

Integración numérica

Tema 2 - Operaciones matemáticas básicas

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

Facultad de Ciencias - UNAM

13 de marzo de 2018



1. Integración de Romberg
2. Cuadraturas Gaussianas

1. Integración de Romberg

1.1 Definición de la integración de Romberg

1.2 La función `integrate.romberg`

1.3 Integración (`scipy.integrate`)

2. Cuadraturas Gaussianas

Integración de Romberg

La integración de Romberg combina la regla del trapecio con la extrapolación de Richardson.

Usemos la siguiente notación:

$$R_{i,1} = I_i$$

donde I_i representa el valor aproximado de $\int_a^b f(x)dx$ calculado con la regla recursiva del trapecio, usando 2^{i-1} bloques.

Integración de Romberg

Recordemos que el error en esta aproximación es

$E = c_1 h^2 + c_2 h^4 + \dots$ donde

$$h = \frac{b - a}{2^{i-1}}$$

es el ancho del bloque.

Inicio de la integración

La integración de Romberg inicia con el cálculo de $R_{1,1} = I_1$ (un bloque) y $R_{2,1} = I_2$ (dos bloques) a partir de la regla del trapecio.

Cancelación término dominante

El término dominante $c_1 h^2$ es entonces eliminado por la extrapolación de Richardson.

Usando $p = 2$ (el exponente en el término dominante) e indicando el resultado por $R_{2,2}$, tenemos:

$$R_{2,2} = \frac{2^2 R_{2,1} - R_{1,1}}{2^2 - 1} = \frac{4}{3} R_{2,1} - \frac{1}{3} R_{1,1}$$

Notación para los cálculos

Es conveniente guardar los resultados en un arreglo con la forma

$$\begin{bmatrix} R_{1,1} \\ R_{2,1} & R_{2,2} \end{bmatrix}$$

Aumentando los bloques

El siguiente paso es calcular $R_{3,1} = I_3$ (cuatro bloques) y repetir la extrapolación de Richardson con $R_{2,1}$ y $R_{3,1}$, guardando los resultados como $R_{3,2}$:

$$R_{3,2} = \frac{4}{3} R_{3,1} - \frac{1}{3} R_{2,1}$$

Elementos obtenidos

Los elementos del arreglo R calculados hasta el momento son:

$$\begin{bmatrix} R_{1,1} \\ R_{2,1} & R_{2,2} \\ R_{3,1} & R_{3,2} \end{bmatrix}$$

Los elementos de la segunda columna tienen un error del orden $c_2 h^4$, el cual puede ser eliminado con la extrapolación de Richardson.

Usando un valor para p

Usando $p = 4$, obtenemos:

$$R_{3,3} = \frac{2^4 R_{3,2} - R_{2,2}}{2^4 - 1} = \frac{16}{15} R_{3,2} - \frac{1}{15} R_{2,2}$$

El resultado tiene ahora un error del orden $O(h^6)$. El arreglo se ha expandido ahora como

$$\begin{bmatrix} R_{1,1} \\ R_{2,1} & R_{2,2} \\ R_{3,1} & R_{3,2} & R_{3,3} \end{bmatrix}$$

Resultados de otro cálculo

Luego de otra ronda de cálculos, se tiene

$$\begin{bmatrix} R_{1,1} \\ R_{2,1} & R_{2,2} \\ R_{3,1} & R_{3,2} & R_{3,3} \\ R_{4,1} & R_{4,2} & R_{4,3} & R_{4,4} \end{bmatrix}$$

donde el error en $R_{4,4}$ es del orden de $O(h^8)$.

Resultados de otro cálculo

Luego de otra ronda de cálculos, se tiene

$$\begin{bmatrix} R_{1,1} & & & \\ R_{2,1} & R_{2,2} & & \\ R_{3,1} & R_{3,2} & R_{3,3} & \\ R_{4,1} & R_{4,2} & R_{4,3} & R_{4,4} \end{bmatrix}$$

donde el error en $R_{4,4}$ es del orden de $O(h^8)$.

Nótese que la estimación con mayor precisión es siempre el último término de la diagonal.

Punto de paro

Este proceso continua hasta que la diferencia entre dos términos sucesivos de la diagonal son lo suficientemente pequeños.

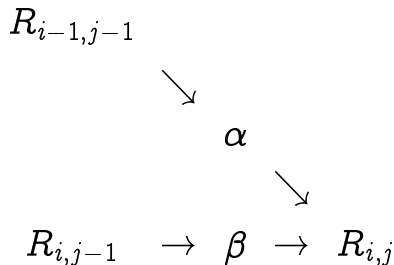
Fórmula general

La fórmula general para la extrapolación es:

$$R_{i,j} = \frac{4^{j-1} R_{i,j-1} - R_{i-1,j-1}}{4^{j-1} - 1} \quad i > 1, \quad j = 2, 3, \dots, i$$

El proceso de integración

Esquemáticamente lo que tenemos es:



Multiplicadores

Donde los multiplicadores α y β dependen de j de la siguiente manera:

j	2	3	4	5	6
α	$-1/3$	$-1/15$	$-1/63$	$-1/255$	$-1/1023$
β	$4/3$	$16/15$	$64/63$	$256/255$	$1024/1023$

Manejo triangular

El arreglo triangular es conveniente para manipularlo computacionalmente hablando.

La aplicación del algoritmo de Romberg puede llevarse dentro de una matriz de una dimensión.

Aprovechando las expresiones

Luego de la primera extrapolación, $R_{1,1}$ ya no se ocupa de nuevo, por lo que podemos re-emplazarla con $R_{2,2}$, por tanto, tenemos en el arreglo

$$\begin{bmatrix} R'_1 = R_{2,2} \\ R'_2 = R_{2,1} \end{bmatrix}$$

Aprovechando las expresiones

En la segunda extrapolación, $R_{3,2}$ sobre-escribe a $R_{2,1}$ y $R_{3,3}$ re-emplaza a $R_{2,2}$, entonces el arreglo queda

$$\begin{bmatrix} R'_1 = R_{3,3} \\ R'_2 = R_{3,2} \\ R'_3 = R_{3,1} \end{bmatrix}$$

Aprovechando las expresiones

En la segunda extrapolación, $R_{3,2}$ sobre-escribe a $R_{2,1}$ y $R_{3,3}$ re-emplaza a $R_{2,2}$, entonces el arreglo queda

$$\begin{bmatrix} R'_1 = R_{3,3} \\ R'_2 = R_{3,2} \\ R'_3 = R_{3,1} \end{bmatrix}$$

Y así podemos continuar. R'_1 contiene siempre el mejor resultado.

Expresión general para la extrapolación

La fórmula de extrapolación para el k -ésima vuelta, es:

$$R'_j = \frac{4^{k-j} R'_{j+1} - R'_j}{4^{k-j} - 1}, \quad j = k-1, k-2, \dots, 1$$

Ejemplo

Usando la integración de Romberg, evalúa

$$\int_0^{\pi} f(x)dx$$

donde $f(x) = \sin(x)$

Primera parte: Regla del trapecio recursiva

$$R_{1,1} = I(\pi) = \frac{\pi}{2}[f(0) + f(\pi)] = 0$$

Primera parte: Regla del trapecio recursiva

$$R_{1,1} = I(\pi) = \frac{\pi}{2}[f(0) + f(\pi)] = 0$$

$$R_{2,1} = I\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{2}I(\pi) + \frac{\pi}{2}f\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1.5708$$

Primera parte: Regla del trapecio recursiva

$$R_{1,1} = I(\pi) = \frac{\pi}{2}[f(0) + f(\pi)] = 0$$

$$R_{2,1} = I\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{2} I(\pi) + \frac{\pi}{2} f\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1.5708$$

$$R_{3,1} = I\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{2} I\left(\frac{\pi}{2}\right) + \frac{\pi}{4} \left[f\left(\frac{\pi}{4}\right) + f\left(\frac{3\pi}{4}\right) \right] = 1.8961$$

Primera parte: Regla del trapecio recursiva

$$R_{1,1} = I(\pi) = \frac{\pi}{2}[f(0) + f(\pi)] = 0$$

$$R_{2,1} = I\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{2} I(\pi) + \frac{\pi}{2} f\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1.5708$$

$$R_{3,1} = I\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{2} I\left(\frac{\pi}{2}\right) + \frac{\pi}{4} \left[f\left(\frac{\pi}{4}\right) + f\left(\frac{3\pi}{4}\right) \right] = 1.8961$$

$$R_{4,1} = I\left(\frac{\pi}{8}\right) = \frac{1}{2} I\left(\frac{\pi}{4}\right) + \frac{\pi}{8} \left[f\left(\frac{\pi}{8}\right) + f\left(\frac{3\pi}{8}\right) + f\left(\frac{5\pi}{8}\right) + f\left(\frac{7\pi}{8}\right) \right] = 1.9742$$

Segunda parte: Extrapolación de Richardson

Usando las fórmulas de extrapolación, construimos la siguiente tabla:

$$\begin{bmatrix} R_{1,1} & & & \\ R_{2,1} & R_{2,2} & & \\ R_{3,1} & R_{3,2} & R_{3,3} & \\ R_{4,1} & R_{4,2} & R_{4,3} & R_{4,4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ 1.5708 & 2.0944 & & \\ 1.8961 & 2.0046 & 1.9986 & \\ 1.9742 & 2.0003 & 2.0000 & 2.0000 \end{bmatrix}$$

Segunda parte: Extrapolación de Richardson

De acuerdo al procedimiento, vemos que converge, por tanto

$$\int_0^{\pi} \sin(x) dx = R_{4,4} = 2.0000$$

que es el resultado exacto.

Ejercicio

Usando la integración de Romberg, evalúa la siguiente integral:

$$\int_0^{\sqrt{\pi}} 2 x^2 \cos(x^2) dx$$

Ejercicio

Usando la integración de Romberg, evalúa la siguiente integral:

$$\int_0^{\sqrt{\pi}} 2 x^2 \cos(x^2) dx$$

Aquí hay dos caminos:

- 1 Elaborar un código completo para resolver el problema.

Ejercicio

Usando la integración de Romberg, evalúa la siguiente integral:

$$\int_0^{\sqrt{\pi}} 2 x^2 \cos(x^2) dx$$

Aquí hay dos caminos:

- 1 Elaborar un código completo para resolver el problema.
- 2 Apoyarnos en las ventajas que nos da `python`.

Camino 1

Aquí tendrían que utilizar su propuesta de código para la regla recursiva del trapecio y luego la integración de Romberg.

Sería el camino “manual” para la solución.

Usando la función `romberg` de `scipy`

En la presentación anterior ya hemos presentado de la librería `scipy` el uso de la función `quad` para integrar una función.

De la misma librería, tomamos la función `romberg`, que realiza una integración con la técnica de Romberg.

Integración (`scipy.integrate`)

El subpaquete `scipy.integrate` proporciona varias técnicas de integración.

<code>fixed-quad</code>	Integración de $f(x)$ usando cuadraturas gaussianas de orden n .
<code>quadrature</code>	Integra con tolerancia dada usando cuadratura gaussiana.
<code>romberg</code>	Integra una función mediante la integración de Romberg.

scipy.integrate.romberg

```
scipy.integrate.romberg(function, a, b, show=False)
```

scipy.integrate.romberg

```
scipy.integrate.romberg(function, a, b, show=False)
```

Es la integración de Romberg de una función.

scipy.integrate.romberg

```
scipy.integrate.romberg(function, a, b, show=False)
```

Es la integración de Romberg de una función.

Devuelve la integral de una función (función de una variable) en el intervalo $[a, b]$.

`scipy.integrate.romberg`

```
scipy.integrate.romberg(function, a, b, show=False)
```

Es la integración de Romberg de una función.

Devuelve la integral de una función (función de una variable) en el intervalo $[a, b]$.

Si **show** es 1, se muestra el arreglo triangular de resultados intermedios.

Código con scipy

Código 1: Integración Romeberg con scipy

```
1 from scipy import cos, pi
2 from scipy.integrate import romberg
3
4
5 def f(x): return 2.0 * (x**2) * cos(x**2)
6
7 resultado = romberg(f, 0, sqrt(pi), show
8                     =True)
9
10 print(resultado)
```


Tabla de resultados

Steps	StepSize	Results							
1	1.772454	-5.568328							
2	0.886227	-1.799813	-0.543642						
4	0.443113	-1.034769	-0.779755	-0.795496					
8	0.221557	-0.925214	-0.888695	-0.895958	-0.897553				
16	0.110778	-0.902166	-0.894484	-0.894870	-0.894852	-0.894842			
32	0.055389	-0.896649	-0.894810	-0.894832	-0.894831	-0.894831	-0.894831		
64	0.027695	-0.895285	-0.894830	-0.894831	-0.894831	-0.894831	-0.894831	-0.894831	-0.894831
128	0.013847	-0.894945	-0.894831	-0.894831	-0.894831	-0.894831	-0.894831	-0.894831	-0.894831

The final result is -0.894831469484 after 129 function evaluations.

Ejercicio de clase

Evalúa la siguiente integral con el procedimiento de Romberg:

$$\int_0^{\frac{\pi}{4}} \frac{dx}{\sqrt{\sin x}}$$

Ejercicio de clase

Vemos que la integral es impropia, por lo que hay que manejarla de tal manera que se remueva la singularidad, en este caso, mediante un cambio de variable, para luego usar

`scipy.integrate.romberg` con los respectivos límites de integración.

Ejercicio

Evalúa la integral

$$\int_0^2 (x^5 + 3x^3 - 2)dx$$

por el método de integración de Romberg.

1. Integración de Romberg

2. Cuadraturas Gaussianas

2.1 Definiciones

2.2 Polinomios ortogonales

2.3 Deduciendo las abscisas nodales y los pesos

2.4 Error en la cuadratura gaussiana

2.5 Funciones `quadrature`

Cuadraturas Gaussianas

Hemos visto que las fórmulas de Newton-Cotes funcionan muy bien para aproximar la integral

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

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 peso* o *ponderación*, éstas pueden contener singularidades, siempre y cuando sean integrables.

Cuadraturas Gaussianas

Un ejemplo de este tipo, es la integral

$$\int_0^1 (1 + x^2) \ln(x) dx$$

Cuadraturas Gaussianas

Un ejemplo de este tipo, es la integral

$$\int_0^1 (1 + x^2) \ln(x) dx$$

En el caso de que algún (o ambos) límite(s) de integración sean 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:

Expresión para la cuadratura

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

Expresión para la cuadratura

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

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.

Expresión para la cuadratura

Para luego resolver el sistema de $2n + 2$ ecuaciones:

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

para las incógnitas A_i y x_i .

Ejemplo de una función $w(x)$

Sea

$$w(x) = \exp(-x), \quad a = 0, \quad b = \infty, \quad n = 1$$

Las cuatro ecuaciones ($j = 0, 1, 2, 3$) que determinan x_0, x_1, A_0 y A_1 son:

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

Ejemplo de una función $w(x)$

Sea

$$w(x) = \exp(-x), \quad a = 0, \quad b = \infty, \quad n = 1$$

Las cuatro ecuaciones ($j = 0, 1, 2, 3$) que determinan x_0, x_1, A_0 y A_1 son:

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

Ejemplo de una función $w(x)$

Sea

$$w(x) = \exp(-x), \quad a = 0, \quad b = \infty, \quad n = 1$$

Las cuatro ecuaciones ($j = 0, 1, 2, 3$) que determinan x_0, x_1, A_0 y A_1 son:

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

Ejemplo de una función $w(x)$

Sea

$$w(x) = \exp(-x), \quad a = 0, \quad b = \infty, \quad n = 1$$

Las cuatro ecuaciones ($j = 0, 1, 2, 3$) que determinan x_0, x_1, A_0 y A_1 son:

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty} \exp(-x) dx &= A_0 + A_1 \\ \int_0^{\infty} \exp(-x) x dx &= A_0 x_0 + A_1 x_1 \\ \int_0^{\infty} \exp(-x) x^2 dx &= A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 \\ \int_0^{\infty} \exp(-x) x^3 dx &= A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3\end{aligned}$$

Evaluando las integrales

Evaluando las integrales, obtenemos

$$A_0 + A_1 = 1$$

$$A_0 x_0 + A_1 x_1 = 1$$

$$A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = 2$$

$$A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = 6$$

Solución del sistema

Cuya solución es:

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

Resultado de la integración

Por tanto la fórmula de integración obtenida es:

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

Resultado de la integración

Por tanto la fórmula de integración obtenida es:

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

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

Calculando nodos y pesos

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.

Calculando nodos y pesos

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 $n = 0, 1, 2, \dots$ (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

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

Polinomios ortogonales

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.

Polinomios ortogonales más utilizados

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

Polinomios ortogonales

Nombre	Símbolo	a	b	$w(x)$	$\int_a^b [\varphi_n(x)]^2 dx$
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}	$\sqrt{\pi} 2^n n!$

Relaciones de recurrencia

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.

Coefficientes de las reglas de recurrencia

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:

$$p_n(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(1 - x^2)^n]$$

$$T_n(x) = \cos(n \cos^{-1} x), \quad n > 0$$

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x})$$

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2})$$

Derivadas de los polinomios ortogonales

Las derivadas de los polinomios anteriores se pueden calcular de:

$$(1 - x^2) p'_n(x) = n [-x p_n(x) + p_{n-1}(x)]$$

$$(1 - x^2) T'_n(x) = n [-x T_n(x) + n p T n - 1(x)]$$

$$x L'_n(x) = n [L_n(x) - L_{n-1}(x)]$$

$$H'_n(x) = 2 n H_{n-1}(x)$$

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)

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 Gaussianas 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, \dots, 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

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

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

Cálculo de las raíces

No es difícil calcular los ceros $x_i, i = 0, 1, \dots, n$ 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 $A_i, i = 0, 1, \dots, n$ pueden calcularse de la ecuación anterior.

Fórmulas para calcular los pesos

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

$$\text{Gauss-Legendre } A_i = \frac{2}{(1 - x_i^2) [P'_{n+1}(x_i)]^2}$$

$$\text{Gauss-Laguerre } A_i = \frac{1}{x_i [L'_{n+1}(x_i)]^2}$$

$$\text{Gauss-Hermite } A_i = \frac{2^{n+2} (n+1)! \sqrt{\pi}}{[H'_{n+1}(x_i)]^2}$$

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.

Gauss-Legendre: abscisas y pesos

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.

Gauss-Legendre: abscisas y pesos

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.

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:

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

Mapeo en el intervalo

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

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

Nueva expresión de la cuadratura

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

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

Estimación del error

El error por truncamiento, se expresa como

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

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 calcular 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

`scipy.integrate.cuadrature`, hay que considerar la sintaxis mínima:

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

Usando `scipy.integrate.quadrature`

Para usar la función

`scipy.integrate.cuadrature`, hay que considerar la sintaxis mínima:

```
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 2: Código para cuadratura gaussiana

```
1 from scipy.integrate import quadrature
2
3 def g(x):
4     return (1 - x**2)**(3/2.)
5
6 print(quadrature(g, -1., 1)[0])
```

Solución

El valor de la integral es 1.1781

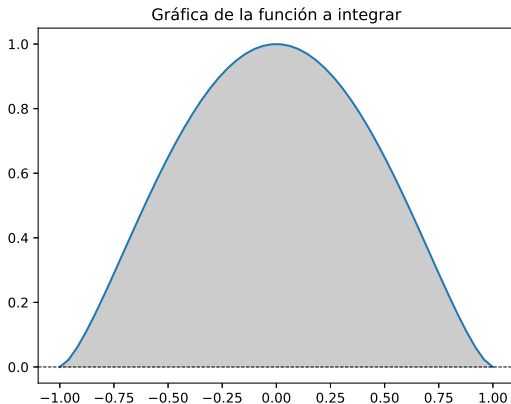


Figura 1: *El área debajo de la curva, representa el valor de la integral.*