# Computació Numèrica

# Tema 5.2 - Integració Numèrica

M. Àngela Grau Gotés

Departament de Matemàtiques
Universitat Politècnica de Catalunya · BarcelonaTech.

11 de maig de 2021

# Drets d'autor

"Donat el caràcter i la finalitat exclusivament docent i eminentment il·lustrativa de les explicacions a classe d'aquesta presentació, l'autor s'acull a l'article 32 de la Llei de propietat intel·lectual vigent respecte de l'ús parcial d'obres alienes com ara imatges, gràfics o altre material contingudes en les diferents diapositives"

# Índex

# Introducció

La integració numèrica ens proporciona valors aproximats de $\displaystyle\int_a^b f(t)\,dt$ que ens seran d'utilitat

- Quan la funció $f(t)$ no tingui primitiva:

$$F(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{z} e^{\frac{-t^2}{2}}\,dt$$

- Quan la primitiva necessita molt esforç de càlcul.
- Quan no es coneix l'expressió analítica de $f(x)$.

Els mètodes que es consideren són de la forma

$$\int_a^b f(t)\,dt = \sum_{i=0}^{n} W_i f(x_i) + E_n(f).$$

- On $W_i$ són els coeficients o pesos la fórmula.
- On $Q_n(f) = \sum_{i=0}^{n} W_i f(x_i)$ és una fórmula de quadratura de $n+1$ punts.
- On $E_n(f)$ és l'error de truncament de la fórmula.

# Precisió

## Grau de precisió d'una fórmula de quadratura

Una fórmula de quadratura per a una funció $f$ en un interval $[a, b]$ es diu que té **grau de precisió n** si i només si tots els monomis de grau menor o igual que $n$, $(x^k, k = 0, 1, \ldots, n)$, són integrats de forma exacta amb la fórmula

$$\int_a^b f(t)\,dt \simeq \sum_{i=0}^{n} W_i f(x_i)$$

### Exercici

Per a quins coeficients $a$, $b$ i $c$ la fórmula d'integració:

$$\int_0^1 f(t)\,dt = a\,f(0) + b\,f(1/2) + c\,f(1).$$

és exacte per a polinomis de grau més petit o igual que dos?

# Fórmules de Newton-Côtes

# Fórmules de Newton-Côtes

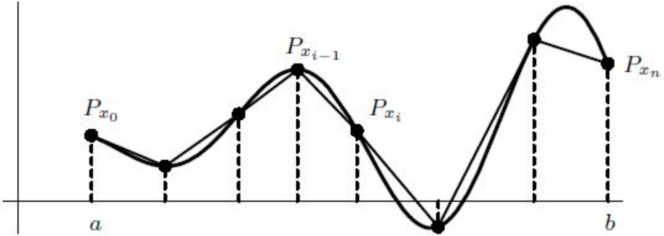



Figura: mètode dels trapezis i interpolant lineal

# Fórmules de Newton-Côtes

Si $f:[a,b]\subseteq\mathbb{R}\longrightarrow\mathbb{R}$ una funció real de variable real contínua, sigui $P_n(x)$ el polinomi interpolador de $f$ en els nodes $a=x_0<x_1<x_2<\ldots<x_n=b$, en la forma de Lagrange, llavors

$$\int_a^b f(t)\,dt \simeq \int_a^b P_n(t)\,dt.$$

L'expresssió que s'obté de $\displaystyle\int_a^b P_n(t)\,dt$ s'anomena **fórmula de Newton-Côtes** de $n+1$ punts.

Té grau de precisió **almenys** $n$.

# Fórmules de Newton-Côtes

## Expressions genèriques

Fent ús del polinomi interpolador en forma de Lagrange en abscises equiespaides i el canvi $x = a + t\,h$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{j=0}^{n} \left( \int_a^b L_j(x) \right) f(x_j) = h \cdot \sum_{j=0}^{n} \alpha_j\, f(x_j)\,,$$

on els nombres $\alpha_j$ depenen només del nombre de punts escollits i vénen definits per

$$\alpha_j = \int_0^n \varphi_j(t)\,dt\,, \qquad \varphi_j(t) = \prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n} \frac{t-k}{j-k}\,.$$

# Exercici

Deduïu la fórmula de Newton-Côtes per a:

- $\displaystyle\int_a^b f(x)dx$ i nodes $a$, $b$.
- $\displaystyle\int_a^b f(x)dx$ i nodes $a$, $\frac{a+b}{2}$, $b$.
- $\displaystyle\int_0^1 f(x)dx$ i nodes 0, $1/3$, $2/3$, 1.

# Fórmules de Newton-Côtes

## Classificació: obertes i tancades

- **Fórmules tancades de $n+1$ punts**. Els extrems de l'interval $[a, b]$ s'inclouen com a nodes.

  Nodes equiespaiats són $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$, i $h = (b-a)/n$

- **Fórmules obertes de $n+1$ punts**. Tots els nodes són de l'interval obert $(a, b)$ no s'inclouen com a nodes.

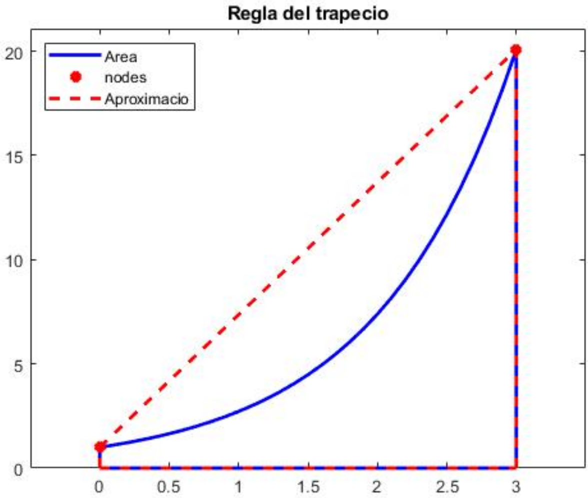
  Nodes equiespaiats són $a < x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n < b$, i $h = (b-a)/(n+2)$ on $a = x_{-1}$ i $b = x_{n+1}$.

# Fórmules de Newton-Côtes

## Tancades

# Fórmula de Newton-Côtes tancada, $n = 1$

## Regla del trapezi



# Regla del trapezi

## Fórmula de Newton-Côtes tancada $n = 1$

$$\int_a^b f(x)\ dx = \underbrace{\frac{h}{2}\cdot(f(a)+f(b))}_{T(f,h)} - \underbrace{\frac{h^3}{12}\,f''(\xi)}_{E\{f\}},$$

$$h = b - a\,, \qquad a < \xi < b\,.$$

És una fórmula tancada, els nodes contenen els extrems de l'interval.

# Regla del trapezi

## Demostració

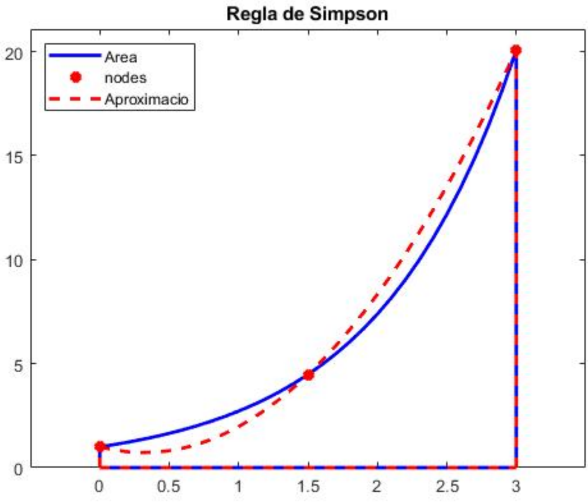
Para analizar el método del trapecio, usemos una interpolación entre el punto $a$ y $b$ usando el polinomio de Lagrange y su error. En este caso tenemos que

$$f(x) = f(a)\frac{x-b}{a-b} + f(b)\frac{x-a}{b-a} + f''(\xi)\frac{(x-a)(x-b)}{2}.$$

Integremos el polinomio obtenido; así nos queda

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \frac{f(a)}{a-b}\int_a^b (x-b)\mathrm{d}x + \frac{f(b)}{b-a}\int_a^b (x-a)\mathrm{d}x + f''(\xi)\int_a^b \frac{(x-a)(x-b)}{2}\mathrm{d}x \\
&= \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a) + f''(\xi)\frac{(b-a)^3}{12} \\
&= \frac{f(a)+f(b)}{2}h + f''(\xi)\frac{h^3}{12},
\end{aligned}$$

nuevamente con $\xi \in [a;b]$. Ahora lo que hemos obtenido es un método cuyo error es proporcional a la derivada segunda, y, en consecuencia, mejoramos nuestra aproximación. Analicemos ahora


Regla de Simpson
Area
nodes
Aproximacio
20
15
10
5
0
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3

# Fórmula de Simpson

## Fórmula de Newton-Côtes tancada $n = 2$

$$\int_a^b f(x)\,dx = \underbrace{\frac{h}{3}\cdot\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)}_{S(f,h)} \underbrace{-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)}_{E\{f\}},$$

$$h = \frac{b-a}{2}, \qquad a < \xi < b\,.$$

Dóna el resultat exacte per funcions del tipus ....

# Fórmula de Newton-Côtes tancada, $n = 3$

## Fórmula de $\frac{3}{8}$ de Simpson

- Per $n = 3$, $h = \frac{b-a}{n}$, $x_k = a + k\ h$, ${}_{k=0,1,2,3}$ s'obté

$$\int_a^b f(x)\ dx = \underbrace{\frac{3h}{8} \cdot (f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3))}_{I(f,h)} - \underbrace{\frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi)}_{E\{f\}},$$

$a < \xi < b$.

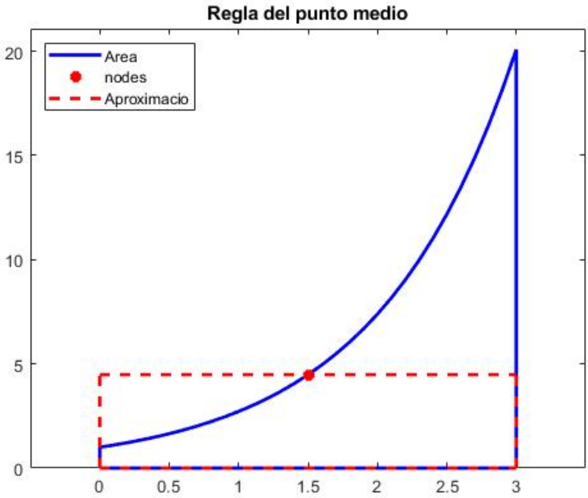
Dóna el resultat exacte per funcions del tipus ....

# Fórmules de Newton-Côtes

## Obertes

# Fórmula de Newton-Côtes oberta $n = 0$

## Regla del punt mig



# Fórmula del Rectangle o punt mig.

## Fórmula de Newton-Côtes oberta $n = 0$

$$\int_a^b f(x)\,dx = \underbrace{h \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right)}_{R(f,h)} + \overbrace{\frac{(b-a)}{24} h^2\ f''(\xi)}^{E\{f\}},$$

$$h = b - a\,, \qquad a < \xi < b\,.$$

És una fórmula oberta, els nodes no contenen els extrems de l'interval.

# Fórmules de Newton-Côtes obertes

## Fórmules obertes per $n=1$ i $n=2$

- Per $n=1$, $h=\frac{b-a}{3}$, $x_{k-1}=a+k\,h\,,\;\; k=0,1,2,3$ s'obté

$$\int_a^b f(x)\,dx=\underbrace{\frac{3h}{2}\cdot\left[f\left(\frac{2a+b}{3}\right)+f\left(\frac{a+2b}{3}\right)\right]}_{I(f,h)}+\underbrace{\frac{3h^3}{4}f''(\xi)}_{E\{f\}},\qquad a<\xi<b\,.$$

- Per $n=2$, $h=\frac{b-a}{4}$, $x_k=a+k\,h\,,\;\; k=0,1,2,3,4$ s'obté

$$\int_a^b f(x)\,dx=\underbrace{\frac{4h}{3}\cdot\left[2f\left(\frac{3a+b}{4}\right)-f\left(\frac{a+b}{2}\right)+2f\left(\frac{a+3b}{4}\right)\right]}_{I(f,h)}+\underbrace{\frac{14h^5}{45}f^{(4)}(\xi)}_{E\{f\}},$$

amb $a<\xi<b$.

# Fórmules de Newton-Côtes

## Comparativa

# Comparació de mètodes

## Exactitud, Error de Truncament i Grau de Precisió

| | Grau precisió | Error truncament | Exacte |
|---|---|---|---|
| Punt mig | 0 | $\frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi_0)$ | 1 |
| Trapezi | 1 | $\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi_1)$ | 1 |
| Simpson | 2 | $\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi_2)$ | 3 |

# Fórmules de Newton-Côtes

## Compostes

# Fórmules de Newton-Côtes compostes

En general, fer servir fórmules de Newton-Côtes no és adient per a intervals de longitud gran, recordem que els polinomis interpoladors en nodes equiespaiats presenten grans oscilacions en els nodes dels extrems del l'interval d'interpolació.

Una opció és treballar per trams amb fórmules de Newton-Côtes de pocs punts, pensem en la interpolació a trossos.

## Exercici

Fent ús de la regla del trapezi, calculeu:

$$\int_0^4 e^x\,dx = \int_0^2 e^x\,dx + \int_2^4 e^x\,dx = \int_0^1 e^x\,dx + \int_1^2 e^x\,dx + \int_2^3 e^x\,dx + \int_3^4 e^x\,dx\,.$$

# Fórmula del Rectangle o punt mig.

Per a $f : [a, b] \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ una funció real de variable real amb derivada segona contínua:

1. Per $a = x_0 < x_1 < ... < x_{n-1} < x_n = b$, i $h_k = x_{k+1} - x_k$ s'obté

$$\int_a^b f(x)\, dx = \sum_{k=1}^{n} \left( h_k \cdot f\left(\frac{x_{k-1} + x_k}{2}\right) + \frac{1}{24} h_k^3\, f''(\xi_k) \right),\; a < \xi_k < b.$$

2. Si partició equiespaida, $h = \frac{(b-a)}{n}$ i $x_k = a + kh$ per a $k = 0, 1, \ldots, n$,

$$\int_a^b f(x)\, dx = h \cdot \sum_{k=1}^{n} f\left(\frac{x_{k-1} + x_k}{2}\right) + \frac{1}{24} h^2 (b-a)\, f''(\xi),\; a < \xi < b.$$

# Fórmules dels trapezis.

## Fórmules de Newton-Côtes compostes

Sigui $f : [a, b] \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ una funció real de variable real amb derivada segona contínua:

1. Per $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$, i $h_k = x_{k+1} - x_k$ s'obté

$$\int_a^b f(x)\, dx = \sum_{k=1}^{n} \left( \frac{h_k}{2} \cdot (f(x_{k-1}) + f(x_k)) - \frac{1}{12} h_k^3\, f''(\xi_k) \right),\ a < \xi_k < b.$$

2. Per partició equiespaida, $h = \frac{(b-a)}{n}$ i $x_k = a + kh$ per a $k = 0, 1, \ldots, n$,

$$\int_a^b f(x)\, dx = \frac{h}{2} \left( f(a) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) \right) - \frac{(b-a)}{12} h^2\, f''(\xi),$$

$a < \xi < b$.

Per a $f : [a, b] \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ una funció real de variable real amb derivada cuarta contínua, per $n$ parell:

1. Per $a = x_0 < x_1 < ... < x_n = b$, i $h_k = \dfrac{x_{k+1} - x_k}{2}$ i $y_k = \dfrac{x_{k+1} + x_k}{2}$ s'obté

$$\int_a^b f(x)\, dx = \sum_{k=0}^{n-1} \left( \frac{h_k}{3} \cdot (f(x_{k+1}) + 4f(y_k) + f(x_k)) - \frac{h_k^5}{90} f^{(4)}(\xi_k) \right)$$

2. Per partició equiespaida, $h = \frac{(b-a)}{n}$ i $x_k = a + kh$ per a $k = 0, 1, \ldots, n$,

$$\int_a^b f(x)\, dx = \frac{h}{3} \cdot \left( f(a) + 4 \sum_{k=1}^{n/2-1} f(x_{2k}) + 2 \sum_{k=1}^{n/2} f(x_{2k-1}) + f(b) \right) - \frac{(b-a)}{180} h^4 f^{(4)}(\xi).$$

$a < \xi < b$.

# Fórmules de Newton-Côtes compostes

## Exercici

Calculeu:

$$\int_0^1 \frac{\sin t}{t}\, dt \approx 0.946083070367 \pm 0.5e{-}12$$

- Regla del punt mig
- Regla dels trapezis

# Mètode de Romberg

# Mètode de Romberg

Fent ús de la extrapolació de Richardson, s'aconsegueix millorar recursivament l'aproximació de la fórmula composta dels trapezis amb poc cost computacional

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] + E\{f\},$$

Es pot demostrar que

$$E\{f\} = K_1 h^2 + K_2 h^4 + K_3 h^6 + \dots\ ,$$

amb $K_i$ una constatnt que depèn de $f^{2i-1}(a)$ i de $f^{2i-1}(a)$

# Mètode de Romberg

Per $h = (b-a)/n$, $x_k = a + kh$ i $k = 0 \div n$ calculem

$$T(h),\ T\left(\frac{h}{2}\right),\ T\left(\frac{h}{4}\right),\ \cdots,\ T\left(\frac{h}{2^p}\right)$$

llavors, l'esquema d'extrapolació de Richardson per $\mathrm{L} \geq 1$, és:

$$T_{\mathrm{L}+1}(h) = T_{\mathrm{L}}(h) + \frac{T_{\mathrm{L}}(h) - T_{\mathrm{L}}(2h)}{4^{\mathrm{L}} - 1}$$

$$T_1(h) = T(h)\,.$$

Consulteu pàg. 169 de Grau &Noguera

# Taula d'extrapolació

| $\mathcal{O}(h^2)$ | $\mathcal{O}(h^4)$ | $\mathcal{O}(h^6)$ | $\mathcal{O}(h^8)$ |
|---|---|---|---|
| $\mathbf{1}: T_1(h)$ | | | |
| $\mathbf{2}: T_1(h/2)$ | $\mathbf{3}: T_2(h/2)$ | | |
| $\mathbf{4}: T_1(h/4)$ | $\mathbf{5}: T_2(h/4)$ | $\mathbf{6}: T_3(h/4)$ | |
| $\mathbf{7}: T_1(h/8)$ | $\mathbf{8}: T_2(h/8)$ | $\mathbf{9}: T_3(h/8)$ | $\mathbf{10}: T_4(h/8)$ |
| $\vdots$ | $\ldots$ | $\ldots$ | $\ldots$ |

Taula: Mètode de Romberg

# Exemple

$$\int_0^{0.8} \frac{\sin t}{t}\, dt \approx 0.772095 \pm 0.0000005$$

| $h$ | $T_1$ | $T_2$ | $T_3$ |
|---|---|---|---|
| 0.8 | 0.758680 | | |
| 0.4 | 0.768760 | 0.772120 | |
| 0.2 | 0.771262 | 0.772096 | 0.772095 |
| 0.1 | 0.771887 | 0.772095 | 0.772095 |

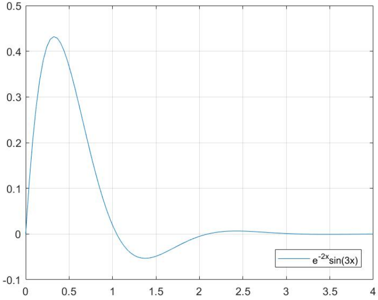
Taula: Mètode de Romberg

# Integració Adaptativa

# Integració Adaptativa

## Introducció

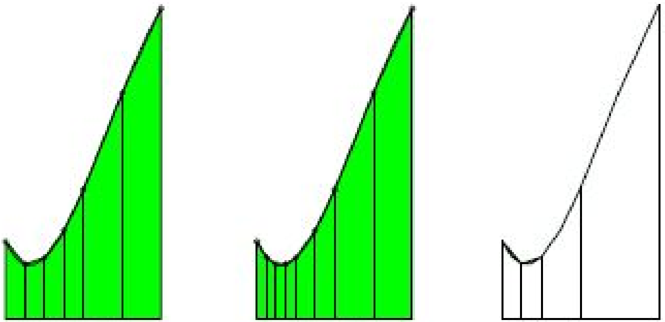
Les fórmules compostes són molt efectives, però amb funcions del tipus




els mètodes amb nodes equiespaiats no són eficients.

# Integració Adaptativa

Els mètodes que es consideren són de la forma



$$\Delta_4 = \left\{0, \frac{1}{16}, \frac{1}{8}, \frac{3}{16}, \frac{1}{4}, \frac{3}{8}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1\right\}$$

# Integració Adaptativa

Es divideix l'interval $[a, b]$ en dos subintervals igual, i fent ús de la fórmula de Simpson per $h = (b - a)/2$ es calcula l'aproximació $I_1$, el mateix càlcul amb $h/2$ per l'interval de l'esquerra $[a, m]$ i l'interval de la dreta $[m, b]$ per $m = (b + a)/2$ obtenint $I_D$ i $I_E$, llavors $I_2 = I_D + I_R$ i per extrapolació calculem $I_3 = I_2 + (I_2 - I_1)/15$.

Si

$$|I_1 - I_2| < 15 \cdot tol \,,$$

en aquest cas retorna el valor extrapolat $I_3$ com a valor, altrement es divideixen els dos subintervals $[a, m]$ i $[m, b]$ en dos cadascun fins que s'arrivi a la precisió desitjada.

S'aplica la tècnica del "divide y vencerás" subdividint l'interval d'integració.

# Mètodes de Montecarlo

## per Integració aproximada

**Mètode de Montecarlo**: mètodes per estimar el valor d'una quantitat desconeguda utilitzant els principis de la inferència estadística.

**Aplicació** Integració múltiple

# Integració de Montecarlo

## Introducció

Es fonamenta en dos resultats:

- Si $X$ és una variable aleatòria i funció de densitat $f$ i $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ és una funció qualsevol, llavors el valor esperat de la v.a. $g(X)$ és

$$E[g(X)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)f(x)dx$$

- LLei forta dels grans nombres

  Si $X_1$,$X_2$,$X_3$,$\ldots X_n$és una successió de v.a.i.i.i, totes de mitja $\mu$, llavors

$$\lim_{n\to\infty} \frac{X_1 + X_2 + X_3 + \cdots + X_n}{n} = \mu$$

S'interpreta la integral

$$\theta = \int_0^1 g(x)\, dx$$

com la esperança $E[g(x)]$ per $x$ variable aleatòria uniforme en $[0, 1]$ .

Aproximació:

1. Generar $u_1, u_2, \ldots u_m$ mostra de $m$ nombres aleatoris uniformes $U(0, 1)$
2. Calculem $\hat{\theta}_m = \dfrac{1}{m} \displaystyle\sum_{i=1}^{m} g(u_i)$ ,
3. L'error és $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{m}}\right)$

# Integració de Montecarlo

## Error (cas I)

- Per la llei forta dels grans nombres, verifica

$$\hat{\theta}_m \to \theta \quad \text{amb probabilitat 1 quan } m \to \infty$$

- L'error $\hat{\theta}_m - \theta$ en la integració pel Montecarlo, és aproximadament una normal de mitja 0 i desviació $\dfrac{\sigma}{\sqrt{m}}$
- La convergència depèn del tamany de la mostra.
- El mètode és més precís al reduir-se $\dfrac{\sigma}{\sqrt{m}}$.
- El valor $s_m$ és l'estimador de $\sigma$

$$\sigma^2 = \int_0^1 (g(x) - \theta)^2 \, dx \quad \longrightarrow \quad s_m^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^{m} \left( g(u_i) - \hat{\theta}_m \right)$$

# Integració de Montecarlo

## Cas general

$$\int_a^b G(x)\,dx \approx \frac{b-a}{M}\sum_{i=1}^{M} G(a+(b-a)u_i)\,, \qquad \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$$

per a $u_1, u_2, \ldots u_m$ és nombres aleatoris uniformes de l'interval $[0,1]$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(x)f(x)\,dx \approx \frac{V}{M}\sum_{i=1}^{M} G(x_i)\,, \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,dx = V$$

per $x_i$ variables aleatòries de distribució de probabiliat $f(x)$.

# Integració de Montecarlo

## *hit-or-miss* (cas II)

Sigui $X$ una variable aleatòria continua, $f(x)$ la seva funció de densitat en un interval $[\alpha, \beta]$, la probabilitat que la variable aleatòria prengui el valor $b \in [\alpha, \beta]$ és

$$p = P\{X \leq b\} = \int_{\alpha}^{b} f(x)\, dx$$

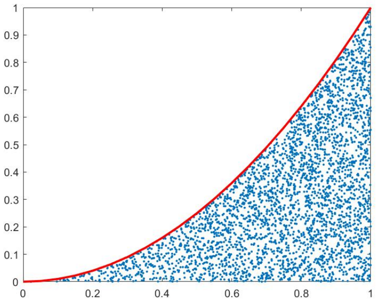
Aproximació *hit-or-miss*

1. Generar $X_1$,$X_2$,$X_3$,... $X_m$ mostra aleatòria de la variable $X$
2. Per cada $X_i$, calculem $g(X_i) = I(X_i \leq x)$ que val val 1 si $X_i \leq x$ i 0 en cas contrari
3. Calculem $\hat{p} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} I(X_i \leq x)$d
4. El màxim de la variança de $\hat{p}$ és $\frac{1}{4m}$

# Integració de Montecarlo

*hit-or-miss* (cas general)




$$\frac{\#\text{punts dins}}{\#\text{punts generats}} = \frac{\text{area sota grafica}}{\text{area rectangle}}$$

# Exercici

## Integració de Montecarlo

a) Calculeu $\int_0^1 x^2 \, dx$ .

b) Calculeu $\int_0^1 (1 - x^2)^{(3/2)} \, dx$ ,

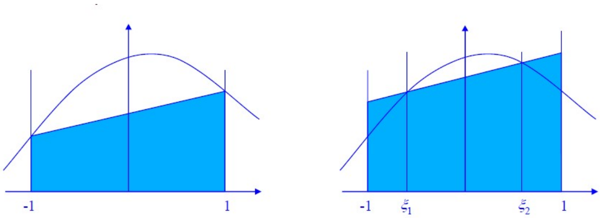
c) Com s'ha de pendre la mostra de gran per obtenir la mateixa exactitud que amb la fórmula dels trapezis?

Per trapezis useu $h = 0.1$ , $h = 0.05$. Per Montecarlo, la mostra de mida prou gran ($N > 1000$)

# Integració Gaussiana

# Fórmula de quadratura GAUSSIANA

## Introducció




A diferència de les Fórmulas de Newton-Côtes, que fan ús d'una partició equiespaiada fixada *a priori*, les diferents tècniques de quadratures gaussianes obtenen els nodes d'integració de tal manera que s'optimitzi tant la precisió como el *gasto* computacional realitzat.

# Fórmula de quadratura GAUSSIANA

S'escullen els nodes $x_0, x_1 \ldots, x_m$ i els pesos $W_0, W_1, \ldots, W_m$ de la fórmula d'aproximació:

$$\int_a^b f(t)w(t)\,dt \simeq \sum_{j=0}^{m} W_j f(x_j). \qquad (1)$$

de tal manera el grau d'exactitud sigui el màxim per $2m+1$ punts; el sistema d'equacions (1) té $2m+2$ variables a determinar, les condicions d'exactitud

$$\int_a^b t^k w(t)\,dt = \sum_{j=0}^{m} W_j x_j^k \quad 0 \leq k \leq 2m+1.$$

dóna lloc a un sistema de $2m+2$ equacions i $2m+2$ incògnites.

Gauss va demostrar que el sistema té solució única quan $w = 1$ i $[a, b] = [-1, 1]$.

Sigui $\{q_j\}_{j\in\mathbb{N}}$ el polinomi ortogonal mònic de grau $j$ i $\{p_j\}_{j\in\mathbb{N}}$ el polinomi ortonormal mònic de grau $j$ respectivament respecte del producte escalar

$$< f, g >= \int_a^b f(x)\, g(x)\, w(x)\, dx \quad f, g \in \mathcal{C}[a, b] \tag{2}$$

## Teorema

Les arrels del polinomi $p_n$ són reals, diferents entre elles i pertanyen a l'interval $(a, b)$; es a dir existeixen $n$ nombres reals tals $x_k \in (a, b)$ tal que $p_n(x_k) = 0$.

Nodes no equiespaiats

La fórmula d'integració:

$$\int_a^b f(t)w(t)\,dt = \sum_{i=0}^{m} W_i f(x_i) + E_m\{f\} \qquad (3)$$

pot tenir grau de precisió igual a $\mathbf{2m+1}$ si els $m+1$ nodes $x_0, x_1, \ldots, x_m$ són els zeros del polinomi ortogonal en $[a, b]$ de grau $m+1$, (1).
Donats els nodes, $x_0, x_1, \ldots, x_m$ els pesos $W_0, W_1, \ldots, W_m$ són sempre positius i es calculen per

$$W_j = \int_a^b l_j(x)\,dx \quad j = 0, \ldots, m\,.$$

Polinomis ortogonals de Legendre, Laguerre, TXebysxev, Hermitte, ...

# Fórmula de quadratura GAUSSIANA

## Expressió de l'error

La fórmula d'integració:

$$\underbrace{\int_a^b f(t)w(t)\,dt}_{I(f)} = \underbrace{\sum_{i=0}^{m} W_i f(x_i)}_{Q_m(f)} + E_m\{f\} \qquad (4)$$

### Teorema

Si $f \in \mathcal{C}^{2m+2}([a,b])$, l'expressió de $E_m\{f\}$ és:

$$E_m\{f\} = \frac{f^{(2m+2)}(\eta)}{(2m+2)!} \int_a^b q_{m+1}^2(x)w(x)\,dx \quad \eta \in (a,b)\,.$$

Si $f$ és un polinomi de grau $\leq 2m+1$, llavors $E_m\{f\} = 0$.

# Integració Gauss-Legendre

La fórmula d'integració és:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \sum_{j=1}^{m} \beta_i f(x_i) + E_m\{f\}$$

amb els nodes $\mathbf{x_1}, \ldots, \mathbf{x_m}$ els zeros del polinomi de Legendre de grau $m$ i $W_j = \displaystyle\int_{-1}^{1} l_j(x)\,dx$ per $l_j(x)$ els polinomis interpoladors de lagrange desl nodes escollits.

$$P_0(x) = 1\,, \quad P_1(x) = x\,, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)\,, \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)\,, \ldots$$

$$P_n(x) = \frac{1}{n}\left((2n-1)x\,P_{n-1}(x) + (n-1)\,P_{n-2}(x)\right)$$

# Integració Gauss-Legendre

| $n$ | nodos $x_i$ | | | coeficientes $c_i$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 2 | $-\sqrt{1/3}$ | = | -0,5773502691896 | 1 | = | 1,0000000000000 |
| | $\sqrt{1/3}$ | = | 0,5773502691896 | 1 | = | 1,0000000000000 |
| 3 | $-\sqrt{3/5}$ | = | -0,7745966692414 | $5/9$ | = | 0,5555555555555 |
| | 0 | = | 0,0000000000000 | $8/9$ | = | 0,8888888888888 |
| | $\sqrt{3/5}$ | = | -0,7745966692414 | $5/9$ | = | 0,5555555555555 |
| 4 | $-\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}}$ | = | -0,8611363115940 | $\frac{90-5\sqrt{3}}{180}$ | = | 0,3478548451374 |
| | $-\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}}$ | = | -0,3399810435848 | $\frac{90+5\sqrt{3}}{180}$ | = | 0,6521451548625 |
| | $\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}}$ | = | 0,3399810435848 | $\frac{90+5\sqrt{3}}{180}$ | = | 0,6521451548625 |
| | $\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}}$ | = | 0,8611363115940 | $\frac{90-5\sqrt{3}}{180}$ | = | 0,3478548451374 |
| 5 | | | -0,9324695142031 | | | 0,1713244923791 |
| | | | -0,6612093864662 | | | 0,3607615730481 |
| | | | -0,2386191860831 | | | 0,4679139345726 |
| | | | 0,2386191860831 | | | 0,4679139345726 |
| | | | 0,6612093864662 | | | 0,3607615730481 |
| | | | 0,9324695142031 | | | 0,1713244923791 |

# Integració Gauss-Txebixev

La fórmula d'integració és:

$$\int_{-1}^{1} \frac{g(t)}{\sqrt{1-t^2}}\, dt = \frac{\pi}{m} \sum_{i=1}^{m} g(t_i) + E_m\{g\}$$

amb els $m$ nodes $t_1, \ldots, t_m$ els zeros del polinomi de Txebixev de grau $m$, els zeros són $t_k = \cos\left[\dfrac{(2k-1)\pi}{2m}\right]$.

En particular l'error és:

$$E_m\{g\} = \frac{g^{2m)}(\xi)}{(2m)!} \frac{2\pi}{2^{2m}}$$

$$T_0(x) = 1\,, \quad T_1(x) = x\,, \quad T_2(x) = 2x^2 - 1\,, \ldots, \quad T_{n+1}(x) = 2x\,T_n(x) - T_{n-1}(x)$$

# Fórmules de Lobatto

Són les fórmules que s'obtenen d'integrar l'interpolant de grau $m$ en els nodes $x_0 = -1 < x_1 < \cdots < x_m = 1$, on els nodes interiors $x_1, \ldots, x_{m-1}$ són els zeros de la derivada del polinomi de Legendre de grau $m$. Tenen grau d'exactitud $2m-1$.

Per exemple, per $m = 3$:

$$\int_{-1}^{1} f(t)\,dt = \frac{1}{6}\left(f(-1) + 5f\left(\frac{-\sqrt{5}}{5}\right) + 5f\left(\frac{\sqrt{5}}{5}\right) + f(1)\right) .$$

$$\int_{0}^{1} f(x)\,dx = \frac{1}{12}\left(f(0) + 5f\left(\frac{5-\sqrt{5}}{10}\right) + 5f\left(\frac{5+\sqrt{5}}{10}\right) + f(1)\right) .$$

# Gauss – Lobatto Quadrature

An Extension of Gaussian Quadrate

**How is Gauss-Lobatto different than Gaussian Quadrature?**

- The integration points INCLUDE the endpoints of the integration interval
- Accurate for polynomials up to degree 2n-3

The Lobatto Quadrature of the function f(x) on the interval [-1,1] is

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \frac{2}{n(n-1)}[f(1)+f(-1)] + \sum_{i=2}^{n-1} w_i f(x_i) + R_n$$

with weights

$$w_i = \frac{2}{n(n-1)[P_{n-1}(x_i)]^2}, \qquad x_i \neq \pm 1$$

and remainder

$$R_n = \frac{-n(n-1)^3 2^{2n-1}[(n-2)!]^4}{(2n-1)[(2n-2)!]^3} f^{(2n-2)}(\xi), \qquad -1<\xi<1.$$

q = quadl(fun,a,b) approximates the integral of the function fun from a to b, to within an error of $10^{-6}$ using adaptive Lobatto quadrature. (Limits a and b must be finite.)

# Altres ..

- Integració Gauss-Laguerre: $\int_0^{\infty} g(x)e^{-x}dx$

$$L_0(x) = 1\,, \quad L_1(x) = 1 - x\,, \quad L_2(x) = \frac{1}{2}(x^2 - 4x + 2)$$

$$L_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1}\left((2n+1-x)L_n(x) - n\,L_{n-1}(x)\right)$$

- Integració Gauss-Hermite: $\int_{-\infty}^{\infty} g(x)e^{-x^2}dx$

$$H_0(x) = 1\,, \quad H_1(x) = 2x\,, \quad H_2(x) = 4x^2 - 2\,, \quad H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$$

# Canvi d'interval

- La relació $x = a + t(b-a)$ aplica l'interval $[a, b]$ en l'interval $[0, 1]$:

$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a)\int_0^1 f(a+t(b-a))\,dt$$

- La relació $x = (a+b+t(b-a))/2$ aplica l'interval $[a, b]$ en l'interval $[-1, 1]$:

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

# Guia estudi subtema

Llibre Càlcul numèric: teoria i pràctica

- Conceptes associats: Capítol 5, Derivació i integració numèrica. Des de la pàgina 164 fins a la 195.

Llibre Cálculo Científico con MATLAB y Octave

- Conceptes i exercicis resolts: capítol 4, pàgines 109 a 1239.
- Problemes i pràctiques proposades: del 4.5 al 4.18

# Llibres de consulta online

- Llibre de consulta - Accès UPCommons,
  Càlcul numèric: teoria i pràctica
- Llibre de consulta - Accès UPCommons,
  Cálculo numérico
- Llibre de consulta - Accès Biblioteca,
  Cálculo Científico con MATLAB y Octave by A. Quarteroni, F. Saleri
- Métodos Numéricos, J. Douglas Faires & Richard Burden. Ed.Thomson 3era edición. 2004.