

Integración Numérica: Cuadraturas

Docente: Mario De León

Escuela de Matemática

31 de octubre de 2024

0 Contenidos

- Motivación
- Q Cuadraturas
- 3 Cuadraturas de Newton-Cotes
- 4 Cuadraturas gaussianas
- **5** Cuadraturas compuestas
- **6** Coeficientes indeterminados



1 Contenidos |2

- Motivación
- 2 Cuadraturas
- 3 Cuadraturas de Newton-Cotes
- 4 Cuadraturas gaussianas
- 6 Cuadraturas compuestas
- 6 Coeficientes indeterminados



1 Introducción

La integración numérica es una herramienta esencial que se utiliza en ciencias e ingenierías para obtener valores aproximados de integrales definidas que no pueden calcularse de manera exacta.

Example

► En termodinámica estadística, el modelo de Debye para calcular la capacidad calórica de un sólido considera la función

$$\Phi(x) := \int_0^x \frac{t^3}{e^t - 1} dt$$



1 Motivación

Example

▶ La función error erf es una función que aparece en Probabilidad, Estadística, y en la solución de algunas ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Debe su nombre a que está relacionada con la distribución gaussiana de los errores en observaciones o mediciones experimentales:

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$



1 Motivación

Example

► Las funciones de Bessel tienen diversas aplicaciones en física e ingeniería, como resolver ecuaciones diferenciales parciales con simetría cilíndrica y analizar fenómenos de propagación de ondas.

Acá tenemos una de ellas:

$$J_0(x) := \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(x \sin(\theta)) d\theta$$



2 Contenidos

- Motivación
- 2 Cuadraturas
- 3 Cuadraturas de Newton-Cotes
- 4 Cuadraturas gaussianas
- 6 Cuadraturas compuestas
- 6 Coeficientes indeterminados



2 Cuadraturas |7

Vamos a considerar la evaluación numérica de las integrales de la forma

$$I = \int_{a}^{b} f(x) \, dx$$

Definition (Cuadratura)

Una regla de cuadratura aproxima dicha integral por

$$I \approx Q(f) = \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k)$$

Los puntos x_k , k = 0, 1, ..., n son llamados las *abscisas* escogidas tal que $a \le x_0 < ... < x_n \le b$. Los coeficientes w_k son denominados los *pesos*.



2 Cuadraturas

Definition (Error de una cuadratura)

Al aproximar $I(f) = \int_a^b f$ por una cuadratura Q(f) se define el *error* de la cuadratura por

$$R(f) := I(f) - Q(f)$$

Definition (Grado de precisión polinomial)

Una cuadratura es exacta para I(f) si R(f)=0. Se dice que el **grado de precisión polinomial de una cuadratura** Q al aproximar I es $n \in \mathbb{N}$ tal que $Q(x^i)=I(x^i)$ para todo $i \leq n$ y que $Q(x^{n+1}) \neq I(x^{n+1})$.



2 Cuadraturas

Recordemos que $\left\{x^i\right\}_{i=0}^n$ es un conjunto linealmente independiente y que

$$\mathbb{P}_n[x] = c.\ell.\{1, x, x^2, ..., x^n\}$$

Así que para determinar si una cuadratura tiene grado de precisión n sobre el conjunto de polinomios $p(x) \in \mathbb{P}_n[x]$ bastará ver si $Q(x_i) = I(x^i)$ para todo $i \leq n$.



3 Contenidos | 10

- Motivación
- 2 Cuadraturas
- 3 Cuadraturas de Newton-Cotes
- 4 Cuadraturas gaussianas
- 6 Cuadraturas compuestas
- Coeficientes indeterminados



Definition (Newton-Cotes)

Las **cuadraturas de Newton-Cotes** son aquellas que utilizan polinomios de interpolación de Lagrange cuyos conjuntos soportes tienen puntos equiespaciados:

$$X = \{x_0 = a, x_1 = a + h, x_2 = a + 2h, ..., x_{n-1} = a + (n-1)h, x_n = b\}$$

donde $h := \frac{b-a}{n}$.

Con lo cual, si f es integrable en [a, b] se tiene que

$$\int_a^b f(t) dt \approx \int_a^b p_n(t) dt$$



En las cuadraturas de Newton-Cotes los pesos pueden calcularse como

$$w_k = \int_a^b L_k(x) dx$$
 $k = 0, 1, ..., n$

en donde

$$L_k(x) := \prod_{\substack{i=0\\i\neq k}}^n \frac{x-x_i}{x_k-x_i}$$



Example

La cuadratura en la cual $x_0 = a$, $x_1 = b$ tiene por pesos

$$w_0 = \int_a^b \frac{x-a}{a-b} dx = \frac{b-a}{2}, \qquad w_1 = \int_a^b \frac{x-b}{b-a} dx = \frac{b-a}{2}$$

con lo que dicha cuadratura se expresa como

$$Q(f) = \frac{b-a}{2}f(a) + \frac{b-a}{2}f(b)$$



Podemos integrar el polinomio lineal cuyos nodos son (a, f(a)) y (b, f(b)). Esta es la *regla del trapecio* descrita por la fórmula

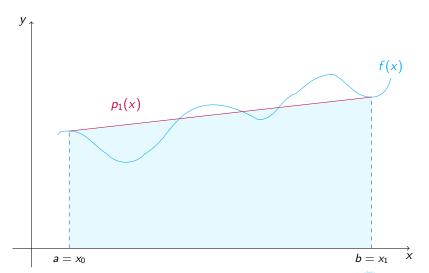
Definition (Regla del trapecio)

$$I \approx \frac{b-a}{2} \left(f(a) + f(b) \right)$$

Recordemos que el área de un trapecio es

$$A = \frac{(\mathsf{base\ mayor}\ +\ \mathsf{base\ menor}) \cdot\ \mathsf{altura}}{2}$$







Example

Aproxime $\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx 0.7468241328$ con la regla del trapecio.

Solución:

$$Q = \frac{1-0}{2} \left(e^{-(0)^2} + e^{-(1)^2} \right) = \frac{1+e^{-1}}{2} \approx 0.6839397206$$

Si se usa aproximación de Maclaurin se tiene que

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx \int_0^1 1 - x^2 dx = 0.\overline{6}$$

así que la aproximación del trapecio es ligeramente mejor.



Theorem

La regla del trapecio tiene el siguiente término de error

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b)) - \frac{1}{12} f''(\xi) (b-a)^{3}$$

en donde ξ es algún punto en el intervalo [a, b].

Es decir,

$$|R(f)| = |I - Q_T(f)| \le \frac{M_2}{12}(b-a)^3$$

$$\mathsf{donde}\ \mathit{M}_2 := \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$$



Example

Determine una cota para el error al aproximar

$$\int_{rac{\pi}{6}}^{rac{5\pi}{6}}\sin(x)\,dx=\sqrt{3}pprox 1.732050808$$
 con la cuadratura del trapecio.

Solución: Sea $f(x) = \sin x$, y como $|f''(x)| = |\sin x|$ podemos tomar $M_2 = 1$. Luego,

$$|R(f)| \le \frac{1}{12} \left(\frac{5\pi}{6} - \frac{\pi}{6} \right)^3 \approx 0.7655870785$$

Como adicional, el cómputo de la cuadratura da

$$Q_T = \frac{\pi}{3} \left(\sin \frac{\pi}{6} + \sin \frac{5\pi}{6} \right) = \frac{\pi}{3} \approx 1.047197551$$



El término del error puede reducirse significativamente si se integra un polinomio cuadrático o cúbico, que posea nodos usando particiones uniformes. Estas se conocen como reglas de SIMPSON. Cuando n=2 tenemos

Definition (Regla de Simpson 1/3)

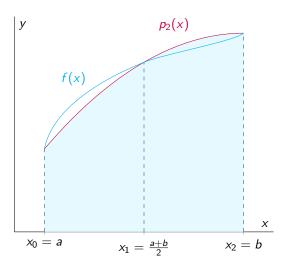
$$I \approx \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]$$

Se puede escribir también como

$$Q_{s,1/3}(f) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2)$$

donde
$$h = \frac{b-a}{2}, f_i = f(x_i).$$







Example

Aproxime $\int_{\frac{\pi}{6}}^{\frac{5\pi}{6}} \sin(x) \, dx = \sqrt{3} \approx 1.732050808$ con la cuadratura de Simpson 1/3.

Solución:

$$Q_{s,1/3} = \frac{\pi}{9} \left(\sin \frac{\pi}{6} + 4 \sin \frac{\pi}{2} + \sin \frac{5\pi}{6} \right) = \frac{5\pi}{9} \approx 1.745329252$$



Theorem

La regla de Simpson 1/3 tiene el siguiente término de error

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] - \frac{1}{90} f^{(4)}(\xi) h^{5}$$

en donde ξ es algún punto en el intervalo [a, b].

Es decir,

$$|R(f)| = |I - Q_{s,1/3}(f)| \le \frac{h^5}{90} M_4 = \frac{M_4}{2880} (b - a)^5$$

donde
$$M_4 := \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|$$



Example

Determine una cota para el error al aproximar

$$\int_{rac{\pi}{6}}^{rac{5\pi}{6}} \sin(x) \, dx = \sqrt{3} pprox 1.732050808$$
 con la cuadratura de Simpson $1/3$.

Solución:

Sea $f(x) = \sin x$, y como $|f^{(4)}(x)| = |\sin x|$ podemos tomar $M_2 = 1$. Luego,

$$|R(f)| \le \frac{1}{2880} \left(\frac{5\pi}{6} - \frac{\pi}{6}\right)^5 \approx 0.01399266963$$



Cuando n = 3 tenemos

Definition (Regla de Simpson 3/8)

$$Q_{s,3/8}(f) = \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$$

donde $h = \frac{b-a}{3}$, $f_i = f(a+ih)$:

$$ightharpoonup f_0 = f(x_0) = f(a)$$

•
$$f_1 = f(x_1) = f(\frac{2a+b}{3})$$

•
$$f_2 = f(x_2) = f(\frac{a+2b}{3})$$

$$ightharpoonup f_3 = f(x_3) = f(b)$$



Theorem

La regla de Simpson 3/8 tiene el siguiente término de error

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{b-a}{8} (f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) - \frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi)$$

en donde ξ es algún punto en el intervalo [a, b].

Es decir,

$$|I - Q_{s,3/8}(f)| \le \frac{3h^5}{80}M_4$$

donde
$$M_4 := \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|$$



Theorem

- ▶ El grado de precisión de la cuadratura $Q_T(f)$ del trapecio simple es n = 1. Esto quiere decir que la cuadratura da la integral exacta para todo polinomio de la forma p(x) = mx + b.
- ▶ El grado de precisión de la cuadratura $Q_{s,1/3}(f)$ de Simpson 1/3 simple es n=3. Esto quiere decir que la cuadratura da la integral exacta para todo polinomio de la forma $p(x)=ax^3+bx^2+cx+d$.
- ▶ El grado de precisión de la cuadratura $Q_{s,3/8}(f)$ de Simpson 3/8 simple es n=3. Esto quiere decir que la cuadratura da la integral exacta para todo polinomio de la forma $p(x)=ax^3+bx^2+cx+d$.



4 Contenidos | 27

- Motivación
- 2 Cuadraturas
- 3 Cuadraturas de Newton-Cotes
- 4 Cuadraturas gaussianas
- 6 Cuadraturas compuestas
- Coeficientes indeterminados



Motivación

Las cuadraturas de Newton-Cotes tienen el defecto de que a más nodos con abscisas equiespaciadas el error tiende a ser mayor, esto debido al fenómeno de RUNGE . Por tanto, cuadraturas con conjunto soporte diferentes son necesarias. En las cuadraturas gaussianas se utilizan como soporte los ceros de una familia de polinomios ortogonales conocidos como polinomios de Legendre.

► Otra ventaja de estas cuadraturas es que calculan integrales de polinomios de grados más altos de manera exacta.



Theorem

Los polinomios de Legendre pueden calcularse de manera recursiva:

$$\begin{cases}
P_0(x) &= 1, \\
P_1(x) &= x, \\
(n+1)P_{n+1} &= (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)
\end{cases}$$

Con esta fórmula se tiene que

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

► $P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x$

$$P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x$$

$$P_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8}$$



Definition (Cuadratura gaussiana)

Sean $x_0,...,x_n$ raíces del (n+1)-ésimo polinomio ortogonal de Legendre p_{n+1} . Sea L_k el k-ésimo polinomio cardinal de Lagrange para dichos puntos. Entonces los pesos de la cuadratura son calculados como

$$w_i = \int_{-1}^1 L_k(x) \, dx$$

y entonces se tiene que $\int_{-1}^{1} f(x) dx \approx G(f) := \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k)$



Con base en los polinomios de Legendre se presenta una tabla con los ceros y los pesos correspondientes, para algunas cuadraturas gaussianas:

n	Ceros (x_k)	Pesos (w _k)
2	$\pm 1/\sqrt{3}$	1
3	0	8/9
	$\pm\sqrt{3/5}$	5/9
4	$\pm\sqrt{(3-2\sqrt{6/5})/7}$	$(18 + \sqrt{30})/36$
	$\pm\sqrt{(3+2\sqrt{6/5})/7}$	$(18 - \sqrt{30})/36$



Con base en los polinomios de Legendre se presenta una tabla con los ceros y los pesos correspondientes, para algunas cuadraturas gaussianas:

n	Ceros (x_k)	Pesos (w_k)
2	± 0.57735	1
3	0	0.88889
	± 0.77460	0.55556
4	± 0.33998	0.65215
	± 0.86114	0.34785



Definition (Regla del trapecio modificado)

Dada una función f integrable en [-1,1], se tiene que la cuadratura gaussiana de dos puntos es la siguiente:

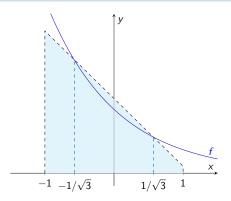
$$\int_{-1}^{1} f(x) dx \approx f\left(\frac{-1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

Si el intervalo de integración es distinto de $\left[-1,1\right]$ se puede hacer un cambio de variable tal que

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \left[f\left(\frac{a-b}{2\sqrt{3}} + \frac{a+b}{2}\right) + f\left(\frac{b-a}{2\sqrt{3}} + \frac{a+b}{2}\right) \right]$$



Geométricamente, la regla de los dos puntos gaussiana calcula el "área" del trapecio que se encuentra definido por los nodos $\left(-1/\sqrt{3},f(-1/\sqrt{3})\right)$ y $\left(1/\sqrt{3},f(1/\sqrt{3})\right)$.





Definition (Regla de los tres puntos)

Dada una función f integrable en [-1,1], se tiene que la cuadratura gaussiana de tres puntos es la siguiente:

$$\int_{-1}^{1} f(x) dx \approx \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{3/5}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{3/5}\right)$$



Para una función f integrable en [a, b] se tiene la siguiente aproximación al usar los $x_0, ..., x_n$ ceros del polinomio p_{n+1} de Legendre:

Theorem

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{k=0}^n w_k f\left(\frac{(b-a)x_k + a + b}{2}\right)$$

Esto es consecuencia de la igualdad

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



Example

Considere la función $F(t)=\int_1^t \frac{x^3}{e^x-1}\,dx$. Calcule con la cuadratura de Gauss de 4 puntos una aproximación de F(2).

Solución: Debe usarse la fórmula con el cambio de variable

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^{n} w_{i} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x_{i}\right)$$

en la regla de cuadratura:



$$G_4(f) = \frac{18 + \sqrt{30}}{36} \left(f\left(\frac{-1}{7}\sqrt{3 - 2\sqrt{\frac{6}{5}}}\right) + f\left(\frac{1}{7}\sqrt{3 - 2\sqrt{\frac{6}{5}}}\right) \right)$$

$$+ \frac{18 - \sqrt{30}}{36} \left(f\left(\frac{-1}{7}\sqrt{3 + 2\sqrt{\frac{6}{5}}}\right) + f\left(\frac{1}{7}\sqrt{3 + 2\sqrt{\frac{6}{5}}}\right) \right)$$

$$= 0.6521 \cdot \left(f(-0.340) + f(0.340) \right) + 0.3478 \cdot \left(f(-0.8611) + f(0.8611) \right)$$

La integral a aproximar es

$$F(2) = \int_{1}^{2} \frac{x^{3}}{e^{x} - 1} dx \Longrightarrow f(x) = \frac{x^{3}}{e^{x} - 1}$$
$$a = 1, b = 2, \quad \frac{b - a}{2} = \frac{1}{2}, \quad \frac{a + b}{2} = \frac{3}{2}$$



Entonces se tiene que

$$F(2) \approx \frac{0.6521}{2} \left(\frac{(1.5 + 0.5(-0.340))^3}{e^{1.5 + 0.5(-0.3340)} - 1} + \frac{(1.5 + 0.5(0.340))^3}{e^{1.5 + 0.5(0.340)} - 1} \right)$$

$$+ \frac{0.3478}{2} \left(\frac{(1.5 + 0.5(-0.8611))^3}{e^{1.5 + 0.5(-0.8611)} - 1} + \frac{(1.5 + 0.5(0.8611))^3}{e^{1.5 + 0.5(0.8611)} - 1} \right) = 0.9516$$



5 Contenidos | 40

- Motivación
- 2 Cuadraturas
- 3 Cuadraturas de Newton-Cotes
- 4 Cuadraturas gaussianas
- **5** Cuadraturas compuestas
- Coeficientes indeterminados



- ► La ventaja de las reglas compuestas radica en que hay funciones en las que las reglas simples no son útiles, ya que el error de aproximación de la integral es muy grande.
- Acá veremos las reglas compuestas para el trapecio y Simpson, pero haremos también regla compuesta para cuadraturas gaussianas.



Theorem (Trapecio compuesto)

Sea n la cantidad de subintervalos equiespaciados tales que $h=\frac{b-a}{n}$. La regla compuesta del trapecio está dada por:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \frac{h}{2} \left(f(a) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh) + f(b) \right)$$

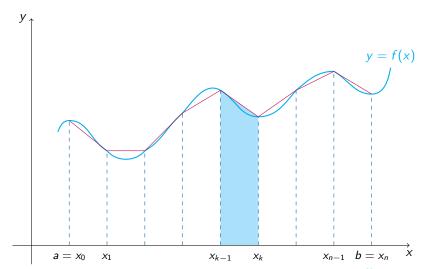
Donde el error de aproximación se estima como:

$$|R_c(f)| \leq \frac{1}{12}M_2(b-a)h^2$$

donde

$$M_2 := \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$$







Theorem (Simpson compuesto)

Sea n la cantidad de subintervalos equiespaciados. Considerando sus puntos medios se hace $h = \frac{b-a}{2n}$. La regla compuesta de Simpson está dada por:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[f(a) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(a+2kh) + 4 \sum_{k=1}^{n} f(a+(2k-1)h) + f(b) \right]$$

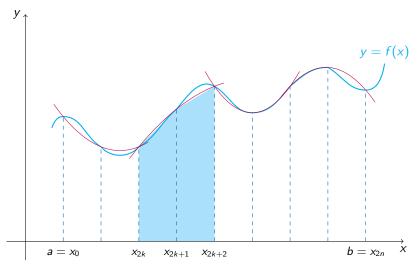
Donde el error de aproximación se estima como:

$$|R_c(f)| \leq \frac{1}{180} M_4(b-a) h^4$$

donde

$$M_4 := \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|$$







Tolerancia y # de intervalos con Trapecio compuesto

Si imponemos una tolerancia $\mathtt{tol} = \delta$ a la cota del error del trapecio compuesto tendremos que

$$\frac{M_2}{12}(b-a)\left(\frac{b-a}{n}\right)^2<\delta$$

Luego de unos cálculo podemos tomar la partición con ${\it N}$ intervalos, donde

$$N = \left[\sqrt{rac{M_2(b-a)^3}{12\delta}} \, \right] + 1$$



Tolerancia y # de intervalos con Simpson 1/3 compuesto

Si imponemos una tolerancia tol= δ a la cota del error de Simpson 1/3 compuesto y luego de unos cálculos, podemos tomar la partición con N intervalos, donde

$$N = \left\lceil \sqrt[4]{\frac{M_4(b-a)^5}{2880\delta}} \right\rceil + 1$$



6 Contenidos | 48

- Motivación
- 2 Cuadraturas
- 3 Cuadraturas de Newton-Cotes
- 4 Cuadraturas gaussianas
- 6 Cuadraturas compuestas
- 6 Coeficientes indeterminados



Si la cuadratura calcula de manera exacta hasta cierto orden de polinomios (grado n), entonces los pesos y/o las abscisas se pueden calcular con un sistema de ecuaciones:

$$\int_{a}^{b} x^{i} dx = \frac{b^{i+1} - a^{i+1}}{i+1} = Q(x^{i}) = \sum_{k=0}^{m} w_{k} x_{k}^{i}$$

para todo i = 0, 1, ..., n.

Esto se conoce como **método de coeficientes indeterminados**, en donde los coeficientes son los pesos y/o las abscisas.

Example

Si tenemos la cuadratura $Q(f) = w_0 f(a) + w_1 f(b)$ en el intervalo [a, b] de manera que la cuadratura es exacta para el conjunto $\mathbb{P}_1[x]$, tomando la base canónica tenemos que $\mathbb{P}_1[x] = c.\ell.\{1, x\}$.



Example

Luego,

$$\int_{a}^{b} 1 dx = b - a = \omega_{0} f(a) + \omega_{1} f(b)$$
$$= \omega_{0} + \omega_{1}$$

$$\int_{a}^{b} x \, dx = \frac{b^2 - a^2}{2} = \omega_0 f(a) + \omega_1 f(b)$$
$$= \omega_0 a + \omega_1 b$$

Resolviendo se tiene que $\omega_0=\omega_1=rac{b-a}{2}$, la cual es la cuadratura del Trapecio sin más ni menos.



Example

Demuestre que la cuadratura de Gauss-Legendre de 3 puntos, en el intervalo [-1,1] posee un grado de exactitud de n=5.

Solución: Debemos probar que, para j = 0: 5 se cumple que

$$\int_{-1}^1 x^j dx = G_3(x^j)$$

con

$$G_3(f) = \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

Notemos que si j es impar entonces la integral vale 0.



Calculemos y comparemos:



¡Muchas Gracias!