

Métodos Analíticos en Estadística
TEMA 7: INTEGRACIÓN NUMÉRICA

1 Integración numérica

Queremos aproximar numéricamente integrales definidas de la forma

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

donde $w(x)$ es una función peso en $[a, b]$ (ver tema anterior).

Para abordar este problema primero estudiemos el significado matemático de la integral. Consideremos la integral definida

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

Dada una partición cualquiera de un intervalo $[a, b]$:

$$\mathcal{P} = \{x_0 = a < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b\},$$

se definen para $i = 1, \dots, n$

$$m_i = \inf\{f(x) : x_{i-1} \leq x \leq x_i\}, \quad M_i = \sup\{f(x) : x_{i-1} \leq x \leq x_i\},$$

$$L(f, \mathcal{P}) = \sum_{i=1}^n m_i(x_i - x_{i-1}) \quad (\text{sumas inferiores de Riemann}),$$

$$U(f, \mathcal{P}) = \sum_{i=1}^n M_i(x_i - x_{i-1}) \quad (\text{sumas superiores de Riemann}).$$

Entonces, f es integrable sii

$$\sup\{L(f, \mathcal{P}) \mid \mathcal{P} \text{ es partición de } [a, b]\} = \inf\{U(f, \mathcal{P}) \mid \mathcal{P} \text{ es partición de } [a, b]\} = I.$$

Si consideramos funciones $f \in C[a, b]$, sabemos que existirán $\xi_i, \eta_i \in [x_{i-1}, x_i]$ tal que

$$f(\xi_i) = m_i, \quad f(\eta_i) = M_i.$$

Por tanto, se puede considerar como una primera aproximación a I a la n -ésima suma de Riemann:

$$S_n = \sum_{j=1}^n f(\varphi_j)(x_j - x_{j-1}) \simeq I,$$

para ciertos valores $\varphi_j \in [x_{j-1}, x_j]$.

Según se elijan estos puntos φ_j se pueden conseguir distintos métodos elementales. El más simple es la **regla del rectángulo**:

Se toma una partición equiespaciada

$$x_j = a + jh, \quad h = (b - a)/n, \quad j = 0, 1, \dots, n$$

pudiéndose elegir los φ_j de dos formas:

1. Con el extremo izquierdo: $\varphi_j = x_{j-1}, j = 1, 2, \dots, n$:

$$S_n = \sum_{j=1}^n f(x_{j-1})h.$$

2. Con el extremo derecho: $\varphi_j = x_j$, $j = 1, 2, \dots, n$:

$$S_n = \sum_{j=1}^n f(x_j)h.$$

Por tanto, es natural definir como aproximantes a la integral (1.1) sumas de la forma:

$$I_n(f) = \sum_{j=1}^n A_j f(x_j), \quad n \geq 1. \quad (1.2)$$

Una fórmula de este tipo (1.2) se llama *fórmula de cuadratura*.

Los coeficientes A_j se denominan *pesos* y los valores x_j se llaman *nodos de la fórmula de cuadratura*.

Para simplificar la notación, se suele sobreentender la dependencia de n de estos valores, es decir, $A_j = A_{j,n}$, $x_j = x_{j,n}$. Sólo lo especificaremos cuando haya posibilidad de confusión. Además, se suelen elegir los nodos $x_j \in [a, b]$, pero no siempre.

Nos vamos a centrar en las llamadas *fórmulas de cuadratura de tipo interpolatorio*, entre las cuales se pueden distinguir dos grupos principales de métodos:

1. Fórmulas de Newton–Cotes.
2. Fórmulas de Gauss.

2 Error de integración

Una cuestión fundamental a la hora de buscar fórmulas de cuadratura es calcular su *error de integración*:

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f). \quad (2.1)$$

Una medida muy útil de este error es el llamado *grado de precisión* de la fórmula de cuadratura:

Definición 2.1 Una fórmula de cuadratura (1.2) que aproxima a (1.1) tiene grado de precisión m (GP= m) si

1. $I_n(x^k) = I(x^k)$, para todo $k = 0, 1, \dots, m$ y
2. $I_n(x^{m+1}) \neq I(x^{m+1})$.

Es decir, una fórmula de cuadratura con GP= m integra exactamente a todos los polinomios de grado $\leq m$, pero no a los de grado $m + 1$.

A partir de este GP se obtiene una buena expresión del error $E_n(f)$:

Teorema 2.1 Si (1.2) tiene GP= m y f tiene derivada continua hasta orden $m + 1$ se tiene

$$E_n(f) = \frac{1}{(m+1)!} \int_c^d f^{(m+1)}(s) G_{n,m}(s) ds, \quad (2.2)$$

donde

$$G_{n,m}(s) = (m+1) \left(I((x-s)_+^m) - I_n((x-s)_+^m) \right),$$

con

$$(x-s)_+^m = \begin{cases} 0, & x \leq s \\ (x-s)^m, & x > s \end{cases} \quad (2.3)$$

y $[c, d]$ es el menor intervalo que contiene a $[a, b]$ y a todos los nodos x_j .

Así que la intención será buscar fórmulas de cuadratura con GPs altos.

3 Fórmulas de cuadratura de tipo interpolatorio

Volviendo a nuestro problema de aproximar la integral $I(f)$ dada en (1.1), elegimos n nodos distintos entre sí

$$x_1 < x_2 < \cdots < x_n \quad (3.1)$$

y consideramos el polinomio de interpolación P_{n-1} de grado $\leq n-1$ que interpola a f en dichos nodos, es decir, $P_{n-1}(x_j) = f(x_j)$, $j = 1, \dots, n$. Entonces, las *fórmulas de tipo interpolatorio* consideran como una aproximación a (1.1) el valor

$$I_n(f) = \int_a^b P_{n-1}(x)w(x) dx. \quad (3.2)$$

Usando la expresión de Lagrange de P_{n-1} tenemos

$$P_{n-1}(x) = \sum_{j=1}^n l_j(x)f(x_j)$$

donde los polinomios fundamentales de Lagrange $l_j(x)$ de grado $n-1$ vienen dados por

$$l_j(x) = \frac{w_n(x)}{(x-x_j)w'_n(x_j)}, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (3.3)$$

denotando $w_n(x)$ como el polinomio nodal

$$w_n(x) = (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n). \quad (3.4)$$

Llevando esto a (3.2) se obtiene la fórmula de cuadratura

$$I_n(f) = \sum_{j=1}^n A_j f(x_j), \quad A_j = \int_a^b l_j(x)w(x) dx, \quad 1 \leq j \leq n. \quad (3.5)$$

Obsérvese que los pesos A_j sólo dependerán de los nodos de interpolación y no de f . Dependiendo de la elección de los nodos tendremos unos métodos u otros.

Estas fórmulas tienen la ventaja de que nos caracterizan un GP mínimo:

Teorema 3.1 *Dada cualquier fórmula de cuadratura (1.2) de n nodos distintos entre sí (3.1) que aproxima a la integral (1.1), se tiene que su GP es $\geq n-1$ sii es de tipo interpolatorio, es decir, es de la forma (3.5).*

Obsérvese que esto nos dice que desde que queramos GP alto, los pesos van a estar unívocamente determinados en función de los nodos. Lo único que podremos variar es la elección de los nodos, que será lo que diferenciará un método de tipo interpolatorio de otro. Principalmente, hay dos formas de elegirlos en la práctica:

1. Tomando nodos igualmente espaciados ($w(x) \equiv 1$): *fórmulas de Newton–Cotes*.
2. Tomando los nodos para que se alcance el GP más alto posible: *fórmulas gaussianas*.

4 Fórmulas de Newton–Cotes

En estas fórmulas se aproximan integrales con función peso $w(x) \equiv 1$, es decir,

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx. \quad (4.1)$$

En este caso se toman $n+1$ nodos equiespaciados

$$x_j = a + jh, \quad j = 0, 1, \dots, n, \quad h = \frac{b-a}{n}. \quad (4.2)$$

Para simplificar la notación y hacerla más parecida a la usada en el tema de interpolación, en esta sección vamos a denotar la fórmula de cuadratura de estos $n + 1$ nodos como $I_n(f)$ (aunque sería más propio denotarla por $I_{n+1}(f)$). Así, $I_n(f)$ será la integral del polinomio P_n de interpolación de f de grado $\leq n$ en los $n + 1$ nodos (4.2):

$$I_n(f) = \int_a^b P_n(x) dx = \sum_{j=0}^n A_j f(x_j), \quad A_j = \int_a^b l_j(x) dx, \quad (4.3)$$

donde los $l_j(x)$ ahora son los polinomios fundamentales de Lagrange en los $n + 1$ nodos (4.2). El cálculo de estos A_j se simplifica haciendo el cambio de variable $x = a + th$, $t \in [0, n]$ en:

$$A_j = \int_a^b \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^n \frac{(x - x_k)}{(x_j - x_k)} dx = h \int_0^n \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^n \frac{(t - k)}{(j - k)} dt.$$

Desarrollando un poco más esta fórmula resulta

$$A_j = (-1)^{n-j} \binom{n}{j} \frac{h}{n!} \int_0^n \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^n (t - k) dt, \quad 0 \leq j \leq n. \quad (4.4)$$

Observaciones:

- Obsérvese que así se tienen los pesos de cualquier fórmula de Newton–Cotes independientemente de en qué intervalo $[a, b]$ estemos integrando.
- Simplemente haciendo el cambio de variable $t = n - s$ en la integral de (4.4) se demuestra que dichos pesos son "simétricos", esto es,

$$A_{n-j} = A_j, \quad \forall j = 0, 1, \dots, n.$$

Así vamos a poder ahorrarnos computar la mitad, pues se tiene:

– Si n es impar (número par de nodos):

$$I_n(f) = \sum_{j=0}^{\frac{n-1}{2}} A_j (f(x_j) + f(x_{n-j})).$$

– Si n es par (número impar de nodos):

$$I_n(f) = \sum_{j=0}^{\frac{n}{2}-1} A_j (f(x_j) + f(x_{n-j})) + A_{\frac{n}{2}} f(x_{\frac{n}{2}}).$$

- Para estudiar el error y el GP de estas fórmulas también se va a tener que diferenciar el caso n par del n impar.

Teorema 4.1 Error y GP de las fórmulas de Newton–Cotes:

(a) Para n par (número impar de nodos), supongamos que $f \in C^{n+2}[a, b]$. Entonces

$$E_n(f) := I(f) - I_n(f) = C_n h^{n+3} f^{(n+2)}(\eta), \quad \text{para cierto } \eta \in [a, b], \quad (4.5)$$

donde

$$C_n = \frac{1}{(n+2)!} \int_0^n \mu^2(\mu-1) \cdots (\mu-n) d\mu.$$

Por tanto, su GP = $n + 1$.

(b) Para n impar (número par de nodos), supongamos que $f \in C^{n+1}[a, b]$. Entonces

$$E_n(f) := I(f) - I_n(f) = C_n h^{n+2} f^{(n+1)}(\eta), \quad \text{para cierto } \eta \in [a, b], \quad (4.6)$$

donde

$$C_n = \frac{1}{(n+1)!} \int_0^n \mu(\mu-1) \cdots (\mu-n) d\mu.$$

Por tanto, su GP = n .

Ejemplos:

1. $n = 1$: **La regla trapezoidal** (N-C de 2 nodos):

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} [f(a) + f(b)] - \frac{h^3}{12} f''(\xi), \quad \xi \in [a, b], \quad h = b - a, \quad \text{GP} = 1.$$

2. $n = 2$: **La regla de Simpson** (N-C de 3 nodos):

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in [a, b], \quad h = \frac{b-a}{2}, \quad \text{GP} = 3.$$

3. $n = 3$: **Regla de los 3/8** (N-C de 4 nodos):

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{3h}{8} [f(a) + 3f(a+h) + 3f(b-h) + f(b)] - \frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in [a, b], \quad h = \frac{b-a}{3}, \quad \text{GP} = 3.$$

4. $n = 4$: **N-C de 5 nodos**:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{2h}{45} \left[7f(a) + 32f(a+h) + 12f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 32f(b-h) + 7f(b) \right] - \frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi),$$

$$\xi \in [a, b], \quad h = \frac{b-a}{4}, \quad \text{GP} = 5.$$

Observaciones:

- De lo anterior se ve claramente que las fórmulas con n par (número impar de nodos) le ganan un grado de precisión extra a las fórmulas con n impar. Por eso entre la regla de Simpson y la de los 3/8 se suele preferir la primera.
- La forma más práctica de mejorar estas fórmulas de cuadratura es la de usarlas como *reglas compuestas*, que se obtienen al dividir el intervalo de integración en subintervalos, normalmente de la misma longitud, y aplicar en cada subintervalo la fórmula de cuadratura:

1. **Regla trapezoidal compuesta:** en este caso $n = 1$, $h = (b-a)/m$, $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \dots, m$:

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

2. **Regla de Simpson compuesta:** aquí $n = 2$, $h = (b-a)/(2m)$, $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \dots, 2m$:

$$I(f) = \frac{h}{3} \left(f(a) + 4 \sum_{j=1}^m f(x_{2j-1}) + 2 \sum_{j=1}^{m-1} f(x_{2j}) + f(b) \right) - \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in [a, b].$$

4.1 Fórmulas de Newton–Cotes abiertas

Las anteriores fórmulas (4.3) realmente se suelen llamar *fórmulas de Newton–Cotes cerradas* pues los extremos del intervalo a y b son nodos de interpolación.

Existen unas fórmulas de Newton–Cotes que no usan dichos extremos como nodos de interpolación, llamadas *fórmulas de Newton–Cotes abiertas*.

De entre estas, la más usada es a la vez la más simple: *la regla del punto medio*, que se basa en aproximar f por el polinomio de interpolación en un solo nodo, el punto medio

$$x_0 = \frac{a+b}{2},$$

obteniéndose la fórmula de cuadratura de $GP = 1$ dada por

$$I(f) = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{(b-a)^3}{24}f''(\eta), \quad \eta \in [a, b]. \quad (4.7)$$

Se suele aplicar más en su forma compuesta definiendo

$$x_j = a + \left(j - \frac{1}{2}\right)h, \quad j = 1, 2, \dots, m,$$

Así se tiene

$$I(f) = h(f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_m)) + E_m(f)$$

donde el error viene dado por

$$E_m(f) = \frac{h^2(b-a)}{24}f''(\xi), \quad \xi \in [a, b].$$

5 Fórmulas gaussianas

Aquí volvemos a estudiar el caso general de aproximar la integral

$$I(f) = \int_a^b f(x)w(x) dx \quad (5.1)$$

para la función peso $w(x) \geq 0$.

En la sección anterior hemos visto que con n nodos igualmente espaciados podemos conseguir GP al menos $n-1$. El planteamiento de las fórmulas de Gauss es diferente: ¿cómo podemos elegir los nodos y los pesos de una fórmula de cuadratura para que tenga el GP más alto posible?

Claramente este GP óptimo con n nodos ha de ser $\geq n-1$, pues las fórmulas de Newton–Cotes ya lo alcanzan. Así que por el teorema 3.1 estas fórmulas de mayor GP serán también de tipo interpolatorio.

Por tanto, vamos a aproximar (5.1) mediante la fórmula de cuadratura en n nodos distintos $\{x_i\}_{i=1}^n \subset [a, b]$ de tipo interpolatorio dada en (3.5)-(3.4)-(3.3):

$$I_n(f) = \sum_{j=1}^n A_j f(x_j), \quad A_j = \int_a^b l_j(x)w(x) dx, \quad 1 \leq j \leq n,$$

$$l_j(x) = \frac{w_n(x)}{(x-x_j)w'_n(x_j)}, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad w_n(x) = (x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n).$$

Para calcular el mayor GP lo que buscamos es el mayor entero positivo M tal que

$$I(x^M) = I_n(x^M),$$

que sabemos que es $M \geq n-1$ por el teorema 3.1. Pero por otra parte tenemos una cota superior del GP:

Lema 5.1 *El GP de una fórmula de cuadratura de n nodos distintos es siempre menor o igual a $2n - 1$.*

Ahora veamos que se puede alcanzar el $GP = 2n - 1$:

Teorema 5.1 *Fórmula de cuadratura de Gauss*

Para cada $n \geq 1$ existe una única fórmula de cuadratura (3.5) de n nodos distintos con $GP = 2n - 1$. Los nodos de esta fórmula de integración son los ceros del n -ésimo polinomio ortogonal $\varphi_n(x)$ respecto de $w(x)$ sobre $[a, b]$. Si denotamos

$$\varphi(x) = a_n x^n + \dots, \quad \alpha_n = \frac{a_{n+1}}{a_n}, \quad \gamma_n = \int_a^b [\varphi_n(x)]^2 w(x) dx,$$

los pesos de la fórmula son

$$A_j = \frac{-\alpha_n \gamma_n}{\varphi'_n(x_j) \varphi_{n+1}(x_j)} > 0, \quad j = 1, \dots, n.$$

Además, si $f \in C^{2n}[a, b]$ el error de la fórmula es

$$E_n(f) := I(f) - I_n(f) = \frac{\gamma_n}{a_n^2 (2n)!} f^{(2n)}(\eta) \quad \text{para } \eta \in (a, b).$$

5.1 Ejemplos de fórmulas gaussianas

- **Fórmulas de Gauss–Legendre:** Para las integrales

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx,$$

o sea, con $w(x) \equiv 1$ en $[-1, 1]$. Los nodos son los *ceros del n -ésimo polinomio ortogonal de Legendre*:

$$P_n(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} [(1-x^2)^n], \quad n \geq 1, \quad P_0(x) \equiv 1,$$

que se calculan numéricamente. Los pesos son

$$A_i = \frac{-2}{(n+1)P'_n(x_i)P_{n+1}(x_i)}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Tanto los nodos como los pesos están tabulados y son bien conocidos, incluso para valores grandes de n .

El error de esta fórmula de cuadratura resulta:

$$E_n(f) = \frac{2^{2n+1} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^2} \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!},$$

para cierto $\eta \in (-1, 1)$.

Además, se puede usar para integrales en otros intervalos finitos $[a, b]$ con la misma función peso $w(x) \equiv 1$, haciendo el conocido cambio de variable:

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

- **Fórmulas de Gauss–Chebychev:** Para aproximar las integrales

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}.$$

Los nodos son los *ceros del n -ésimo polinomio ortogonal de Chebychev de primera especie:*

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x), \quad n \geq 0,$$

que son

$$x_j = \cos\left(\frac{2j-1}{2n}\pi\right), \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Los pesos en este caso salen todos iguales

$$A_j = \frac{\pi}{n}, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Y el error de integración resulta

$$E_n(f) = \frac{\pi}{2^{2n-1}} \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!},$$

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