'(x)$ son continuas en $[x, x+h]$ y $f''(x)$ existe en $(x, x+h)$. A partir de la ecuación (3.2) podemos escribir

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2}\,f''(\xi)\,, \quad \xi \in (x, x+h)\,. \tag{3.3}$$

Esta expresión es más útil que la ecuación (3.1) ya que, para un conjunto amplio de funciones (las que cumplen las condiciones antes indicadas), proporciona una fórmula numérica para la derivada y, además, un término que permite cuantificar el error que se comete. Este término consta de dos partes: una potencia de h y un factor que depende de una derivada de orden superior de $f(x)$. Esta derivada indica la clase de funciones para las que es válida la estimación del error. La potencia de h garantiza que el error converja a cero cuando h lo hace e indica la rapidez de esa convergencia.

Ejemplo:
Calcular la derivada de la función $f(x) = \operatorname{sen} x$ en el punto $x = \pi/3$. Usar $h = 0.1$ y $h = 0.01$.

Tenemos que

$$f'(x) \,=\, \cos x\,,$$

con lo que

$$f'\left(\frac{\pi}{3}\right) \,=\, \cos\frac{\pi}{3} \,=\frac{1}{2}\,.$$

El valor de la derivada numérica en el punto en cuestión, en el caso $h = 0.1$, es

$$\begin{aligned} f'\left(\frac{\pi}{3}\right) \;&\approx\; \frac{\operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{3}+0.1\right) - \operatorname{sen}\frac{\pi}{3}}{0.1} \\ &=\; \frac{0.9116155923255147 - 0.8660254037844386}{0.1} \,=\, 0.4559\,. \end{aligned}$$

El error que se comete lo podemos acotar a partir del término de error de la ecuación (3.3) y vale

$$\left|\frac{h}{2}\,f''(x)\right| \,=\, 0.05\,|\operatorname{sen}\xi| \,\leq\, 0.05\,.$$

El error cometido en realidad es

$$0.5 \,-\, 0.4559 \,=\, 0.0441 \,<\, 0.05\,.$$

Podríamos haber acotado mejor el error teniendo en cuenta que, de acuerdo con el teorema de Taylor,

$$\frac{\pi}{3} \,<\, \xi \,<\, \frac{\pi}{3}+0.1\,,$$

con lo que

$$|f''(\xi)| \,=|\operatorname{sen}\xi| \,\leq\, 0.91162$$

y, por tanto,

$$\left|\frac{h}{2}\,f''(\xi)\right| \,\leq\, 0.0456\,.$$

Veamos ahora lo que ocurre cuando $h = 0.01$. El valor de la derivada numérica en $\pi/3$ es ahora

$$\begin{aligned} f'\left(\frac{\pi}{3}\right) \;&\approx\; \frac{\operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{3}+0.01\right) - \operatorname{sen}\frac{\pi}{3}}{0.1} \\ &=\; \frac{0.8709820195421755 - 0.8660254037844386}{0.01} \,=\, 0.4957\,. \end{aligned}$$

Es decir que hemos cometido un error de

$$0.5 - 0.495662 = 0.004338 .$$

Acotando el error a partir del término de error tenemos

$$\left| \frac{h}{2} f''(x) \right| = 0.005 \, |\operatorname{sen} \xi| \leq 0.005 .$$

que, como vemos es, efectivamente, mayor que el error cometido. Si lo acotamos mejor, teniendo en cuenta que

$$\frac{\pi}{3} < \xi < \frac{\pi}{3} + 0.01 ,$$

con lo que

$$|f''(\xi)| = |\operatorname{sen} \xi| \leq 0.870982$$

y, por tanto,

$$\left| \frac{h}{2} f''(x) \right| \leq 0.004355 ,$$

que, como vemos, también acota el valor real.

El error se conoce como error de trucamiento ya que está asociado al hecho de que hemos truncado la serie de Taylor para obtener la expresión numérica de la derivada. Como hemos visto en el ejemplo, parece que para obtener la derivada con mayor precisión basta reducir el valor de h. Sin embargo esto puede presentar problemas en algunos casos. Veamos un ejemplo.

Ejemplo:
Calcular la derivada de la función $f(x) = \tan^{-1} x$ en el punto $x = \sqrt{3}$ para valores decrecientes de h.
En este caso

$$f'(x) = \frac{1}{x^2 + 1} ,$$

con lo que $f'(\sqrt{3}) = 1/4$.
Los resultados para valores decrecientes de h podemos verlos en la tabla. Como vemos, la derivada numérica se aproxima al valor exacto a medida que h disminuye. Sin embargo, a partir de $k = 12$ el error aumenta, a pesar de que h

disminuye. Esto se debe a que el cálculo de la diferencia $f(x+h) - f(x)$ sufre cada vez más de errores de redondeo: estamos calculando la diferencia entre dos números "grandes" para obtener un valor "pequeño".

k	$f(\sqrt{3}+1/2^k)$	$f(\sqrt{3})$	diferencia	$f'(\sqrt{3})$	error
0	1.21991700	1.04719800	0.17271930	0.17271930	0.07728067
1	1.14959100	1.04719800	0.10239390	0.20478770	0.04521225
2	1.10353300	1.04719800	0.05633535	0.22534140	0.02465861
3	1.07683400	1.04719800	0.02963668	0.23709340	0.01290657
4	1.06241000	1.04719800	0.01521207	0.24339310	0.00660691
5	1.05490600	1.04719800	0.00770801	0.24665620	0.00334381
6	1.05107700	1.04719800	0.00387994	0.24831630	0.00168370
7	1.04914400	1.04719800	0.00194650	0.24915210	0.00084791
8	1.04817200	1.04719800	0.00097488	0.24956830	0.00043167
9	1.04768500	1.04719800	0.00048783	0.24976980	0.00023016
10	1.04744200	1.04719800	0.00024400	0.24985650	0.00014347
11	1.04732000	1.04719800	0.00012201	0.24987160	0.00012843
12	1.04725900	1.04719800	0.00006099	0.24982240	0.00017761
13	1.04722800	1.04719800	0.00003048	0.24968440	0.00031559
14	1.04721300	1.04719800	0.00001522	0.24938860	0.00061138
15	1.04720500	1.04719800	0.00000759	0.24878710	0.00121285
16	1.04720100	1.04719800	0.00000378	0.24757920	0.00242075
17	1.04719900	1.04719800	0.00000187	0.24516100	0.00483905
18	1.04719900	1.04719800	0.00000092	0.24032310	0.00967686
19	1.04719800	1.04719800	0.00000044	0.23064690	0.01935311
20	1.04719800	1.04719800	0.00000020	0.21129410	0.03870592

k	$f(\sqrt{3}+1/2^k)$	$f(\sqrt{3})$	diferencia	$f'(\sqrt{3})$	error
0	1.21991692	1.04719755	0.17271936	0.17271936	0.07728064
2	1.10353293	1.04719755	0.05633538	0.22534153	0.02465847
4	1.06240966	1.04719755	0.01521211	0.24339368	0.00660632
6	1.05107753	1.04719755	0.00387998	0.24831867	0.00168133
8	1.04817246	1.04719755	0.00097491	0.24957777	0.00042223
10	1.04744159	1.04719755	0.00024404	0.24989432	0.00010568
12	1.04725858	1.04719755	0.00006103	0.24997357	0.00002643
14	1.04721281	1.04719755	0.00001526	0.24999339	0.00000661
16	1.04720137	1.04719755	0.00000381	0.24999835	0.00000165
18	1.04719850	1.04719755	0.00000095	0.24999959	0.00000041
20	1.04719779	1.04719755	0.00000024	0.24999990	0.00000010
22	1.04719761	1.04719755	0.00000006	0.24999997	0.00000003
24	1.04719757	1.04719755	0.00000001	0.25000000	0.00000000
26	1.04719755	1.04719755	0.00000000	0.25000000	0.00000000
28	1.04719755	1.04719755	0.00000000	0.25000002	0.00000002
30	1.04719755	1.04719755	0.00000000	0.25000010	0.00000010
32	1.04719755	1.04719755	0.00000000	0.25000039	0.00000039
34	1.04719755	1.04719755	0.00000000	0.25000154	0.00000154
36	1.04719755	1.04719755	0.00000000	0.25000617	0.00000617
38	1.04719755	1.04719755	0.00000000	0.25002468	0.00002468
40	1.04719755	1.04719755	0.00000000	0.25009871	0.00009871

El problema se soluciona parcialmente, haciendo el cálculo en doble precisión, tal y como puede verse en la segunda tabla. Sin embargo, vuelve a ocurrir lo mismo a partir de $k = 28$. El valor de h para el que se empieza a producir la degradación de los resultados depende, por tanto, de la precisión utilizada para las variables.

Es posible encontrar fórmulas más precisas que se suelen caracterizar por la potencia de h que presenta el término de error. Si se consideran los dos desarrollos de Taylor siguientes

$$f(x+h) = f(x) + h\,f'(x) + \frac{h^2}{2}\,f''(x) + \frac{h^3}{6}\,f'''(\xi_1)\,, \qquad (3.4)$$

$$f(x-h) = f(x) - h\,f'(x) + \frac{h^2}{2}\,f''(x) - \frac{h^3}{6}\,f'''(\xi_2)\,, \qquad (3.5)$$

y restamos ambas ecuaciones tenemos

$$f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{12}\,[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)]\,. \qquad (3.6)$$

Como vemos, el término de error incluye h^2 y esto implica una mayor precisión que en el caso anterior. Claro que hay que tener en cuenta que para que podamos utilizar ese término de error es necesario que $f'''(x)$ exista en los correspondientes intervalos. Si suponemos que, además, esta derivada es continua en $[x-h, x+h]$, podemos aplicar el teorema del valor medio de manera que existirá un $\xi \in [x-h, x+h]$ tal que

$$f'''(\xi) = \frac{1}{2}\left[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)\right] \tag{3.7}$$

y, por tanto,

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi)\,. \tag{3.8}$$

Esta técnica puede utilizarse para obtener expresiones que permiten el cálculo numérico de derivadas de órdenes superiores. Si se añade un término a los desarrollos de Taylor anteriores y se suman, entonces se obtiene, siguiendo pasos similares,

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi)\,, \quad \xi \in (x-h, x+h)\,. \tag{3.9}$$

Ejemplo:
Calcular la derivada de la función $f(x) = \tan^{-1} x$ en el punto $x = \sqrt{3}$ para valores decrecientes de h.
Si retomamos el ejemplo anterior y utilizamos la nueva expresión, vemos que se obtiene una mayor precisión, pero el problema de redondeo vuelve a presentarse, ahora a partir de $k = 8$.

k	$f(\sqrt{3}+1/2^k)$	$f(\sqrt{3}-1/2^k)$	diferencia	$f'(\sqrt{3})$	error
0	1.21991700	0.63191430	0.58800260	0.29400130	0.04400131
1	1.14959100	0.88898900	0.26060240	0.26060240	0.01060241
2	1.10353300	0.97722480	0.12630810	0.25261620	0.00261620
3	1.07683400	1.01417100	0.06266290	0.25065160	0.00065160
4	1.06241000	1.03113900	0.03127040	0.25016320	0.00016317
5	1.05490600	1.03927800	0.01562756	0.25004090	0.00004089
6	1.05107700	1.04326500	0.00781278	0.25000880	0.00000882
7	1.04914400	1.04523800	0.00390630	0.25000330	0.00000328
8	1.04817200	1.04621900	0.00195311	0.24999780	0.00000222
9	1.04768500	1.04670900	0.00097659	0.25000700	0.00000697
10	1.04744200	1.04695300	0.00048826	0.24998930	0.00001070
11	1.04732000	1.04707500	0.00024420	0.25005780	0.00005785
12	1.04725900	1.04713700	0.00012203	0.24991120	0.00008881
13	1.04722800	1.04716700	0.00006100	0.24984220	0.00015780
14	1.04721300	1.04718200	0.00003048	0.24969430	0.00030568
15	1.04720500	1.04719000	0.00001522	0.24939360	0.00060643
16	1.04720100	1.04719400	0.00000759	0.24878960	0.00121038
17	1.04719900	1.04719600	0.00000378	0.24758050	0.00241952
18	1.04719900	1.04719700	0.00000187	0.24516160	0.00483844
19	1.04719800	1.04719700	0.00000092	0.24032350	0.00967655
20	1.04719800	1.04719700	0.00000044	0.23064700	0.01935296

3.2.1. Derivación vía interpolación polinómica.

La interpolación polinómica puede utilizarse como punto de partida de un método general para calcular derivadas numéricas. Supongamos que conocemos los valores de la función $f(x)$ en $n+1$ puntos $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$. Como sabemos, podemos interpolar esa función mediante un polinomio de grado, a lo sumo, n, que podemos expresar, teniendo en cuenta la forma de Lagrange, como

$$p_n(x) \;=\; \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, l_i(x)\,, \tag{3.10}$$

donde

$$l_i(x) = \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} \frac{x-x_k}{x_i-x_k},\;\; i=0,1,\ldots,n\,. \tag{3.11}$$

Si tenemos en cuenta el error que se comete con esta interpolación, entonces

$$f(x) \;=\; p_n(x) \;+\; \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_x)\, w(x)\,, \tag{3.12}$$

donde

$$w(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)\,. \tag{3.13}$$

Si derivamos esta ecuación podemos escribir

$$f'(x) = p_n'(x) + \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_x)\, w'(x) + \frac{1}{(n+1)!}\, w(x)\, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\, f^{(n+1)}(\xi_x)\,. \tag{3.14}$$

Esta expresión se simplifica en el caso de que calculemos la derivada en uno de los puntos x_i iniciales, ya que entonces

$$w(x_i) = 0\,, \quad i = 0, 1, \ldots, n\,. \tag{3.15}$$

Además,

$$w'(x) = \sum_{k=0}^{n} \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n}(x - x_i)\,, \tag{3.16}$$

y, por tanto, en el punto $x = x_m$,

$$w'(x_m) = \prod_{\substack{i=0\\ i\neq m}}^{n}(x_m - x_i)\,. \tag{3.17}$$

Entonces, la derivada en dicho punto viene dada por

$$\begin{aligned} f'(x_m) &= \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, l_i'(x_m) + \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_x)\, w'(x_m) \\ &= \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, l_i'(x_m) + \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_x) \prod_{\substack{i=0\\ i\neq m}}^{n}(x_m - x_i)\,. \end{aligned} \tag{3.18}$$

Ejemplo:
Encontrar las fórmulas explícitas para $n = 1$ y calcular la derivada en x_0.
En este caso tenemos

$$\begin{aligned} l_0(x) &= \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \\ l_1(x) &= \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\,. \end{aligned}$$

Las correspondientes derivadas son

$$
\begin{aligned}
l_0'(x) &= \frac{1}{x_0 - x_1} \\
l_1'(x) &= \frac{1}{x_1 - x_0} \,.
\end{aligned}
$$

Por otro lado

$$w(x) \,=\, (x - x_0)\,(x - x_1)\,,$$

y

$$w'(x) \,=\, (x - x_1) \,+\, (x - x_0)\,.$$

Si definimos $x_1 - x_0 = h$, la derivada de la función en el punto $x = x_0$ será

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &= f(x_0)\,l_0'(x_0) \,+\, f(x_1)\,l_1'(x_0) \,+\, \frac{1}{2} f''(\xi_x)\,w'(x_0) \\
&= -f(x_0)\,\frac{1}{h} \,+\, f(x_0 + h)\,\frac{1}{h} \,-\, \frac{h}{2}\,f''(\xi_x) \\
&= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \,-\, \frac{h}{2}\,f''(\xi_x)\,.
\end{aligned}
$$

que coincide con la fórmula (3.3).

Ejemplo:
Encontrar las fórmulas explícitas para $n = 2$. Suponer los puntos equiespaciados y determinar la derivada en el punto x_1.
En este caso tenemos

$$
\begin{aligned}
l_0(x) &= \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} \\
l_1(x) &= \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \\
l_2(x) &= \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \,.
\end{aligned}
$$

Las correspondientes derivadas son

$$\begin{aligned} l_0'(x) &= \frac{2x - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} \\ l_1'(x) &= \frac{2x - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \\ l_2'(x) &= \frac{2x - x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}\,. \end{aligned}$$

Por otro lado

$$w(x) \,=\, (x - x_0)\,(x - x_1)\,(x - x_2)$$

y

$$w'(x) \,=\, (x - x_1)\,(x - x_2) \,+\, (x - x_0)\,(x - x_2) \,+\, (x - x_1)\,(x - x_2)\,.$$

Si ahora tenemos en cuenta que, al estar los puntos equidistantes,

$$x_1 \,-\, x_0 \,=\, x_2 \,-\, x_1 \,=\, h\,,$$

resulta, para el punto x_1,

$$\begin{aligned} l_0'(x_1) &= \frac{x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} \,=\, -\frac{1}{2h} \\ l_1'(x_1) &= \frac{2x_1 - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \,=\, 0 \\ l_2'(x_1) &= \frac{-x_0 + x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \,=\, \frac{1}{2h}\,. \end{aligned}$$

Por tanto

$$\begin{aligned} f'(x_1) &= f(x_0)\,l_0'(x_1) \,+\, f(x_1)\,l_1'(x_1) \,+\, f(x_2)\,l_2'(x_1) \,+\, \frac{1}{6}f'''(\xi_x)\,w'(x_1) \\ &= -f(x_1 - h)\,\frac{1}{2h} \,+\, f(x_1 + h)\,\frac{1}{2h} \,-\, \frac{h^2}{6}\,f'''(\xi_x) \\ &= \frac{f(x_1 + h) - f(x_1 - h)}{2h} \,-\, \frac{h^2}{6}\,f'''(\xi_x)\,, \end{aligned}$$

donde hemos tenido en cuenta que $w'(x_1) = -h^2$. Esta expresión de la derivada coincide con la ecuación (3.8).

3.2.2. Extrapolación de Richardson.

La extrapolación de Richardson es un procedimiento que permite incrementar la precisión en algunas expresiones numéricas, en particular las que propocionan la derivada. El punto de partida lo constituyen los desarrollos de Taylor siguientes:

$$f(x+h) \;=\; \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\, h^k\, f^{(k)}(x)\,, \tag{3.19}$$

$$f(x-h) \;=\; \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\, (-1)^k\, h^k\, f^{(k)}(x)\,. \tag{3.20}$$

Si restamos ambas ecuaciones, es evidente que todos los términos con k par se anularán y nos queda

$$\begin{aligned} f(x+h) \,-\, f(x-h) \;&=\; 2h\, f'(x) \,+\, \frac{2h^3}{3!}\, f'''(x) \,+\, \frac{2h^5}{5!}\, f^{(V)}(x) \,+\cdots \\ &=\; 2h \sum_{k=0}^{\infty} \frac{h^{2k}}{(2k+1)!}\, f^{(2k+1)}(x)\,. \end{aligned} \tag{3.21}$$

De aquí podemos obtener la derivada que viene dada por

$$f'(x) \;=\; \frac{f(x+h) \,-\, f(x-h)}{2h} \,-\, \sum_{k=1}^{\infty} \frac{h^{2k}}{(2k+1)!}\, f^{(2k+1)}(x)\,. \tag{3.22}$$

La ecuación anterior puede escribirse formalmente como

$$L \;=\; \phi_0(h) \,+\, \sum_{k=1}^{\infty} a_{2k}\, h^{2k}\,, \tag{3.23}$$

con

$$a_{2k} \;=\; -\,\frac{1}{(2k+1)!}\, f^{(2k+1)}(x)\,. \tag{3.24}$$

Aquí L representa la función derivada y

$$\phi_0(h) \;=\; \frac{f(x+h) \,-\, f(x-h)}{2h} \tag{3.25}$$

es la fórmula numérica para dicha derivada tal y como la proporciona la ecuación (3.8). Es evidente que $\phi_0(h)$ no puede calcularse cuando $h = 0$ y, como ya sabíamos, la ecuación sólo tiene sentido cuando $h \to 0$. Pero, cuando h es suficientemente pequeño, el término $a_2 h^2$ (el primer término de error) es el dominante. Vamos a ver si es posible eliminarlo. Si aplicamos la ecuación anterior para un paso $h/2$ tenemos

$$L = \phi_0 \left(\frac{h}{2}\right) + \sum_{k=1}^{\infty} a_{2k} \left(\frac{h}{2}\right)^{2k} . \tag{3.26}$$

Si multiplicamos esta ecuación por 4 y le restamos la anterior tendremos

$$\begin{aligned} L &= \frac{4}{3}\phi_0 \left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3}\phi_0(h) - \frac{1}{3}\sum_{k=2}^{\infty} \frac{4^k - 4}{4^k} a_{2k} h^{2k} \\ &= \phi_1(h) + \sum_{k=2}^{\infty} b_{2k} h^{2k} , \end{aligned} \tag{3.27}$$

donde hemos definido

$$\phi_1(h) = \frac{1}{3}\left[4\,\phi_0\left(\frac{h}{2}\right) - \phi_0(h)\right] \tag{3.28}$$

y

$$b_{2k} = -\frac{1}{3}\frac{4^k - 4}{4^k} a_{2k} . \tag{3.29}$$

Como vemos una combinación sencilla de $\phi_0(h)$ y $\phi_0(h/2)$ permite obtener L con una precisión de orden h^4.

Ejemplo:
Calcular la derivada de la función $f(x) = \tan^{-1} x$ en el punto $x = \sqrt{3}$ para valores decrecientes de h incluyendo la extrapolación de Richardson.
La tabla muestra los resultados. Como vemos, se obtiene una mayor precision (para $k = 5$) pero sigue presentándose el problema del redondeo.

	h	$\phi_0(h)$	error	$\phi_1(h)$	error
0	1.00000000	.29400130	.04400131	.00000000	.25000000
1	.50000000	.26060240	.01060241	.24946940	.00053056
2	.25000000	.25261620	.00261620	.24995410	.00004588
3	.12500000	.25065160	.00065160	.24999670	.00000326
4	.06250000	.25016320	.00016317	.25000040	.00000036
5	.03125000	.25004090	.00004089	.25000010	.00000012
6	.01562500	.25000880	.00000882	.24999810	.00000186
7	.00781250	.25000330	.00000328	.25000140	.00000143
8	.00390625	.24999780	.00000222	.24999590	.00000405
9	.00195313	.25000700	.00000697	.25001000	.00001004
10	.00097656	.24998930	.00001070	.24998340	.00001658
11	.00048828	.25005780	.00005785	.25008070	.00008070
12	.00024414	.24991120	.00008881	.24986230	.00013770
13	.00012207	.24984220	.00015780	.24981920	.00018080
14	.00006104	.24969430	.00030568	.24964500	.00035498
15	.00003052	.24939360	.00060643	.24929330	.00070669
16	.00001526	.24878960	.00121038	.24858830	.00141169
17	.00000763	.24758050	.00241952	.24717740	.00282256
18	.00000381	.24516160	.00483844	.24435530	.00564474
19	.00000191	.24032350	.00967655	.23871070	.01128925
20	.00000095	.23064700	.01935296	.22742160	.02257843

Lo interesante de este procedimiento es que puede iterarse. En efecto, si la ecuación (3.27) la aplicamos para $h/2$, la multiplicamos por 16 y le restamos la ecuación (3.27) queda

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{15}\left[16\,\phi_1\left(\frac{h}{2}\right) - \phi_1(h)\right] - \frac{1}{15}\sum_{k=3}^{\infty}\frac{4^k-16}{4^k}\,b_{2k}\,h^{2k} \\ &= \phi_2(h) + \sum_{k=3}^{\infty} c_{2k}\,h^{2k}\,, \end{aligned} \tag{3.30}$$

donde

$$\phi_2(h) = \frac{1}{15}\left[16\,\phi_1\left(\frac{h}{2}\right) - \phi_1(h)\right] \tag{3.31}$$

y

$$c_{2k} = -\frac{1}{15}\,\frac{4^k-16}{4^k}\,b_{2k}\,. \tag{3.32}$$

Esto nos permite escribir

$$\phi_k(h) = \frac{1}{4^k-1}\left[4^k\,\phi_{k-1}\left(\frac{h}{2}\right) - \phi_{k-1}(h)\right], \tag{3.33}$$

que nos da la derivada de la función con un error $O(h^{2k+2})$. En el algoritmo que nos permite esta iteración definimos los valores

$$D(k,n) \,=\, \phi_k\left(\frac{h}{2^{n-k}}\right). \tag{3.34}$$

Aquí $k = 0, 1, \ldots, M$ y $n = k, k+1, \ldots, M$. Entonces fijamos un valor de h (por ejemplo, $h = 1$) y calculamos los valores

$$D(0,n) \,=\, \phi_0\left(\frac{h}{2^{n}}\right), \tag{3.35}$$

para luego ir calculando, sucesivamente, los valores $D(k,n)$ de acuerdo con la ecuación (3.33)

$$D(k,n) \,=\, \frac{1}{4^k-1}\left[4^k\, D(k-1,n) \,-\, D(k-1,n-1)\right]. \tag{3.36}$$

Al final podemos calcular

$$D(M,M) \,\equiv\, \phi_M(h) \,=\, L \,+\, O(2^{2M+2}). \tag{3.37}$$

Ejemplo:
Calcular la derivada de la función $f(x) = \tan^{-1} x$ en el punto $x = \sqrt{3}$ para valores decrecientes de h incluyendo la extrapolación de Richardson.
La tabla muestra los resultados correspondientes a $D(M,M)$ con $M = 0, \ldots, 19$. Como vemos, para $M = 3$ se obtiene la mayor precision que resulta ser del mismo orden que la obtenida en el caso que hemos visto antes. De nuevo aparece el problema del redondeo.

M	$D(M,M)$	error	M	$D(M,M)$	error
0	.29400130	.04400131	10	.24998110	.00001891
1	.24946950	.00053054	11	.25008950	.00008950
2	.24998650	.00001355	12	.24984280	.00015724
3	.24999980	.00000019	13	.24981580	.00018424
4	.25000070	.00000069	14	.24962960	.00037038
5	.25000010	.00000015	15	.24926230	.00073773
6	.24999800	.00000198	16	.24852600	.00147401
7	.25000180	.00000179	17	.24705260	.00294738
8	.24999550	.00000450	18	.24410550	.00589447
9	.25001140	.00001141	19	.23821120	.01178877

3.3. Integración numérica basada en interpolación.

La integración numérica trata de resolver el problema de la evaluación aproximada de

$$I = \int_a^b \mathrm{d}x\, f(x)\,, \tag{3.38}$$

en los casos en los que (i) $f(x)$ es conocida analíticamente, pero no es posible encontrar una expresión analítica para su primitiva $F(x)$ tal que $F'(x) = f(x)$, o (ii) de $f(x)$ sólo se conocen sus valores en un conjunto de $n+1$ puntos $\{x_k, k = 0, 1, \ldots, n\}$.

Evidentemente, una opción simple de abordar el problema es utilizar el concepto de integral de Riemann y sustituir el valor de la integral por alguna de las correspondientes sumas de Riemann:

$$\begin{aligned} I &\approx \sum_{k=0}^{n-1} f(x_k)\,(x_{k+1} - x_k) && (3.39)\\ &\approx \sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1})\,(x_{k+1} - x_k) && (3.40)\\ &\approx \sum_{k=0}^{n-1} f\left(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}\right)(x_{k+1} - x_k)\,. && (3.41) \end{aligned}$$

Sin embargo, estas aproximaciones presentan un error considerable y, si bien es cierto que, al menos en principio, ese error debe disminuir al reducir el tamaño de los intervalos $x_{k+1} - x_k$, al hacerlo aumenta considerablemente el número de operaciones a realizar y, al mismo tiempo, también lo hacen los errores de redondeo.

Por esto, en la práctica, se suelen utilizar fórmulas de integración que están basadas en la interpolación de la función que se pretende integrar. Supongamos, por tanto, que conocemos el valor de la función $f(x)$ en los puntos $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$. En tal caso, podemos interpolar esa función mediante un polinomio de grado, a los sumo, n que, en su forma de Lagrange, viene dado por

$$f(x) \approx p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, l_i(x)\,, \tag{3.42}$$

con

$$l_i(x) = \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k}, \;\; i = 0, 1, \ldots, n\,. \tag{3.43}$$

En este caso, tendremos para la integral

$$I \;=\; \int_a^b \mathrm{d}x\, f(x) \;\approx\; \int_a^b \mathrm{d}x\, p_n(x) \;=\; \sum_{i=0}^{n} \, f(x_i) \, \int_a^b \mathrm{d}x\, l_i(x)\,, \tag{3.44}$$

que podemos escribir como

$$I \;\approx\; \sum_{i=0}^{n} \, A_i\, f(x_i)\,, \tag{3.45}$$

donde los coeficientes A_i vienen dados por

$$A_i \;=\; \int_a^b \mathrm{d}x\, l_i(x)\,. \tag{3.46}$$

Si los puntos $\{x_k, k = 0, 1, \ldots, n\}$ están equiespaciados, es decir, si

$$x_k \;=\; x_0 \;+\; k\, h\,, \tag{3.47}$$

con $h = (b - a)/n$, entonces la ecuación (3.45) recibe el nombre de fórmula de Newton-Cotes.

3.3.1. Regla del trapecio.

Vamos a ver el caso más sencillo: $n = 1$. Entonces los polinomios l_i serán

$$l_0(x) \;=\; \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \;=\; \frac{b - x}{b - a} \tag{3.48}$$

$$l_1(x) \;=\; \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \;=\; \frac{x - a}{b - a}\,, \tag{3.49}$$

los coeficientes A_i valdrán

$$A_0 \;=\; \int_a^b \mathrm{d}x\, \frac{b - x}{b - a} \;=\; \frac{b - a}{2} \tag{3.50}$$

$$A_1 \;=\; \int_a^b \mathrm{d}x\, \frac{x - a}{b - a} \;=\; \frac{b - a}{2}\,, \tag{3.51}$$

y la fórmula de cuadratura correspondiente es

$$I \approx \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right] , \tag{3.52}$$

que recibe el nombre de "regla del trapecio" y que proporciona un resultado exacto si la función a interpolar es un polinomio de grado, a lo sumo, 1.

Para determinar el error de esta fórmula de integración, definimos

$$F(x) = \int_a^x \mathrm{d}t\, f(t) , \tag{3.53}$$

de manera que $F'(x) = f(x)$. Si hacemos el desarrollo de Taylor de $F(x)$ en $x = b$ y definimos $b - a = h$ podemos escribir

$$\begin{aligned} I \equiv F(b) &= F(a) + F'(a)\, h + \frac{1}{2} F''(a)\, h^2 + \frac{1}{6} F'''(a)\, h^3 + \ldots & (3.54)\\ &= f(a)\, h + \frac{1}{2} f'(a)\, h^2 + \frac{1}{6} f''(a)\, h^3 + \ldots , & (3.55)\end{aligned}$$

donde hemos tenido en cuenta que $F(a) = 0$. Por otro lado

$$f(b) \equiv f(a+h) = f(a) + f'(a)\, h + \frac{1}{2} f''(a)\, h^2 + \ldots , \tag{3.56}$$

de manera que

$$\begin{aligned} \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right] &= \frac{h}{2}\left[f(a) + f(a+h)\right] \\ &= f(a)\, h + \frac{1}{2} f'(a)\, h^2 + \frac{1}{4} f''(a)\, h^3 + \ldots . & (3.57)\end{aligned}$$

Entonces

$$\begin{aligned} I &= \frac{h}{2}\left[f(a) + f(b)\right] - \frac{h^3}{12} f''(a) + \ldots & (3.58)\\ &= \frac{h}{2}\left[f(a) + f(b)\right] - \frac{h^3}{12} f''(\xi) , \quad \xi \in (a,b) . & (3.59)\end{aligned}$$

Si el intervalo $[a,b]$ se tienen más puntos, $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$, se puede aplicar la regla del trapecio a cada uno de los subintervalos obteniéndose la denominada "regla del trapecio compuesta", en la que

$$\begin{aligned} I = \int_a^b \mathrm{d}x\, f(x) &= \sum_{k=1}^{n} \int_{x_{k-1}}^{x_k} \mathrm{d}x\, f(x) & (3.60)\\ &\approx \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} (x_k - x_{k-1})\left[f(x_{k-1}) + f(x_k)\right] . & (3.61)\end{aligned}$$

Es interesante señalar que, en esta expresión general, los puntos no tienen porqué estar equiespaciados. Por otro lado hay que tener en cuenta que también podríamos haber obtenido este resultado sin más que utilizar un *spline* de grado 1 para interpolar la función $f(x)$ y, posteriormente, integrar dicho *spline*.

Si en la ecuación anterior suponemos que los puntos están equiespaciados, de forma que $(b-a)/n = h$, entonces

$$I \approx \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_n) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)\right]. \tag{3.62}$$

En este caso el error vale

$$E = -\frac{h^2}{12}(b-a)\, f''(\xi)\,, \quad \xi \in (a,b)\,. \tag{3.63}$$

3.3.2. Regla del Simpson.

Consideremos ahora la situación con $n = 2$, es decir, tres puntos equiespaciados: $x_0 = a$, $x_1 = (a+b)/2$ y $x_1 = b$. El polinomio interpolador es, ahora,

$$p_2 = f(a)\, l_0(x) + f\left(\frac{a+b}{2}\right) l_1(x) + f(b)\, l_2(x)\,. \tag{3.64}$$

Por tanto,

$$I = \int_a^b \mathrm{d}x\, f(x) \approx A_0\, f(a) + A_1\, f\left(\frac{a+b}{2}\right) + A_2\, f(b)\,. \tag{3.65}$$

Si particularizamos este resultado para la función $f(x) = 1$ resulta

$$\int_a^b \mathrm{d}x = b - a = A_0 + A_1 + A_2\,. \tag{3.66}$$

Para $f(x) = (x-a)/(b-a)$ resulta

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, \frac{x-a}{b-a} = (b-a)\int_0^1 \mathrm{d}y\, y = \frac{b-a}{2} = \frac{1}{2} A_1 + A_2\,. \tag{3.67}$$

Por último, si consideramos $f(x) = [(x-a)/(b-a)]^2$,

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, \left(\frac{x-a}{b-a}\right)^2 = (b-a)\int_0^1 \mathrm{d}y\, y^2 = \frac{b-a}{3} = \frac{1}{4} A_1 + A_2\,. \tag{3.68}$$

De esta forma tenemos un sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas cuya solución nos proporciona

$$A_0 \,=\, \frac{b-a}{6}\,,\quad A_1 \,=\, \frac{2(b-a)}{3}\,,\quad A_2 \,=\, \frac{b-a}{6}\,. \tag{3.69}$$

Entonces, la integral vale

$$I \,\approx\, \frac{b-a}{6}\left[f(a) \,+\, 4\,f\left(\frac{a+b}{2}\right) \,+\, f(b)\right]\,, \tag{3.70}$$

que se conoce como "regla de Simpson" y que es exacta para cualquier polinomio de grado, a lo sumo, 2 e, inesperadamente, también para los polinomios de grado 3. En efecto

$$\begin{aligned}\int_0^1 \mathrm{d}x\, p_3(x) \;&=\; \sum_{i=0}^{3} a_i \int_0^1 \mathrm{d}x\, x^i \,=\, \left[\sum_{i=0}^{3} \frac{a_i}{i+1}\, x^i\right]_0^1 \,=\, \sum_{i=0}^{3}\frac{a_i}{i+1} \\ &=\; a_0 \,+\, \frac{a_1}{2} \,+\, \frac{a_2}{3} \,+\, \frac{a_3}{4}\,,\end{aligned} \tag{3.71}$$

mientras que la fórmula de Simpson nos da

$$\begin{aligned}\int_0^1 \mathrm{d}x\, p_3(x) \;&=\; \frac{1}{6}\left[p_3(0) \,+\, 4\,p_3\left(\frac{1}{2}\right) \,+\, p_3(1)\right] \\ &=\; \frac{1}{6}\left[a_0 \,+\, 4\left(a_0 \,+\, \frac{a_1}{2} \,+\, \frac{a_2}{4} \,+\, \frac{a_3}{8}\right) \,+\, a_0 \,+\, a_1 \,+\, a_2 \,+\, a_3\right] \\ &=\; a_0 \,+\, \frac{a_1}{2} \,+\, \frac{a_2}{3} \,+\, \frac{a_3}{4}\,.\end{aligned} \tag{3.72}$$

El cálculo del error en este caso lo podemos hacer siguiendo una estrategia similar a la utilizada en el caso anterior, sin más que tener en cuenta que ahora $h = (b-a)/2$. Por un lado resulta que

$$\begin{aligned} I \,\equiv\, F(b) \;&=\; F(a) \,+\, F'(a)\,2h \,+\, \frac{1}{2}\,F''(a)\,(2h)^2 \,+\, \frac{1}{3!}\,F'''(a)\,(2h)^3 \\ &\quad +\frac{1}{4!}\,F^{(IV)}(a)\,(2h)^4 \,+\, \frac{1}{5!}\,F^{(V)}(a)\,(2h)^5 \,+\, \dots \\ &=\; f(a)\,2h \,+\, \frac{1}{2}\,f'(a)\,(2h)^2 \,+\, \frac{1}{3!}\,f''(a)\,(2h)^3 \\ &\quad +\frac{1}{4!}\,f'''(a)\,(2h)^4 \,+\, \frac{1}{5!}\,f^{(IV)}(a)\,(2h)^5 \dots\,.\end{aligned} \tag{3.73}$$

Por otro lado tenemos

$$\begin{aligned}
f(a+h) \;&=\; f(a) \,+\, f'(a)\,h \,+\, \frac{1}{2}\,f''(a)\,h^2 \,+\, \frac{1}{3!}\,f'''(a)\,h^3 \\
&\quad +\frac{1}{4!}\,f^{(IV)}(a)\,h^4 \,+\, \ldots \qquad (3.74)\\
f(a+2h) \;&=\; f(a) \,+\, f'(a)\,2h \,+\, \frac{1}{2}\,f''(a)\,(2h)^2 \,+\, \frac{1}{3!}\,f'''(a)\,(2h)^3 \\
&\quad +\frac{1}{4!}\,f^{(IV)}(a)\,(2h)^4 \,+\, \ldots\,. \qquad (3.75)
\end{aligned}$$

Entonces, el segundo miembro en la ecuación (3.70) resulta

$$\begin{aligned}
&\frac{b-a}{6}\left[f(a) \,+\, 4\,f\left(\frac{a+b}{2}\right) \,+\, f(b)\right] \;=\\
&\qquad = \frac{h}{3}\,\left[f(a) \,+\, 4\,f(a+h) \,+\, f(a+2h)\right]\\
&\qquad = f(a)\,2h \,+\, f'(a)\,2h^2 \,+\, \frac{4}{3}\,f''(a)\,h^3\\
&\qquad\quad +\frac{2}{3}\,f'''(a)\,h^4 \,+\, \frac{5}{18}\,f^{(IV)}(a)\,h^5 \,+\, \ldots\,. \qquad (3.76)
\end{aligned}$$

Por tanto, la integral la podemos escribir como

$$I \;=\; \frac{h}{3}\,\left[f(a) \,+\, 4\,f(a+h) \,+\, f(a+2h)\right] - \frac{h^5}{90}\,f^{(IV)}(a) \,-\, \ldots\,, \qquad (3.77)$$

lo que nos indica que el error es del orden de h^5.

Si el intervalo $[a, b]$ se divide en un número par de subintervalos, podemos aplicar a cada uno de esos subintervalos la regla de Simpson que acabamos de determinar. De esa forma se obtiene la fórmula de Simpson compuesta. En efecto

$$\begin{aligned}
\int_a^b \mathrm{d}x\,f(x) \;&=\; \int_{x_0}^{x_2}\mathrm{d}x\,f(x) \,+\, \int_{x_2}^{x_4}\mathrm{d}x\,f(x) \,+\, \ldots \,+\, \int_{x_{2n-2}}^{x_{2n}}\mathrm{d}x\,f(x)\\
&=\; \sum_{i=1}^{n}\int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}}\mathrm{d}x\,f(x) \;\approx\; \frac{h}{3}\,\sum_{i=1}^{n}\,\left[f(x_{2i-2}) \,+\, 4\,f(x_{2i-1}) \,+\, f(x_{2i})\right]\\
&=\; \frac{h}{3}\,\left[f(x_0) \,+\, 2\,\sum_{i=1}^{n-1}\,f(x_{2i}) \,+\, 4\,\sum_{i=1}^{n}\,f(x_{2i-1}) \,+\, f(x_{2n})\right], \qquad (3.78)
\end{aligned}$$

fórmula que presenta un error

$$E \;=\; -\frac{h^4}{180}\,(b-a)\,f^{(IV)}(\xi)\,, \quad \xi \in (a,b)\,. \tag{3.79}$$

Ejemplo:
Calcular la integral

$$I \;=\; \int_0^1 \mathrm{d}x\,\exp(x)\,, \tag{3.80}$$

usando las reglas compuestas del trapecio y de Simpson.
La integral vale $e-1$. Por otro lado, las dos reglas compuestas vienen dadas, respectivamente, por

$$\begin{aligned} I \;&\approx\; \frac{h}{2}\left[f(x_0)\,+\,2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)\,+\,f(x_n)\right] \\ I \;&\approx\; \frac{h}{3}\left[f(x_0)\,+\,2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i})\,+\,4\sum_{i=1}^{n} f(x_{2i-1})\,+\,f(x_{2n})\right]\,, \end{aligned}$$

y los errores respectivos son

$$\begin{aligned} E \;&\approx\; \frac{h^2}{12}\,(b-a)\,f''(\xi) \\ E \;&\approx\; \frac{h^4}{180}\,(b-a)\,f^{IV}(\xi)\,. \end{aligned}$$

Los resultados que se obtienen para valores de h variando entre 0.5 y 0.005 son los que se muestran en la tabla.

h	trapecio	error	Simpson	error
0.5	1.754	3.6E-02	1.71886	5.8E-04
0.1	1.7197	1.4E-03	1.71828278	9.5E-07
0.05	1.71864	3.6E-04	1.718281888	6.0E-08
0.01	1.718296	1.4E-05	1.718281828656	9.5E-11
0.005	1.7182854	3.6E-06	1.718281828465	6.0E-12

Nótese que los errores obtenidos para $h=0.05$ y 0.005 difieren en dos órdenes de magnitud en el caso de la regla del trapecio y cuatro en la de Simpson.

3.3.3. Fórmulas de integración generales.

De manera similar a lo que hicimos para obtener las fórmulas de cuadratura de Newton-Cotes, es posible obtener fórmulas de integración más generales, del tipo

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, w(x)\, f(x) \;\approx\; \sum_{i=0}^{n} A_i\, f(x_i)\,, \tag{3.81}$$

donde $w(x)$ puede ser cualquier función peso. Ahora los coeficientes vienen dados por

$$A_i \;=\; \int_a^b \mathrm{d}x\, w(x)\, l_i(x)\,. \tag{3.82}$$

Ejemplo:
Encontrar una fórmula del tipo

$$\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}x\; \cos x\, f(x) \;\approx$$
$$\approx A_0\, f\left(-\frac{3}{4}\pi\right) \;+\; A_1\, f\left(-\frac{1}{4}\pi\right) \;+\; A_2\, f\left(\frac{1}{4}\pi\right) \;+\; A_3\, f\left(\frac{3}{4}\pi\right)\;,$$

que sea exacta para polinomios de grado 3.
Como un polinomio de grado 3 es una combinación lineal de los monomios 1, x, x^2 y x^3, vamos a calcular las integrales para $f(x) = x^k$, $k = 0, 1, 2, 3$ y tendremos un sistema de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas. En efecto

$$\begin{aligned}
\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}x\; \cos x \;=\; 0 \;&=\; A_0 \,+\, A_1 \,+\, A_2 \,+\, A_3 \\
\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}x\, x\; \cos x \;=\; 0 \;&=\; -\,\frac{3\pi}{4}\, A_0 \,-\, \frac{\pi}{4}\, A_1 \,+\, \frac{\pi}{4}\, A_2 \,+\, \frac{3\pi}{4}\, A_3 \\
\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}x\, x^2\; \cos x \;=\; -4\pi \;&=\; \left(\frac{3\pi}{4}\right)^2 A_0 \,+\, \left(\frac{\pi}{4}\right)^2 A_1 \\
&\qquad +\, \left(\frac{\pi}{4}\right)^2 A_2 \,+\, \left(\frac{3\pi}{4}\right)^2 A_3 \\
\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}x\, x^3\; \cos x \;=\; 0 \;&=\; -\,\left(\frac{3\pi}{4}\right)^3 A_0 \,-\, \left(\frac{\pi}{4}\right)^3 A_1 \\
&\qquad +\, \left(\frac{\pi}{4}\right)^3 A_2 \,+\, \left(\frac{3\pi}{4}\right)^3 A_3
\end{aligned}$$

La segunda y la cuarta ecuaciones nos permiten encontrar

$$A_0 \,=\, A_3 \quad A_1 \,=\, A_2\,,$$

resultado que es obvio de acuerdo a la simetría del problema. La primera de las ecuaciones nos da, entonces,

$$A_1 \,=\, -\,A_0\,,$$

y, por último, la tercera de las ecuaciones nos da

$$A_0 \,=\, -\,\frac{4}{\pi}\,.$$

Por tanto, la fórmula buscada es

$$\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}x\; \cos x f(x) \,\approx\, \frac{4}{\pi}\left[-\,f\left(-\frac{3}{4}\pi\right) \,+\, f\left(-\frac{1}{4}\pi\right) \,+\, f\left(\frac{1}{4}\pi\right) \,-\, f\left(\frac{3}{4}\pi\right)\right].$$

3.4. Integración de Gauss.

La interpolación polinómica nos ha permitido calcular integrales

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, f(x) \,\approx\, \sum_{i=0}^{n} A_i\, f(x_i)\,,$$

que proporcionan el resultado exacto para polinomios $p_n(x)$. En este caso, los puntos $\{x_k, k = 0, 1, \ldots, n\}$ se eligen a priori y los coeficientes se determinan unívocamente imponiendo que la aproximación anterior sea una igualdad,

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, p_n(x) \,=\, \sum_{i=0}^{n} A_i\, p_n(x_i)\,,$$

en el caso de un polinomio. Podemos preguntarnos ahora si es posible hacer otra elección de los puntos x_k que sea mejor. Por ejemplo, cabría plantearse si existe una elección de puntos tal que

$$A_i \,=\, c\,,\;\; 0 \leq i \leq n\,,$$

de manera que, entonces,

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, f(x) \;\approx\; c \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\,.$$

Se sabe que este tipo de ecuaciones existe sólo si $n \leq 8$ y $n \neq 7$ y se denominan fórmulas de cuadratura de Chebyshev. Por ejemplo, para $n = 4$

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x\, f(x) \;\approx\; \frac{2}{5}\left[f(-\alpha) + f(-\beta) + f(0) + f(\beta) + f(\alpha)\right]\,,$$

con

$$\alpha = \sqrt{(5+\sqrt{11})/12}\,, \quad \beta = \sqrt{(5-\sqrt{11})/12}\,.$$

La fórmula es exacta para polinomios $p_4(x)$. Otro ejemplo es el siguiente

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x\, f(x) \;\approx\; \frac{\pi}{n} \sum_{i=1}^{n} F\left[\cos\frac{(2i-1)\pi}{2n}\right]\,,$$

donde $F(x) = f(x)\sqrt{1-x^2}$. Ésta es la conocida como fórmula de cuadratura de Hermite, que resulta ser exacta para las funciones $\sqrt{1-x^2}p_{2n-1}(x)$. En este caso, con sólo n evaluaciones de $f(x)$, tenemos una fórmula que es exacta en un espacio lineal de dimensión $2n$.

Formulamos el problema en la forma

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, w(x)\, f(x) \;\approx\; \sum_{i=0}^{n} A_i\, f(x_i)\,,$$

donde $w(x)$ es una función peso. Esta fórmula es exacta para un polinomio $p_n(x)$ si y sólo si

$$A_i \;=\; \int_a^b \mathrm{d}x\, w(x) \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\,.$$

Pues bien, es posible encontrar un conjunto de puntos $\{x_k, k = 0, 1, \ldots, n\}$ tal que la fórmula de cuadratura anterior es exacta para polinomios de grado, a lo sumo, $2n+1$. La idea se debe a Gauss.

Teorema. *Sea $w(x)$ una función peso definida positiva y sea $q_{n+1}(x)$ un polinomio de grado, a lo sumo, $n+1$ no nulo que verifica que*

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, q_{n+1}(x)\, p_n(x)\, w(x) \;=\; 0\,,$$

es decir, $q_{n+1}(x)$ es w-ortogonal a cualquier polinomio de grado, a lo sumo, n. Entonces, si $\{x_k, k = 0, 1, \ldots, n\}$ son los ceros de $q_{n+1}(x)$, la fórmula de cuadratura

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, w(x)\, f(x) \approx \sum_{k=0}^{n} A_k\, f(x_k)\,,$$

es exacta para todo polinomio de grado, a lo sumo, $2n + 1$.

Demostración. Supongamos que $f(x)$ es un polinomio de grado, a lo sumo, $2n+1$. Entonces

$$f(x) = q_{n+1}(x)\, p_n(x) + r_n(x)$$

y, por tanto,

$$\begin{aligned}\int_a^b \mathrm{d}x\, w(x)\, f(x) &= \int_a^b \mathrm{d}x\, q_{n+1}(x)\, p_n(x)\, w(x) + \int_a^b \mathrm{d}x\, r_n(x)\, w(x) \\ &= \sum_{i=0}^{n} A_i\, r_n(x_i) = \sum_{i=0}^{n} A_i\, f(x_i)\,,\end{aligned}$$

ya que

$$f(x_i) = r(x_i)\,.$$

Teorema. *Sea $w(x)$ una función peso positiva y continua en $[a, b]$. Sea $f(x)$ otra función no nula y continua en $[a, b]$ que es w-ortogonal a cualquier polinomio $p_n(x)$. Entonces $f(x)$ cambia de signo al menos $n + 1$ veces en (a, b).*

Demostración. Como

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, w(x)\, f(x)\, p_n(x) = 0\,,$$

entonces

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, w(x)\, f(x) = 0\,,$$

ya que $p_n(x) = 1$ es un caso particular de grado, a lo sumo, n. La ecuación anterior implica que $f(x)$ cambia de signo una vez, al menos. Supongamos ahora que $f(x)$ cambia de signo sólo r veces, con $r \leq n$. Escojamos $r + 2$ puntos t_i

$$a = t_0 < t_1 < t_2 < \ldots < t_r < t_{r+1} = b\,,$$

tales que $f(x)$ sólo tiene un signo en cada intervalo (t_{i-1}, t_i). Es evidente que el polinomio

$$p_r(x) \;=\; \prod_{i=0}^{r} (x - t_i)$$

tiene la misma propiedad que $f(x)$ en cuanto al signo. Por tanto

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, w(x)\, f(x)\, p_r(x) \;\neq\; 0\,.$$

Pero esto es una contradicción ya que $p(x)$ es un polinomio de grado, a lo sumo, n. Por tanto, $f(x)$ cambia de signo $n+1$ veces, al menos.

En el caso de la integral que Gauss estudió,

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x\, f(x)\,,$$

las fórmulas para $n = 1$ y $n = 4$ son

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x\, f(x) \;&\approx\; f(-\alpha) \,+\, f(\alpha) \\
\alpha \;&=\; \frac{1}{\sqrt{3}} \\
\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x\, f(x) \;&\approx\; \sum_{k=0}^{4} A_k\, f(x_k) \\
-x_0 \;=\; x_4 \;&=\; \frac{1}{3}\sqrt{5 + 2\sqrt{\frac{10}{7}}} \\
-x_1 \;=\; x_3 \;&=\; \frac{1}{3}\sqrt{5 - 2\sqrt{\frac{10}{7}}} \\
x_2 \;&=\; 0 \\
A_0 \;=\; A_4 \;&=\; 0.3\frac{0.7 + 5\sqrt{0.7}}{2 + 5\sqrt{0.7}} \\
A_1 \;=\; A_3 \;&=\; 0.3\frac{-0.7 + 5\sqrt{0.7}}{-2 + 5\sqrt{0.7}} \\
A_2 \;&=\; \frac{128}{225}\,.
\end{aligned}$$

Los coeficientes A_i se determinan de forma similar al caso de las fórmulas no gaussianas, teniendo en cuenta que los puntos x_k son las raíces de un polinomio de grado, a lo sumo, $n+1$, que queda determinado unívocamente sabiendo que (i) el coeficiente de x^{n+1} en ese polinomio es la unidad y (ii) que es w-ortogonal a cualquier polinomio $p_n(x)$.

Teorema. *En una fórmula de cuadratura gaussiana, los coeficientes son positivos y su suma coincide con*

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, w(x)\,.$$

Demostración. Sea q_{n+1} un polinomio de grado, a lo sumo, $n+1$ que es w-ortogonal a cualquier polinomio de grado, a lo sumo, n. Sean $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ los ceros de q_{n+1}. Es evidente que, para uno cualquiera de esos puntos, x_j,

$$p_n(x) \;=\; \frac{q_{n+1}(x)}{x - x_j}\,,$$

es un polinomio de grado, a lo sumo, n y $p_n^2(x)$ es un polinomio de grado, a lo sumo, $2n$. Por tanto

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, w(x)\, p_n^2(x) \;=\; \sum_{i=0}^{n} A_i\, p_n^2(x_i) \;=\; A_j\, p_n^2(x_j) \;>\; 0\,,$$

ya que

$$p_n^2(x_i) \;=\; \frac{q_{n+1}^2(x_i)}{(x_i - x_j)^2} \;=\; 0\,, \quad \forall i \neq j\,.$$

Por lo tanto, $A_j > 0$. Si aplicamos la fórmula anterior a $p_n(x) = 1$, resulta

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, w(x) \;=\; \sum_{i=0}^{n} A_i\,.$$

Teorema. *Consideremos la fórmula gaussiana*

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, w(x)\, f(x) \;=\; \sum_{i=0}^{n} A_i\, f(x_i) \;+\; E\,.$$

Si $f(x)$ es continua y con derivadas continuas hasta orden $2n+2$ en $[a,b]$, entonces

$$E \;=\; \frac{1}{(2n+2)!}\, f^{(2n+2)}(\xi) \int_a^b \mathrm{d}x\, q_n^2(x)\, w(x)\,, \quad \xi \in (a,b)\,,$$

y donde

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

Demostración. Si consideramos la interpolación de Hermite, podemos asegurar que existe un polinomio $p_{2n+1}(x)$ de grado, a lo sumo, $2n+1$, tal que

$$p_{2n+1}(x_i) \;=\; f(x_i)\,, \quad p'_{2n+1}(x_i) \;=\; f'(x_i)\,, \quad 0 \le i \le n\,,$$

que interpola a $f(x)$ con un error

$$f(x) \;-\; p_{2n+1}(x) \;=\; \frac{1}{(2n+2)!}\, f^{(2n+2)}[\zeta_x]\, q_n^2(x)\,.$$

Entonces

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, f(x)\, w(x) - \int_a^b \mathrm{d}x\, p_{2n+1}(x)\, w(x) \;=\; \int_a^b \mathrm{d}x\, \frac{1}{(2n+2)!}\, f^{(2n+2)}[\zeta_x]\, q_n^2(x)\, w(x)\,.$$

Ahora bien

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, p_{2n+1}(x)\, w(x) \;=\; \sum_{i=0}^{n} A_i\, p_{2n+1}(x_i) \;=\; \sum_{i=0}^{n} A_i\, f(x_i)$$

y

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, \frac{1}{(2n+2)!}\, f^{(2n+2)}[\zeta_x]\, q_n^2(x)\, w(x) \;=\; \frac{1}{(2n+2)!}\, f^{(2n+2)}(\xi) \int_a^b \mathrm{d}x\, q_n^2(x)\, w(x)\,.$$

Veamos el problema de nuevo, desde otro punto de vista. Queremos elegir los puntos $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ de forma que podamos obtener una fórmula de cuadratura que sea exacta para polinomios de grado, a lo sumo, $2n+1$. Consideremos la interpolación de Hermite que, como sabemos, se basa en el conocimiento previo de los valores de la función, $f(x_k)$, y de su derivada,

$f'(x_k)$, en un conjunto de $n+1$ puntos $\{x_k,\, k=0,1,\ldots,n\}$. La función se puede expresar en la forma

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\, A_k(x) \,+\, \sum_{k=0}^{n} f'(x_k)\, B_k(x) \\ &\quad + \frac{1}{(2n+2)!}\, f^{(2n+2)}(\zeta_x) \prod_{k=0}^{n} (x-x_k)^2 \\ A_k(x) &= [1 \,-\, 2\, l'_k(x_k)\,(x-x_k)]\; l_k^2(x) \\ B_k(x) &= (x-x_k)\, l_k^2(x)\,, \end{aligned}$$

donde

$$l_k(x) = \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j},\;\; k=0,1,\ldots,n\,.$$

La interpolación de Hermite proporciona una solución exacta en el caso en que $f(x)$ es un polinomio de grado, a lo sumo, $2n+1$. Queremos calcular la integral

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, f(x)\, w(x)\,,$$

con $w(x) \geq 0$ una función continua en el intervalo $[a,b]$. Sustituyendo la interpolación de Hermite resulta

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, f(x)\, w(x) \,=\, \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\, H_k \,+\, \sum_{k=0}^{n} f'(x_k)\, \tilde{H}_k \,+\, E\,,$$

donde

$$\begin{aligned} H_k &= \int_a^b \mathrm{d}x\, A_k(x)\, w(x)\,, \\ \tilde{H}_k &= \int_a^b \mathrm{d}x\, B_k(x)\, w(x)\,, \\ E &= \frac{1}{(2n+2)!} \int_a^b \mathrm{d}x\, f^{(2n+2)}(\zeta_x)\, \Pi^2(x)\, w(x)\,, \end{aligned}$$

con

$$\Pi(x) \,=\, \prod_{k=0}^{n} (x-x_k)\,.$$

La idea, ahora, es hacer la elección de los puntos x_k de forma que $\tilde{H}_k = 0$. En tal caso

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, f(x)\, w(x) \;=\; \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\, H_k \;+\; E\,.$$

Por tanto debe ocurrir que

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, B_k(x)\, w(x) \;=\; 0\,, \quad k = 0, 1, \ldots, n\,,$$

es decir

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, (x - x_k)\, l_k^2(x)\, w(x) \;=\; 0\,, \quad k = 0, 1, \ldots, n\,.$$

Pero como

$$(x-x_k) l_k^2(x) \;=\; (x-x_k) \left(\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \right) l_k(x) = \left(\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (x_k - x_j) \right)^{-1} \Pi(x)\, l_k(x)\,,$$

la condición que debe cumplirse es

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, \Pi(x)\, l_k(x)\, w(x) \;=\; 0\,, \quad k = 0, 1, \ldots, n\,.$$

Como $\Pi(x)$ es un polinomio de grado, a lo sumo, $n + 1$, esta condición es, nuevamente, la condición del primero de los teoremas de esta sección, que es satisfecha por los denominados polinomios ortogonales. Por tanto, los puntos x_k que hay que escoger son los ceros de los correspondientes polinomios. La elección de esos polinomios dependerá del intervalo de integración y de la función peso $w(x)$. Las situaciones más usuales son las siguientes:

a	b	$w(x)$	polinomios
-1	1	1	$P_n(x)$, Legendre
0	∞	$\exp(-x)$	$L_n(x)$, Laguerre
$-\infty$	∞	$\exp(-x^2)$	$H_n(x)$, Hermite

Determinadas las abscisas, los coeficientes se calculan mediante el método de los coeficientes indeterminados.

En el *Handbook of Mathematical Functions* (M. Abramowitz and I.A. Stegun, Dover, 1972) se pueden encontrar las tablas correspondientes. En el primer caso se tienen hasta $n = 96$; en el segundo, hasta $n = 15$ y en el tercero, hasta $n = 20$. Las integrales vienen dadas por

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, w(x)\, f(x) \;=\; \sum_{i=0}^{n} H_i\, f(x_i)\,,$$

pero en los dos últimos casos es posible utilizar también la forma

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, g(x) \;=\; \sum_{i=0}^{n} H_i\, \frac{1}{w(x_i)}\, f(x_i)\,.$$

Ejemplo:
Calcular la integral

$$I \;=\; \int_1^3 \mathrm{d}x\, \frac{1}{x}$$

mediante integración de Gauss con $n = 1$ y 2. (El valor de la integral es $I = \ln 3 = 1.0986122887$).
Nos interesa utilizar la integración con los polinomios de Legendre. Hacemos el cambio de variable $t = x - 2$ con lo que

$$I \;=\; \int_{-1}^{1} \mathrm{d}t\, \frac{1}{t+2}\,.$$

Para $n = 1$, el polinomio que nos da las abscisas x_k es

$$P_2(x) \;=\; \frac{1}{2}(3x^2 \,-\, 1)\,,$$

cuyas raíces son

$$x \;=\; \pm\frac{1}{\sqrt{3}}\,.$$

Por otro lado, los coeficientes los obtenemos como

$$A_k \;=\; \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x\, l_k(x)\,,$$

con

$$l_k(x) \;=\; \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}\,.$$

Entonces

$$
\begin{aligned}
l_o(x) &= \frac{x-x_1}{x_0-x_1} = \frac{x-\dfrac{1}{\sqrt{3}}}{-\dfrac{2}{\sqrt{3}}} = \frac{1-\sqrt{3}x}{2}\,,\\
l_1(x) &= \frac{x-x_0}{x_1-x_0} = \frac{x+\dfrac{1}{\sqrt{3}}}{\dfrac{2}{\sqrt{3}}} = \frac{1+\sqrt{3}x}{2}\,,\\
A_0 &= \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x\, l_0(x) = \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x\, \frac{1-\sqrt{3}x}{2} = \frac{1}{2}\left[x-\sqrt{3}\frac{x^2}{2}\right]_{-1}^{1} = 1\,,\\
A_1 &= \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x\, l_1(x) = \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x\, \frac{1+\sqrt{3}x}{2} = \frac{1}{2}\left[x+\sqrt{3}\frac{x^2}{2}\right]_{-1}^{1} = 1\,.
\end{aligned}
$$

Por tanto, la integral vale

$$
I = \frac{1}{2-\dfrac{1}{\sqrt{3}}} + \frac{1}{2+\dfrac{1}{\sqrt{3}}} = \frac{12}{11} = 1.0909090909\ldots.
$$

En el caso de $n=2$, las abcisas son

$$
-x_0 = x_1 = 0.774597\,;\;\; x_1 = 0\,, \qquad A_0 = A_2 = \frac{5}{9}\,;\;\; A_1 = \frac{8}{9}\,.
$$

El valor de la integral resulta entonces $I = 1.09803931$. El error cometido viene dado por

$$
E = \frac{1}{(2n+2)!}\, f^{(2n+2)}(\xi) \int_a^b \mathrm{d}x\, q_n^2(x)\, w(x)\,, \quad \xi \in (a,b)\,.
$$

En el primer caso, $n=1$ y

$$
E = \frac{1}{4!}\,\frac{4!}{(\xi+2)^5} \int_a^b \mathrm{d}x\, q_2^2(x)\,, \quad \xi \in (-1,1)
$$

donde hemos tenido en cuenta que

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{x+2}, \\ f'(x) &= -\frac{1}{(x+2)^2}, \\ f''(x) &= \frac{2}{(x+2)^3}, \\ f'''(x) &= -\frac{3!}{(x+2)^4}, \\ f^{(IV)}(x) &= -\frac{4!}{(x+2)^5}. \end{aligned}$$

Los polinomios $q_n(x)$ se corresponden con los polinomios ortogonales pero con la potencia superior de x acompañada de un coeficiente unidad. Por tanto

$$q_2(x) \equiv \frac{2}{3} P_2(x),$$

y, teniendo en cuenta que

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \, P_m^2(x) = \frac{2}{2m+1},$$

tendremos

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \left(\frac{2}{3}\right)^2 P_2^2(x) = \frac{4}{9} \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \, P_2^2(x) = \frac{8}{45}.$$

El error será entonces

$$E = \frac{1}{(\xi+2)^5} \frac{8}{45},$$

que se hace máximo en $\xi = -1$. Por tanto

$$|E| \leq \left|\frac{8}{45}\right| = 0.1777777\ldots,$$

y resulta, finalmente,

$$I = 1.1 \pm 0.2.$$

En el caso $n = 2$ tendremos que considerar el polinomio $P_3 = \dfrac{1}{2}(5x^3 - 3x)$ y el error vale

$$E = \frac{1}{6!} \frac{6!}{(\xi+2)^7} \frac{4}{25} \frac{2}{7},$$

que está acotado por

$$|E| \leq 0.046$$

y, por tanto,

$$I = 1.10 \pm 0.05 \, .$$

Ejemplo:
Calcular la integral

$$I = \int_0^\infty \mathrm{d}x \, x^7 \, \exp(-x)$$

mediante integración de Gauss con $n = 1$ y 2.
Ahora nos interesa considerar los polinomios de Laguerre. En el caso $n = 1$, el correspondiente polinomio es

$$L_2(x) = x^2 - 4x + 2 \equiv q_2(x) \, ,$$

cuyas raíces son

$$x = 2 \pm \sqrt{2} \, .$$

Los coeficientes los calculamos como antes. Los polinomios son

$$\begin{aligned} l_o(x) &= \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x - 2 - \sqrt{2}}{-2\sqrt{2}} \, , \\ l_1(x) &= \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x - 2 + \sqrt{2}}{2\sqrt{2}} \, , \end{aligned}$$

y los coeficientes

$$
\begin{aligned}
A_0 &= \int_0^\infty \mathrm{d}x\, l_0(x)\, \exp(-x) \\
&= -\frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x\, \exp(-x) \;-\; (2+\sqrt{2}) \int_0^\infty \mathrm{d}x\, \exp(-x) \right] \\
&= -\frac{1}{2\sqrt{2}} (1-2-\sqrt{2}) \;=\; \frac{2+\sqrt{2}}{4}\,, \\
A_1 &= \int_0^\infty \mathrm{d}x\, l_1(x)\, \exp(-x) \\
&= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x\, \exp(-x) \;-\; (2-\sqrt{2}) \int_0^\infty \mathrm{d}x\, \exp(-x) \right] \\
&= \frac{1}{2\sqrt{2}} (1-2+\sqrt{2}) \;=\; \frac{2-\sqrt{2}}{4}\,.
\end{aligned}
$$

La integral será

$$
I \;=\; \frac{2+\sqrt{2}}{4}(2-\sqrt{2})^7 + \frac{2-\sqrt{2}}{4}(2+\sqrt{2})^7 \;=\; \frac{(2-\sqrt{2})^6 + (2+\sqrt{2})^6}{2} \;=\; 792\,.
$$

El error lo calculamos como

$$
E \;=\; \frac{7\,6\,5\,4}{4!}\,\xi^3 \int_0^\infty \mathrm{d}x\, \exp(-x)\, q_2(x) \;=\; 35\,\xi^3\,(2!)^2 \;=\; 140\,\xi^3\,,
$$

que no se puede acotar. Eso implica que cabe esperar que puedan producirse diferencias sustanciales con el valor verdadero de la integral que es $7! = 5040$ ya que

$$
\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^n\, \exp(-ax) \;=\; \frac{\Gamma(n+1)}{a^{n+1}}\,,
$$

que vale $\dfrac{n!}{a^{n+1}}$ si n es entero.

En el caso $n = 2$, las abscisas son

$$
x_0 \;=\; 0.415775\,; \;\; x_1 \;=\; 2.294280\,; \;\; x_2 \;=\; 6.289945\,,
$$

y los coeficientes

$$
A_0 \;=\; 0.711093\,; \;\; A_1 \;=\; 0.278518\,; \;\; A_2 \;=\; 0.010389\,,
$$

con lo que la integral vale

$$I \,=\, 4139.8997\,.$$

En el cálculo del error se nos presenta el mismo problema que antes, ya que ahora resulta

$$E \,=\, \frac{1}{6!}\,(7!\,\xi)\,(3!)^2 \,=\, 252\,\xi\,.$$

Si consideramos $n = 3$, el error sería proporcional a $f^{(\mathrm{VIII})}(\xi)$ que es 0: obtendríamos, entonces, el valor exacto de la integral lo que no nos debe extrañar porque x^7 es un polinomio de grado $2n+1$ y ya sabíamos que esto debía ocurrir. Si hacemos el cálculo encontramos

$$I \,=\, 5038,101\,.$$

La diferencia con el valor exacto hay que asignarla a que las abscisas y coeficientes están dados con sólo seis cifras decimales.

Ejemplo:
Usando integración gaussiana con $n = 4$, calcular las integrales

$$I_{\mathrm{a}} \,=\, \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,\frac{1}{1+x^2}\,\exp(-x^2)\,,\quad I_{\mathrm{b}} \,=\, \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,\frac{1}{1+\dfrac{x^2}{4}}\,\exp(-\frac{x^2}{4})\,.$$

En este caso nos interesa utilizar las fórmulas correspondientes al caso en que los polinomios son los de Hermite. Así

$$I_{\mathrm{a}} \,=\, \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,\frac{1}{1+x^2}\,\exp(-x^2) \,=\, \sum_{i=1}^{4} H_i\,\frac{1}{1+x_i^2}\,.$$

Para $n = 4$ tenemos

$$\begin{aligned} -x_1 \,=\, x_4 \;&=\; 1.650680123885785 \\ -x_2 \,=\, x_3 \;&=\; 0.524647623275290 \\ H_1 \,=\, H_4 \;&=\; 0.08131283544725 \\ H_2 \,=\, H_3 \;&=\; 0.8049140900055 \end{aligned}$$

En este caso tendremos

$$I_{\mathrm{a}} \,=\, 2\,H_1\,\frac{1}{1+x_1^2} \,+\, 2\,H_2\,\frac{1}{1+x_2^2} \,\approx\, 1.3060\ldots\,.$$

La segunda integral resulta

$$I_{\mathrm{b}} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \frac{1}{1+\frac{x^2}{4}} \exp(-\frac{x^2}{4}) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t 2\, \frac{1}{1+t^2} \exp(-t^2) = 2I_{\mathrm{a}} \approx 2.6120\ldots$$

3.5. Integración de Romberg.

Supongamos que queremos calcular la integral

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, f(x)$$

y sea

$$T(n) \;=\; \frac{h}{2}\left[f(a) \;+\; f(b) \;+\; 2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh)\right] ,$$

con

$$h \;=\; \frac{b-a}{n}$$

la fórmula del trapecio compuesta. Supongamos que, en lugar de $n+1$ puntos (n subintervalos) consideramos $2n+1$ puntos ($2n$ subintervalos). Entonces, si definimos $h' = h/2$, tendremos

$$\begin{aligned}
T(2n) \;&=\; \frac{h'}{2}\left[f(a) \;+\; f(b) \;+\; 2\sum_{k=1}^{2n-1} f(a+kh')\right] \\
&=\; \frac{h}{4}\left\{f(a) + f(b) + 2\sum_{l=1}^{n} f[a+(2l-1)h'] + 2\sum_{l=1}^{n-1} f(a+2lh')\right\} \\
&=\; \frac{h}{4}\left\{f(a) \;+\; f(b) \;+\; 2\sum_{l=1}^{n} f[a+(2l-1)h'] \;+\; 2\sum_{l=1}^{n-1} f(a+lh)\right\} \\
&=\; \frac{1}{2}T(n) \;+\; h'\sum_{l=1}^{n} f[a+(2l-1)h'] \,.
\end{aligned}$$

Esto nos permite encontrar una forma recursiva

$$\begin{aligned} T(1) &= \frac{b-a}{2}\,[f(a) + f(b)] \\ T(2^n) &= \frac{1}{2}\,T(2^{n-1}) + \frac{b-a}{2^n}\sum_{l=1}^{2^{n-1}} f\left[a + (2l-1)\frac{b-a}{2^n}\right], \end{aligned}$$

cuya filosofía es similar a la extrapolación de Richardson.

Consideremos ahora la fórmula de Euler-MacLaurin para una función continua y con derivadas continuas (hasta orden $2m$) en [0,1]:

$$\begin{aligned} \int_0^1 \mathrm{d}t\, f(t) &= \frac{1}{2}\,[f(0) + f(1)] \\ &\quad + \sum_{k=1}^{m-1} A_{2k}\,\left[f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(1)\right] - A_{2m}\, f^{(2m)}(\xi_0)\,, \end{aligned}$$

donde $\xi_0 \in (0,1)$. Los A_{2k} están relacionados con los números de Bernouilli. Si consideramos $x_{i+1} = x_i + h$, tendremos

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \mathrm{d}x\, f(x) &= \frac{h}{2}\,[f(x_i) + f(x_{i+1})] \\ &\quad + \sum_{k=1}^{m-1} A_{2k}\, h^{2k}\,\left[f^{(2k-1)}(x_i) - f^{(2k-1)}(x_{i+1})\right] \\ &\quad - A_{2m}\, h^{2m+1}\, f^{(2m)}(\xi_i)\,, \end{aligned}$$

con $\xi_i \in (x_i, x_{i+1})$.

Volvamos a la integral original y dividámosla en 2^n intervalos considerando $x_0 = a$ y $x_{2^n} = b$:

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, f(x) = \sum_{i=0}^{2^n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \mathrm{d}x\, f(x)\,.$$

Aplicando ahora la expresión de Euler-MacLaurin tendremos

$$\begin{aligned}\int_a^b \mathrm{d}x\, f(x) \;&=\; \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{2^n-1}\left[f(x_i)\,+\,f(x_{i+1})\right]\\ &+\sum_{i=0}^{2^n-1}\sum_{k=1}^{m-1} A_{2k}\,h^{2k}\,\left[f^{(2k-1)}(x_i)\,-\,f^{(2k-1)}(x_{i+1})\right]\\ &-\sum_{i=0}^{2^n-1} A_{2m}\,h^{2m+1}\,f^{(2m)}(\xi_i)\,,\end{aligned}$$

es decir,

$$\int_a^b \mathrm{d}x\, f(x) \,=\, T(2^n)\,+\,\sum_{k=1}^{m-1} C_{2k}\,h^{2k}\,+\,C_{2m}\,h^{2m}\,f^{(2m)}(\xi)\,.$$

Lo interesante de esta expresión es que los coeficientes C_k son independientes de h. Como vemos, esta ecuación tiene la misma estructura que la ecuación básica de la extrapolación de Richardson. Por tanto tenemos

$$\begin{aligned}R_{0,0} &= T(1)\\ R_{0,n} &= T(2^n)\\ R_{k,n} &= \frac{1}{4^k-1}\left[4^k\,R_{k-1,n}\,-\,R_{k-1,n-1}\right]\,.\end{aligned}$$

Este algoritmo de Romberg se "aprovecha" tanto mejor cuanto mayor es el grado al que la función a integrar puede derivarse. Por otro lado, es posible demostrar que, para un valor fijo de m,

$$\lim_{n\to\infty} R_{m,n} \,=\, \int_a^b \mathrm{d}x\, f(x)\,.$$