Integración numérica

Tema 2 - Operaciones matemáticas básicas

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

Facultad de Ciencias - UNAM

24 de octubre de 2017

1. Cuadraturas Gaussianas

1. Cuadraturas Gaussianas
1.1 Definición de cuadraturas
1.2 Polinomios ortogonales
1.3 Polinomios ortogonales
1.4 Deduciendo las abscisas nodales y los pesos
1.5 Error en la cuadratura gaussiana

Cuadraturas Gaussianas

Hemos visto que las fórmulas de Newton-Cotes para aproximar la intregral

$$\int_a^b f(x)dx$$

trabajan muy bien si $f(x)$ es una función suave, como los polinomios.

Cuadraturas Gaussianas

También aplica para las cuadraturas Gaussianas, ya que son buenas para estimar integrales de la forma:

$$\int_a^b w(x) f(x) dx$$

donde $w(x)$ se denomina *función de ponderación* que puede contener singularidades, siempre y cuando sean integrables.

Cuadraturas Gaussianas

Un ejemplo de este tipo, es la integral

$$\int_0^1 \left(1 + x^2\right) lnx \; dx$$

Cuadraturas Gaussianas

Un ejemplo de este tipo, es la integral

$$\int_0^1 \left(1 + x^2\right) lnx \; dx$$

Cuando tenemos límites de integración infinitos

$$\int_0^\infty \exp(-x) \sin x dx$$

éstos se pueden reacomodar para calcular la integral.

Fórmulas de integración Gaussianas

Las fórmulas de integración Gaussianas tiene la misma forma de las reglas de Newton-Cotes:

$$I = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

donde I representa la aproximación al valor de la integral, la diferencia radica en la forma en que se determinan los pesos A_i y abscisas nodales x_i.

Fórmulas de integración Gaussianas

En la integración de Newton-Cotes los nodos se espacian uniformemente en (a, b), es decir, estaban ya predeterminadas sus ubicaciones.

En la cuadratura de Gauss, se eligen los nodos y los pesos de modo que la ecuación para I, se obtiene la integral exacta si $f(x)$ es un polinomio de grado $2n + 1$ o menor, es decir:

$$\int_a^b w(x)P_m(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i P_m(x_i), \qquad m \leq 2n+1$$

$$\int_a^b w(x)P_m(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i P_m(x_i), \qquad m \leq 2n+1$$

Una manera de determinar los pesos y las abscisas es sustituir $P_0(x) = 1$, $P_1(x) = x$, . . ., $P_{2n+1}(x) = x^{2n+1}$ en la ecuación anterior y resolver el sistema de $2n+2$ ecuaciones:

$$\int_a^b w(x)x^j dx = \sum_{i=0}^{n} A_i x_i^j, \qquad j = 0, 1, \ldots, 2n+1$$

para las incógnitas A_i y x_i.

Como ejemplo veamos: sea $w(x) = \exp(-x)$, $a = 0$, $b = \infty$ y $n = 1$. Las cuatro ecuaciones que determinan x_0, x_1, A_0 y A_1 son:

$$\int_0^{\infty} \exp(-x) dx \;=\; A_0 + A_1$$

Como ejemplo veamos: sea $w(x) = \exp(-x)$, $a = 0$, $b = \infty$ y $n = 1$. Las cuatro ecuaciones que determinan x_0, x_1, A_0 y A_1 son:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \exp(-x)dx &= A_0 + A_1 \\ \int_0^\infty \exp(-x)x\,dx &= A_0 x_0 + A_1 x_1 \end{aligned}$$

Como ejemplo veamos: sea $w(x) = \exp(-x)$, $a = 0$, $b = \infty$ y $n = 1$. Las cuatro ecuaciones que determinan x_0, x_1, A_0 y A_1 son:

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \exp(-x)dx &= A_0 + A_1 \\
\int_0^\infty \exp(-x)x dx &= A_0 x_0 + A_1 x_1 \\
\int_0^\infty \exp(-x)x^2 dx &= A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2
\end{aligned}$$

Como ejemplo veamos: sea $w(x) = \exp(-x)$, $a = 0$, $b = \infty$ y $n = 1$. Las cuatro ecuaciones que determinan x_0, x_1, A_0 y A_1 son:

$$
\begin{aligned}
\int_0^\infty \exp(-x)dx &= A_0 + A_1 \\
\int_0^\infty \exp(-x)x\,dx &= A_0x_0 + A_1x_1 \\
\int_0^\infty \exp(-x)x^2dx &= A_0x_0^2 + A_1x_1^2 \\
\int_0^\infty \exp(-x)x^3dx &= A_0x_0^3 + A_1x_1^3
\end{aligned}
$$

Evaluando las integrales, obtenemos

$$
\begin{aligned}
A_0 + A_1 &= 1 \\
A_0 x_0 + A_1 x_1 &= 1 \\
A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 &= 2 \\
A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 &= 6
\end{aligned}
$$

Cuya solución es:

$$
\begin{aligned}
x_0 &= 2 - \sqrt{2} \qquad A_0 \frac{\sqrt{2}+1}{2\sqrt{2}} \\
x_1 &= 2 + \sqrt{2} \qquad A_1 \frac{\sqrt{2}-1}{2\sqrt{2}}
\end{aligned}
$$

Por tanto la fórmula de integración obtenida es:

$$\int_0^\infty \exp(-x) f(x) dx \simeq \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\left(\sqrt{2}+1\right) f\left(2-\sqrt{2}\right) + \right.$$
$$\left. + \left(\sqrt{2}-1\right) f\left(2+\sqrt{2}\right) \right]$$

Por tanto la fórmula de integración obtenida es:

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty} \exp(-x) f(x) dx \ &\simeq \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\left(\sqrt{2}+1\right) f\left(2-\sqrt{2}\right) + \right. \\ &\left. + \left(\sqrt{2}-1\right) f\left(2+\sqrt{2}\right) \right]\end{aligned}$$

Debido a la no linealidad de las ecuaciones, este enfoque no va a funcionar bien para valores grandes de n.

Hay métodos prácticos para calcular x_i y A_i que requieren un cierto conocimiento de los polinomios ortogonales y su relación con la cuadratura de Gauss.

Hay, sin embargo, varias fórmulas “clásicas” de integración Gaussianas para los cuales, las abscisas y pesos han sido calculados y tabulados con gran precisión.

Estas fórmulas se pueden utilizar sin conocer la teoría detrás de ellas, ya que todo lo que uno necesita para la integración de Gauss son los valores de x_i y A_i.

Polinomios ortogonales

Los polinomios ortogonales se utilizan en muchas áreas de la física, de la matemática y del análisis numérico; se han estudiado a fondo y muchas de sus propiedades ya son conocidas.

Polinomios ortogonales

Los polinomios $\varphi_n(x)$, con $n = 0, 1, 2, \ldots$ (n es el grado del polinomio) se dice que forman un conjunto ortogonal en el intervalo (a, b) con respecto a la función de peso $w(x)$ si

$$\int_a^b w(x)\varphi_m(x)\varphi_n(x)dx = 0, \quad m \neq n$$

El conjunto se determina (con excepción de un factor constante) por: la elección de la función de peso y los límites de integración.

Es decir, cada conjunto de polinomios ortogonales se asocia con ciertos $w(x)$, a y b. El factor constante se especifica de manera estandarizada.

A continuación se enlistan algunos de los polinomios ortogonales clásicos, la última columna indica la estandarización usada.

Polinomios ortogonales

Nombre	Símbolo	a	b	$w(x)$	$\int_a^b \left[\varphi_n(x)\right]^2 dx$
Legendre	$p_n(x)$	-1	1	1	$2/(2n+1)$
Chebyshev	$T_n(x)$	-1	1	$(1-x^2)^{-1/2}$	$\pi/2 \ \ (n>0)$
Laguerre	$L_n(x)$	0	∞	e^{-x}	1
Hermite	$H_n(x)$	$-\infty$	∞	e^{x^2}	$\sqrt{\pi}2^n n!$

Los polinomios ortogonales cumplen relaciones de recurrencia de la forma

$$a_n \varphi_{n+1}(x) = (b_n + c_n x)\varphi_n(x) - d_n \varphi_{n-1}(x)$$

Si los dos primeros polinomios del conjunto se conocen, los otros elementos del conjunto pueden calcularse de la ecuación anterior.

Los coeficientes en la fórmula de recurrencia, junto con $\varphi_0(x)$ y $\varphi_1(x)$ son:

Nombre	$\varphi_0(x)$	$\varphi_1(x)$	a_n	b_n	c_n	d_n
Legendre	1	x	$n+1$	0	$2n+1$	n
Chebyshev	1	x	1	0	2	1
Laguerre	1	$1-x$	$n+1$	$2n+1$	-1	n
Hermite	1	$2x$	1	0	2	2

Otra manera para obtener los polinomios

Los polinomios ortogonales clásicos también se pueden obtener de las fórmulas:

$$
\begin{aligned}
p_n(x) &= \frac{(-1)^n}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\left[\left(1-x^2\right)^n\right] \\
T_n(x) &= \cos(n\cos^{-1}x), \quad n>0 \\
L_n(x) &= \frac{e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\left(x^n e^{-x}\right) \\
H_n(x) &= (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}\left(e^{x^2}\right)
\end{aligned}
$$

Derivadas de los polinomios ortogonales

Las derivadas de los polinomios anteriores se pueden calcular de:

$$
\begin{aligned}
(1-x^2)p_n'(x) &= n[-xp_n(x)+p_{n-1}(x)] \\
(1-x^2)T_n'(x) &= n[-xT_n(x)+npTn-1(x)] \\
xL_n'(x) &= n[L_n(x)-L_{n-1}(x)] \\
H_n'(x) &= 2nH_{n-1}(x)
\end{aligned}
$$

Propiedades de los polinomios

Algunas propiedades los polinomios ortogonales que son relevantes para la preceso de integración Gaussiana son:

1. $\varphi(x)$ tiene n distintos ceros en el intervalo (a, b)

Propiedades de los polinomios

Algunas propiedades los polinomios ortogonales que son relevantes para la preceso de integración Gaussiana son:

1. $\varphi(x)$ tiene n distintos ceros en el intervalo (a, b)
2. Los ceros de $\varphi_n(x)$ están entre los ceros de $\varphi_{n+1}(x)$

Propiedades de los polinomios

Algunas propiedades los polinomios ortogonales que son relevantes para la preceso de integración Gaussiana son:

1. $\varphi(x)$ tiene n distintos ceros en el intervalo (a, b)
2. Los ceros de $\varphi_n(x)$ están entre los ceros de $\varphi_{n+1}(x)$
3. Cualquier polinomio $P_n(x)$ de grado n puede expresarse de la forma:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} c_i \varphi_i(x)$$

Propiedades de los polinomios

4. Se deduce de la ecuación anterior y de la propiedad de ortogonalidad que:

$$\int_a^b w(x)P_n(x)\varphi_{n+m}(x)dx = 0, \quad m \geq 0$$

Deduciendo las abscisas nodales y los pesos

Hay dos teoremas importantes que son de gran utilidad para apoyarnos y tomar sus resultados para la integración Gaussiana, la demostración es relativamente sencilla, pero no los demostraremos aquí, puede ser un buen ejercicio fuera de clase.

Teorema 1

Teorema

Las abscisas nodales $x_0, x_1, \ldots, x_n$ *son los ceros del polinomio* $\varphi_{n+1}(x)$ *que pertenece al conjunto ortogonal definido por*

$$\int_a^b w(x)\varphi_m(x)\varphi_n(x)dx = 0, \quad m \neq n$$

Teorema 2

Teorema

$$A_i = \int_a^b w(x)\mathcal{L}_i(x)dx, \qquad i = 0, 1, \ldots, n$$

donde $\mathcal{L}_i(x)$ *son las funciones cardinales de Lagrange que abarcan los nodos* $x_0, x_1, \ldots, x_n$.

No es difícil calcular los ceros x_i, $i = 0, 1, \ldots, n$ de un polinomio $\varphi_{n+1}(x)$ que pertenece a un conjunto ortogonal, podemos usar alguno de los métodos discutidos en la parte de cálculo de raíces.

Una vez conocidos los ceros, los pesos A_i, $i = 0, 1, \ldots, n$ pueden calcularse de la ecuación anterior.

Fórmulas para calcular los pesos

Se puede demostrar que los pesos se pueden calcular a partir de:

$$
\begin{aligned}
\text{Gauss-Legendre } A_i &= \frac{2}{(1 - x_i^2)\left[P'_{n+1}(x_i)\right]^2} \\
\text{Gauss-Laguerre } A_i &= \frac{1}{x_i\left[L'_{n+1}(x_i)\right]^2} \\
\text{Gauss-Hermite } A_i &= \frac{2^{n+2}(n+1)!\sqrt{\pi}}{\left[H'_{n+1}(x_i)\right]^2}
\end{aligned}
$$

Abscisas y pesos para cuadraturas gaussianas

Vamos a mencionar la expresión para algunas fórmulas de integración por cuadraturas gaussianas.

La tabla de abscisas y pesos que se presenta a continuación, cubre para $n = 1$ a 5, y se redondea a seis decimales.

Las operaciones con estos valores, se considera que funcionan bien si se hacen las cuentas a mano, en caso de requerir una mayor precisión o incluir un número mayor de nodos, será necesario usar la computadora.

Error en la cuadratura gaussiana

El error debido al truncamiento

$$E = \int_a^b w(x) f(x) dx - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

es de la forma $E = K(n) f^{2n+2}(c)$, donde $a < c < b$, el valor de c no se conoce, solamente los extremos.

Error en la cuadratura gaussiana

La expresión para $K(n)$ depende de la cuadratura en particular que se esté utilizando.

Si las derivadas de $f(x)$ se pueden evaluar, el error de las fórmulas es útil para estimar el error en el intervalo.

Cuadratura de Gauss-Legendre

$$\int_{-1}^{1} f(\xi)d\xi \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(\xi_i)$$

$\pm\xi_i$	A_i	$\pm\xi_i$	A_i
$n=1$		$n=4$	
0.577350	1.000000	0.000000	0.568889
$n=2$		0.538469	0.478629
0.000000	0.888889	0.906180	0.236927
0.774597	0.555556	$n=5$	
$n=3$		0.238619	0.467914
0.339981	0.652145	0.661209	0.360762
0.861136	0.347855	0.932470	0.171324

Cuadratura de Gauss-Legendre

La cuadratura de Gauss-Legendre es la más utilizada.

Nótese que los nodos están colocados simétricamente sobre $\xi = 0$, y los pesos asociados al par de nodos simétricos, son iguales, i.e. para $n = 1$, tenemos que $\xi_0 = -\xi_1$ y $A_0 = A_1$.

Error en la cuadratura

El error de truncamiento está dado por:

$$E = \frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3} f^{2n+2}(c), \qquad -1 < c < 1$$

Para usar la cuadratura de Gauss-Legendre en la integral $\int_a^b f(x)dx$, primero hay que "mapear" el intervalo de integración (a, b) al intervalo "estándar" $(-1, 1)$, para ello, usamos la transformación

$$x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\xi$$

Ahora $dx = d\xi(b-a)/2$, y la cuadratura toma la expresión

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

El error por truncamiento, se expresa como

$$E = \frac{(b-a)^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3} f^{(2n+2)}(c), \qquad a < c < b$$

Ejemplo

Evaluar la integral

$$\int_{-1}^{1} (1 - x^2)^{3/2} \, dx$$

con la mayor precisión posible, usando una cuadratura gaussiana.

Modo clásico

El modo normal de resolver mediante una cuadratura gaussiana, es calcuar los nodos para una cuadratura de tipo Gauss-Legendre.

Por lo que tendríamos que ocupar las expresiones que nos devuelvan los ceros de los polinomios.

Usando `scipy.integrate.quadrature`

Para usar la función **integrate.cuadrature** contenida en el módulo **scipy**, hay que considerar lo siguiente:

```
scipy.integrate.quadrature(func, a, b,
tol=1.49e-08, maxiter=50)
```

Usando `scipy.integrate.quadrature`

Para usar la función **integrate.cuadrature** contenida en el módulo **scipy**, hay que considerar lo siguiente:

```
scipy.integrate.quadrature(func, a, b,
tol=1.49e-08, maxiter=50)
```

Esta función calcula la integral definida usando una cuadratura gaussina con tolerancia fija.

Argumentos de `quadrature`

Los argumentos son:

- `func` : una función, ya sea una función de `python` o una expresión.
- `a` : dato de tipo `float`, que representa el límite inferior de integración.
- `b` : dato de tipo `float`, que representa el límite superior de integración.
- `maxiter` : dato de tipo `int`, este argumento es opcional, representa el orden máximo para la quadratura gaussiana.

Valores que devuelve la función

Devuelve:

- `val` : dato de tipo `float`, que representa la aproximación a la integral.
- `err` : dato de tipo `float`, que representa el error en las últimas dos estimaciones de la integral.

Código

Código 1: Código para cuadratura gaussiana

```
from scipy.integrate import quadrature

def g(x):
    return (1 - x**2)**(3/2.)

print(quadrature(g, -1., 1)[0])
```

Solución

El valor de la integral es 1.1781

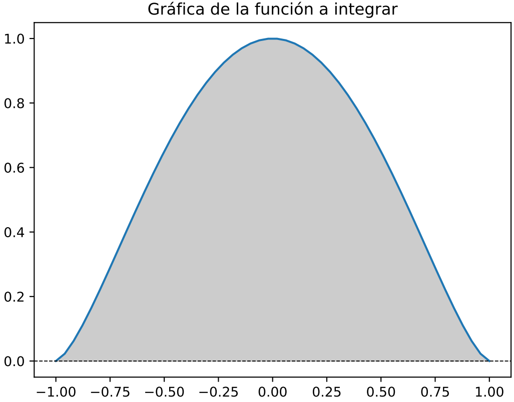

Figura 1: El área debajo de la curva, representa el valor de la integral.