



Integración numérica

Laboratori de Càlcul Numèric (LaCàN)
Departament de Matemàtica Aplicada III
Universitat Politècnica de Catalunya (Barcelona)
<http://www-lacan.upc.es>

- Motivación y objetivos
- Cuadratura numérica
 - Planteamiento general
 - Clasificación
 - Orden de convergencia
- Cuadraturas de Newton-Cotes
- Cuadraturas de Gauss
- Cuadraturas mixtas
- Cuadraturas compuestas

- **Objetivo:** calcular/aproximar el valor de la integral

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

- Limitaciones de la integración analítica:
 - la expresión analítica de $f(x)$ no es conocida: datos experimentales o función evaluable sólo de forma discreta,
 - $f(x)$ con expresión analítica pero con integral analítica complicada o desconocida.

$$\int_0^{\pi/2} \frac{x}{\sin x} dx = 2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} - \frac{1}{7^2} + \dots \right)$$

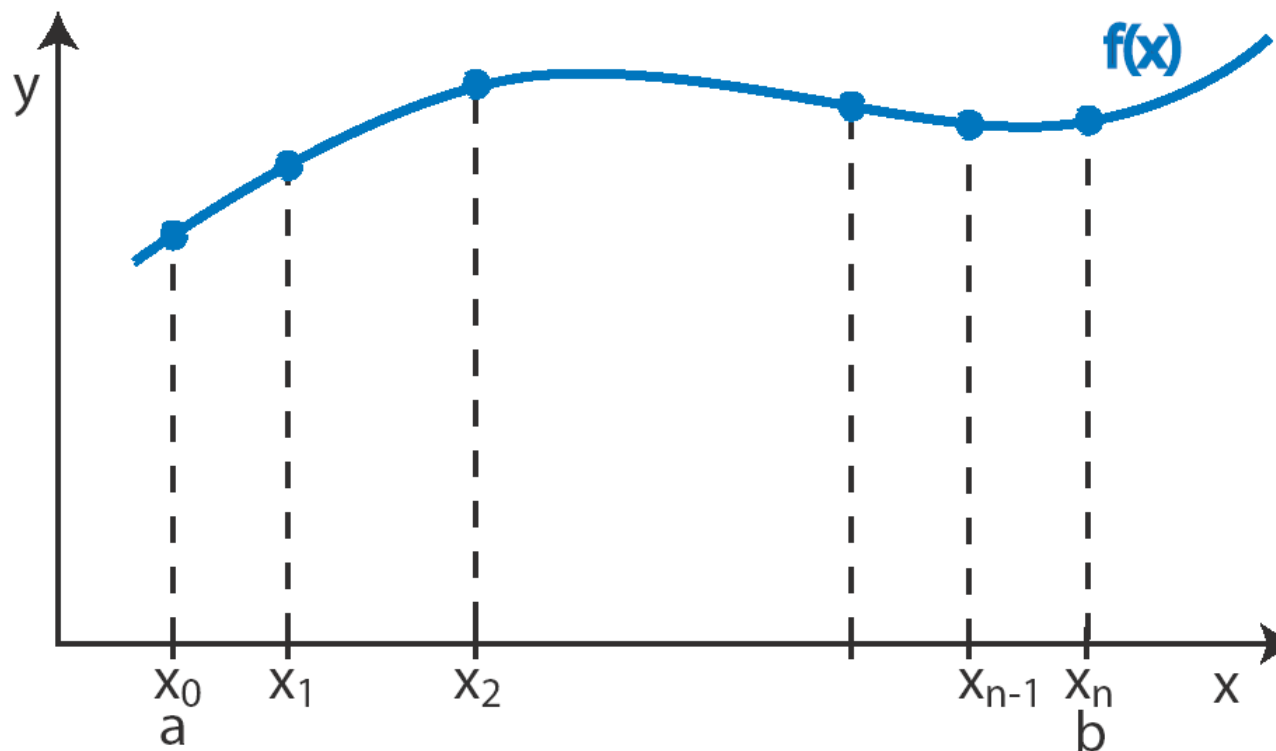
Objetivos

- Entender cómo se aproxima una integral mediante una cuadratura numérica
- Entender qué es el orden de una cuadratura y ser capaz de calcularlo
- Aprender a utilizar las cuadraturas de Gauss y las de Newton-Cotes, y saber cuando se pueden utilizar unas u otras
- Ser capaz de utilizar cuadraturas compuestas

Cuadratura numérica

$$I = \int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) + E_n$$

↑ pesos
↑ puntos
← error



Planteamiento general

1. Aproximar f por un polinomio

$$f(x) = p_n(x) + R_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i(x) + R_n(x)$$

2. Integrar

(con interpolación de Lagrange)

$$I = \int_a^b p_n(x) \, dx + \int_a^b R_n(x) \, dx$$

$$I = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) + E_n$$

$$w_i = \int_a^b L_i(x) \, dx, \quad E_n = \int_a^b R_n(x) \, dx$$

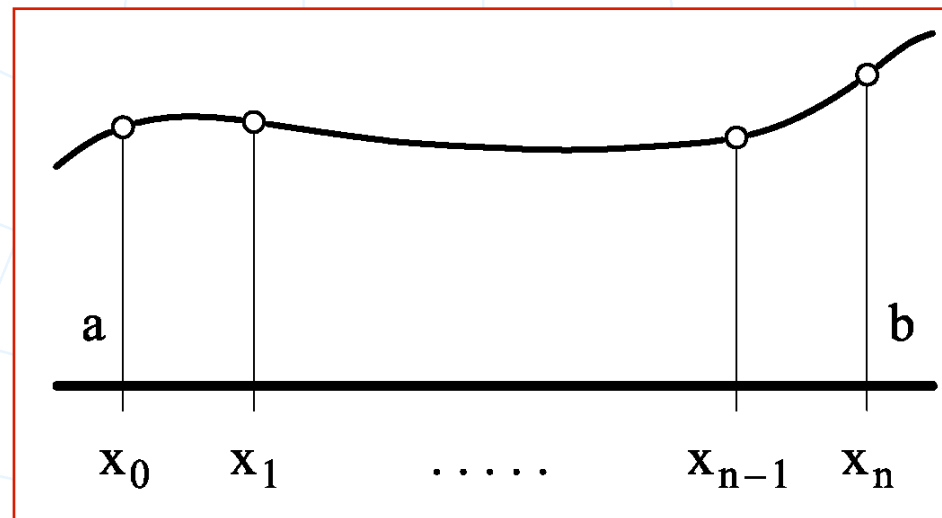
Clasificación

- Según los puntos de integración:
 - **Newton-Cotes**: puntos $\{x_i\}_0^n$ arbitrarios (datos experimentales...)
 - generalmente puntos equiespaciados
 - sólo hay que determinar los pesos $\{w_i\}_0^n$ y el error E_n
 - **Gauss**: puntos “óptimos” (hábilmente elegidos)
 - f se puede evaluar donde se desee
 - se eligen los puntos $\{x_i\}_0^n$ para que la cuadratura sea “lo mejor posible” y, después, se calculan $\{w_i\}_0^n$ y E_n
 - **Mixtas** (Radau, Lobatto): algunos puntos son predeterminados y el resto a elegir

- Según los extremos:

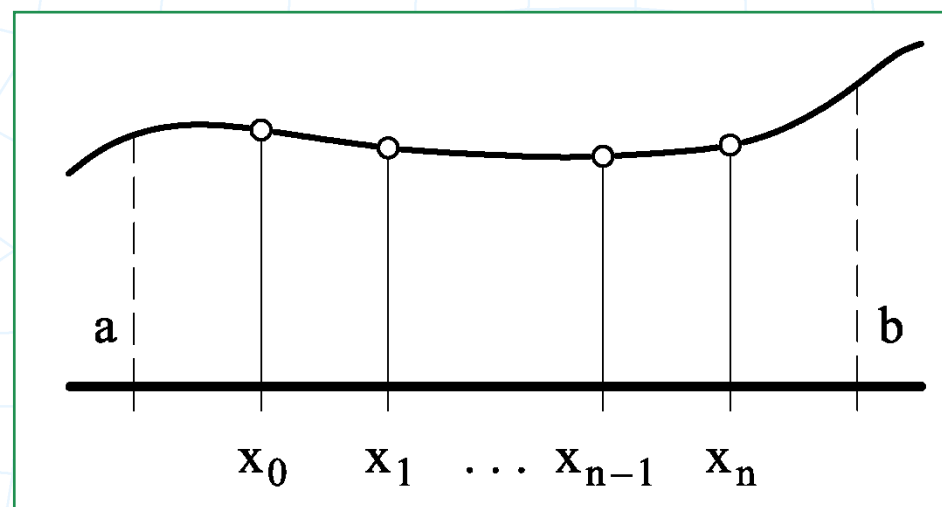
- cuadraturas cerradas

$$a = x_0 \text{ y } b = x_n$$



- cuadraturas abiertas

$$a < x_0 \text{ y } b > x_n$$



Orden de una cuadratura

- **Definición:** se dice que una cuadratura es de orden q si integra exactamente polinomios de grado $\leq q$
- Si la cuadratura se obtiene integrando el polinomio interpolador $p_n(x)$ (con $n+1$ puntos), entonces la cuadratura es de orden n , o superior.

- Si el error es de la forma

$$E = C f^{q+1}(\mu)$$

entonces la cuadratura es de orden q

Cuadraturas de Newton-Cotes

Fórmulas cerradas de Newton-Cotes

- Puntos $\{x_i\}_0^n$ arbitrarios
- Sólo hay que calcular

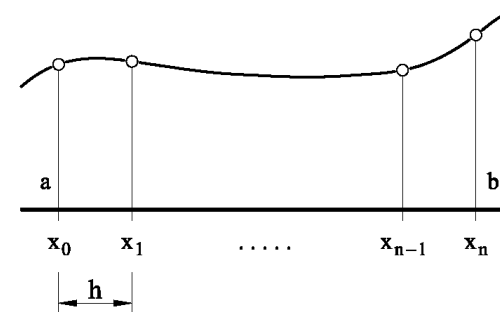
los pesos $w_i = \int_a^b L_i(x) dx$,

y el error $E_n = \int_a^b R_n(x) dx$

- Cuadraturas tabuladas para puntos equiespaciados.

$$x_i = x_0 + ih = a + ih$$

$$h = \frac{b - a}{n}$$



Cambio de variable

$$x = x_0 + \alpha h$$

- Los puntos de integración $x_i = x_0 + ih$ corresponden a $\alpha=0,1,\dots,n$
- Polinomios y resto de Lagrange

$$L_i(x) = L_i(x_0 + \alpha h) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{\alpha - j}{i - j}$$

$$\begin{aligned}
 R_n(x) &= (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \\
 &= \alpha(\alpha - 1) \cdots (\alpha - n) h^{n+1} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}
 \end{aligned}$$

Cuadraturas cerradas de Newton-Cotes con puntos equiespaciados

$$I = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) + E_n$$

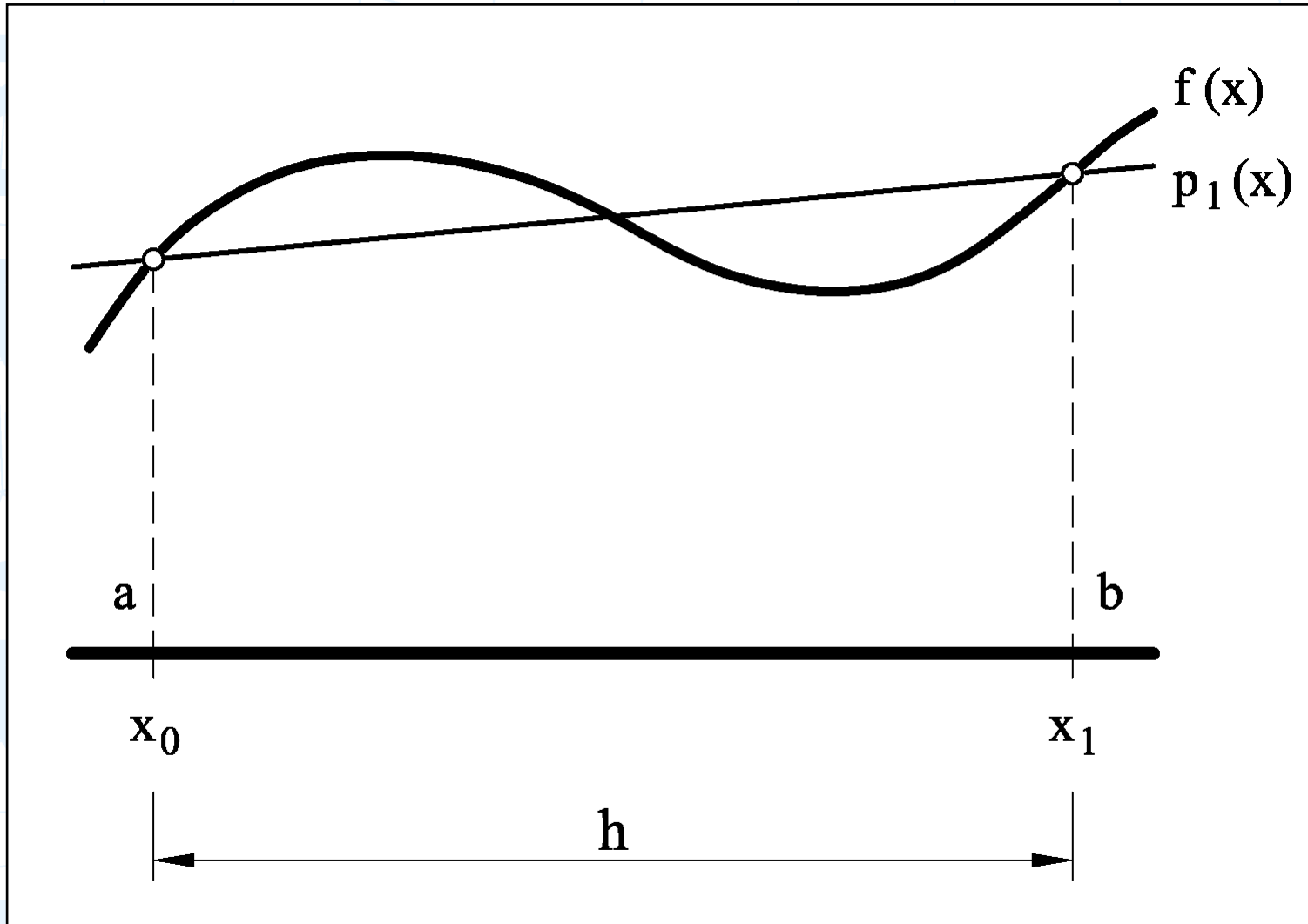
- Pesos de integración

$$w_i = \int_a^b L_i(x) dx = h \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{\alpha - j}{i - j} d\alpha$$

- Error

$$E_n = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} \int_0^n f^{(n+1)}(\mu) \prod_{j=0}^n (\alpha - j) d\alpha.$$

Fórmula del trapecio (n=1)



Fórmula del trapecio ($n=1$)

$$\omega_0 = h \int_0^1 \frac{\alpha - 1}{-1} d\alpha = h \left(\alpha \Big|_0^1 - \frac{\alpha^2}{2} \Big|_0^1 \right) = \frac{h}{2}$$

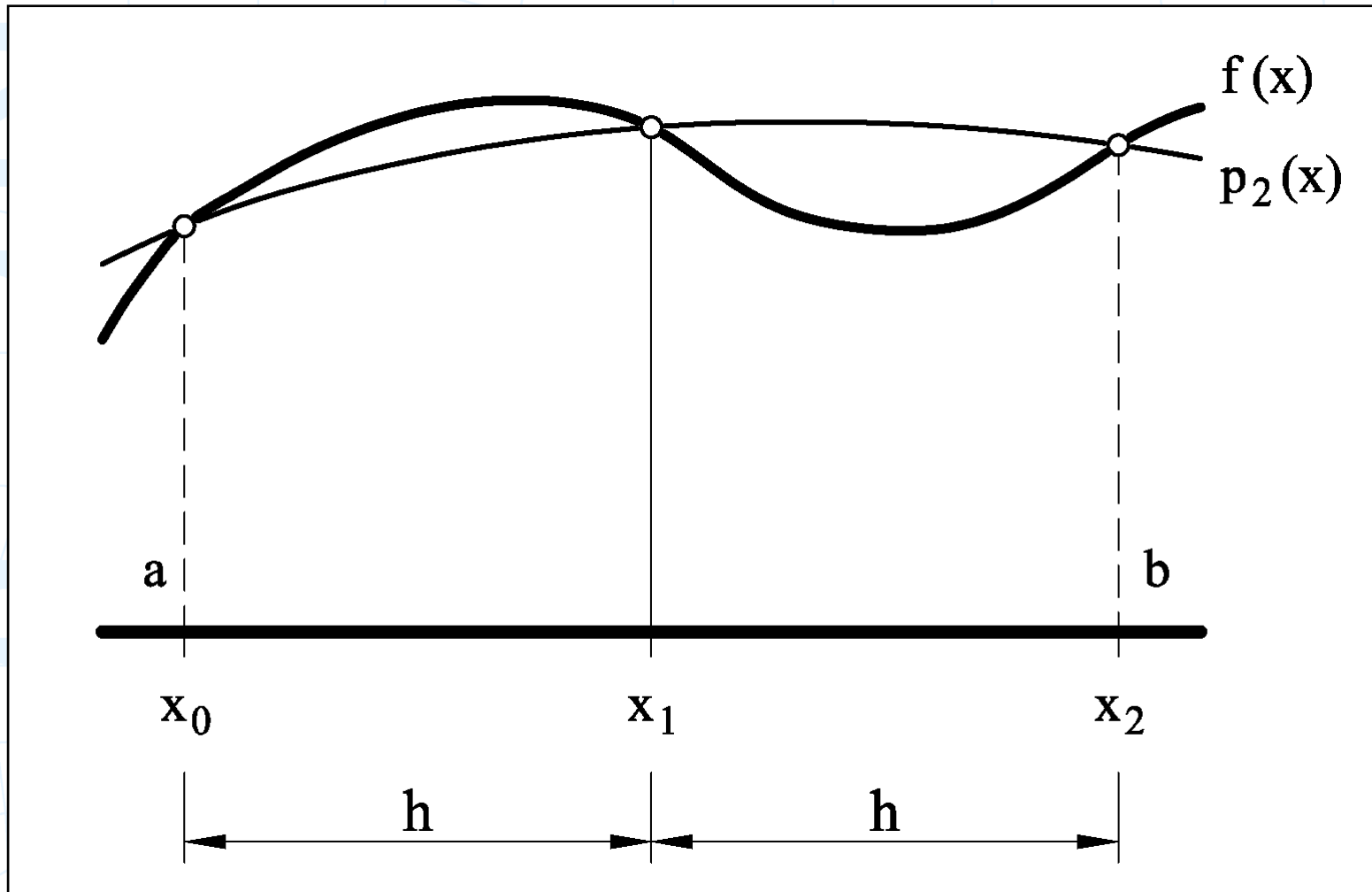
$$\omega_1 = h \int_0^1 \frac{\alpha}{1} d\alpha = h \frac{\alpha^2}{2} \Big|_0^1 = \frac{h}{2}$$

$$E_1 = \frac{h^3}{2} \int_0^1 \alpha(\alpha - 1) f''(\xi) d\alpha = -\frac{h^3}{12} f''(\mu)$$

teorema del valor medio integral

$$I = \int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} (f(x_0) + f(x_1)) - \frac{h^3}{12} f''(\mu), \quad \mu \in [a, b]$$

Fórmula de Simpson ($n=2$)



Fórmula de Simpson ($n=2$)

$$\omega_0 = h \int_0^2 \frac{(\alpha - 1)(\alpha - 2)}{(-1)(-2)} d\alpha = \frac{h}{2} \left(\frac{\alpha^3}{3} \Big|_0^2 - 3 \frac{\alpha^2}{2} \Big|_0^2 + \alpha \Big|_0^2 \right) = \frac{h}{3}$$

$$\omega_1 = h \int_0^2 \frac{\alpha(\alpha - 2)}{(1)(-1)} d\alpha = h \left(2 \frac{\alpha^2}{2} \Big|_0^2 - \frac{\alpha^3}{3} \Big|_0^2 \right) = \frac{4h}{3}$$

$$\omega_2 = h \int_0^2 \frac{\alpha(\alpha - 1)}{(2)(1)} d\alpha = h \left(\frac{\alpha^3}{3} \Big|_0^2 - \frac{\alpha^2}{2} \Big|_0^2 \right) = \frac{h}{3}$$

$n=2$ par \rightarrow orden 3 (mayor de lo esperado)

$$\begin{aligned} E_2 &= \frac{h^5}{4!} f^{(4)}(\mu) \int_0^2 \alpha^2 (\alpha - 1)(\alpha - 2) d\alpha \\ &= \frac{h^5}{24} f^{(4)}(\mu) \left(\frac{\alpha^5}{5} \Big|_0^2 - 3 \frac{\alpha^4}{4} \Big|_0^2 + 2 \frac{\alpha^3}{3} \Big|_0^2 \right) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\mu) \end{aligned}$$

Error de las cuadraturas cerradas de Newton-Cotes

- Si n es impar (orden n)

$$E_n = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\mu) \int_0^n \alpha(\alpha-1) \cdots (\alpha-n) d\alpha$$

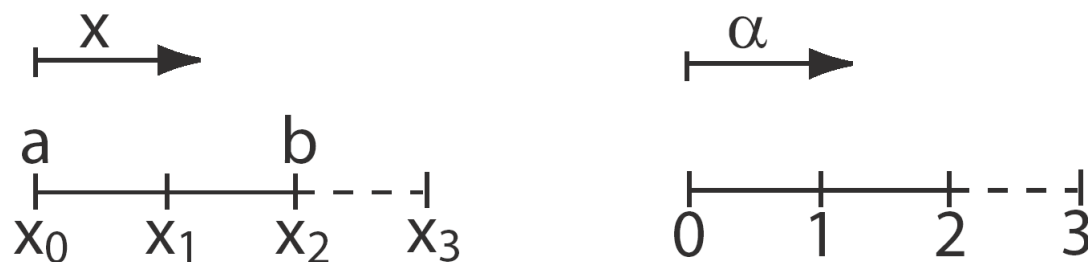
- Si n es par (orden $n+1$)

$$E_n = \frac{h^{n+3}}{(n+2)!} f^{(n+2)}(\mu) \int_0^n \alpha(\alpha-1) \cdots (\alpha-(n+1)) d\alpha$$

$$\mu \in [a, b]$$

Demostración en Ralston & Rabinowitz, "A first course in numerical analysis", McGraw-Hill, 2ª edición, 1978

- OBSERVACIÓN:** si se considera un punto más x_3 (fuera del intervalo $[a,b]$)



El polinomio interpolador con 4 puntos es

$$p_3(x_0 + \alpha h) = p_2(x_0 + \alpha h) + \alpha(\alpha - 1)(\alpha - 2) \frac{\Delta^3 f(x_0)}{3!}$$

3ª diferencia
de Newton

- Integrando

$$\int_0^2 p_3(x_0 + \alpha h) dx = \int_0^2 p_2(x_0 + \alpha h) dx + \frac{\Delta^3 f(x_0)}{3!} \underbrace{\int_0^2 \alpha(\alpha - 1)(\alpha - 2) dx}_0$$

- Utilizamos el residuo de Lagrange de $p_3(x)$ para calcular el error de Simpson

$$E_2 = h \int_0^2 R_3(x_0 + \alpha h) d\alpha = \frac{h^5}{4!} \int_0^2 \alpha(\alpha - 1)(\alpha - 2)(\alpha - 3) f^{(4)}(\xi) d\alpha$$

orden 3

(mayor de lo esperado)

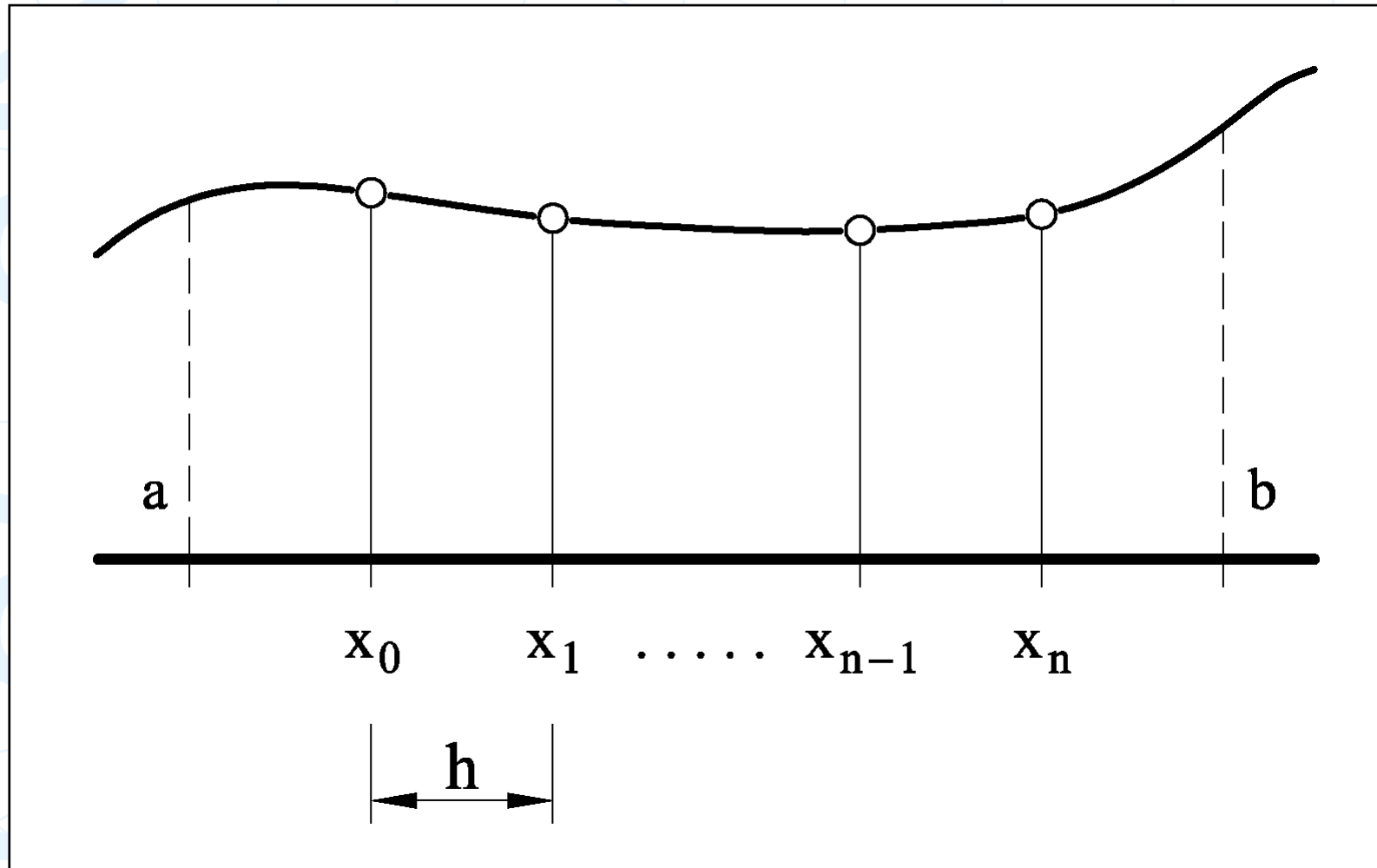
(pasa siempre que n es par)

Fórmulas cerradas de Newton-Cotes

$$\begin{aligned}
 n=1: \quad I &= \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] - \frac{h^3}{12} f''(\mu) && \text{(Trapezio)} \\
 n=2: \quad I &= \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\mu) && \text{(Simpson)} \\
 n=3: \quad I &= \frac{3h}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] - \frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\mu) && \text{(2ª Simpson)} \\
 n=4: \quad I &= \frac{2h}{45} [7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)] \\
 &\quad - \frac{8h^6}{945} f^{(6)}(\mu)
 \end{aligned}$$

Fórmulas abiertas de Newton-Cotes

- La misma idea con $x_0 = a+h$ y $x_n = b-h$



$$n=0: \quad I = 2hf(x_0) + \frac{h^3}{3}f''(\mu)$$

$$n=1: \quad I = \frac{3h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] + \frac{3h^3}{4}f''(\mu)$$

$$n=2: \quad I = \frac{4h}{3} [2f(x_0) - f(x_1) + 2f(x_2)] + \frac{14h^5}{45}f^{(4)}(\mu)$$

$$n=3: \quad I = \frac{5h}{24} [11f(x_0) + f(x_1) + f(x_2) + 11f(x_3)] + \frac{95h^5}{144}f^{(4)}(\mu)$$

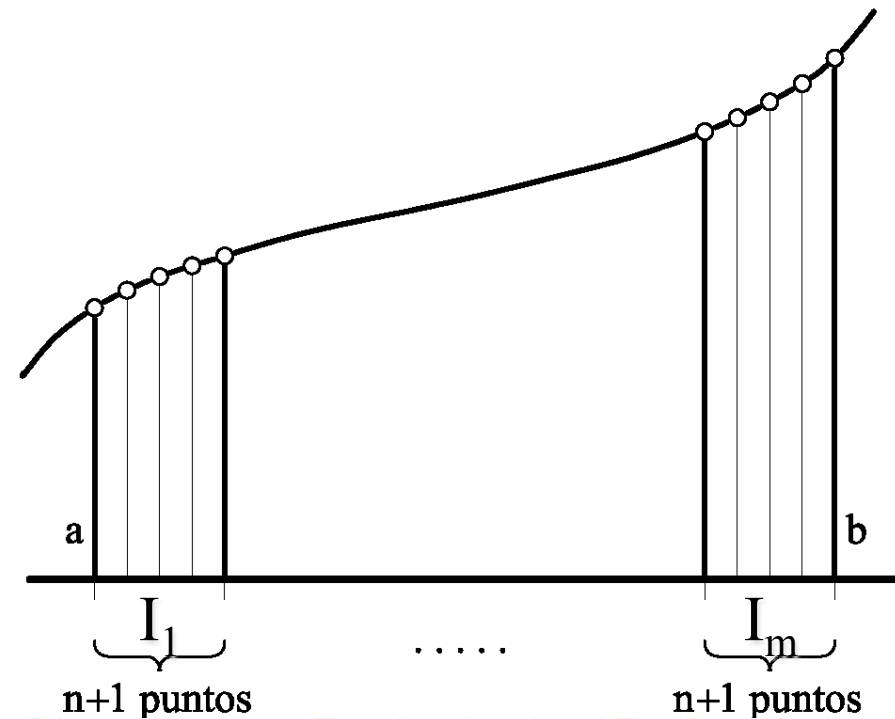
LlaçàN

Cuadraturas compuestas

- Se divide el intervalo $[a,b]$ en **m subintervalos**

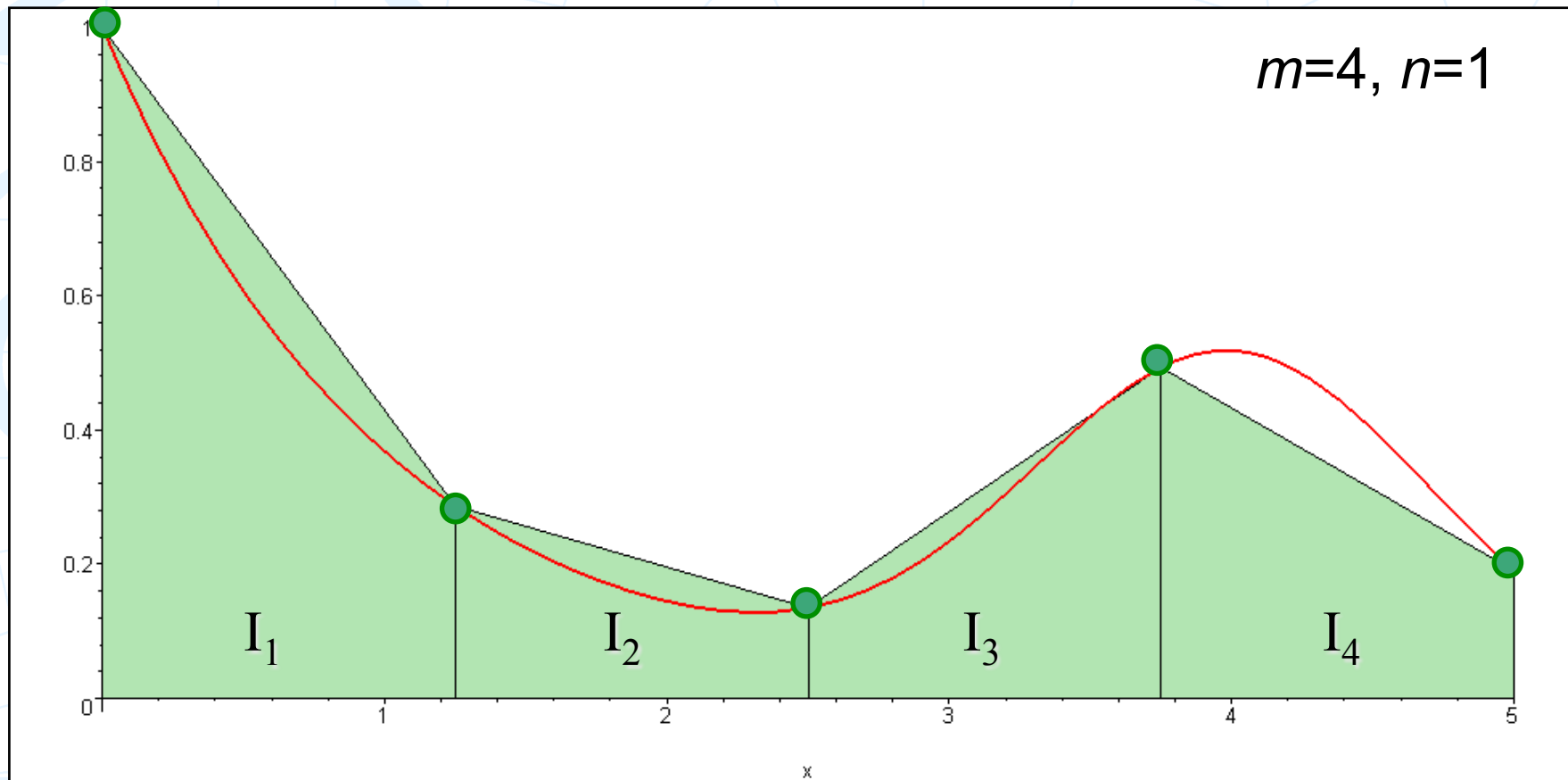
$$I = \int_a^b f(x) \, dx = \sum_{i=1}^m \int_{I_i} f(x) \, dx$$

y se aplica una cuadratura numérica (de Newton-Cotes, de Gauss, ...) con **$n+1$ puntos en cada subintervalo.**



Ejemplo: fórmula compuesta del trapecio

- En cada uno de los m subintervalos se utiliza la fórmula del trapecio ($n=1$).



- Es decir,

$$\begin{aligned} I = \int_a^b f(x) \, dx &= \sum_{i=1}^m \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) \, dx \\ &= \sum_{i=1}^m \left(\frac{h_i}{2} \left(f(x_{i-1}) + f(x_i) \right) - \frac{h_i^3}{12} f^{(2)}(\mu_i) \right) \\ &= \sum_{i=1}^m \frac{h_i}{2} \left(f(x_{i-1}) + f(x_i) \right) - \sum_{i=1}^m \frac{h_i^3}{12} f^{(2)}(\mu_i). \end{aligned}$$

con

$$h_i = x_i - x_{i-1}$$

- Si los puntos son **equiespaciados**, con distancia $h = (b - a)/m$ la fórmula se escribe como

$$I = \int_a^b f(x) \, dx = \frac{h}{2} \left(f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} f(x_i) + f(x_m) \right) + E_m^T$$

donde el error es

$$E_m^T = -\frac{h^3}{12} \sum_{i=1}^m f^{(2)}(\mu_i) = -m \frac{h^3}{12} f^{(2)}(\mu)$$

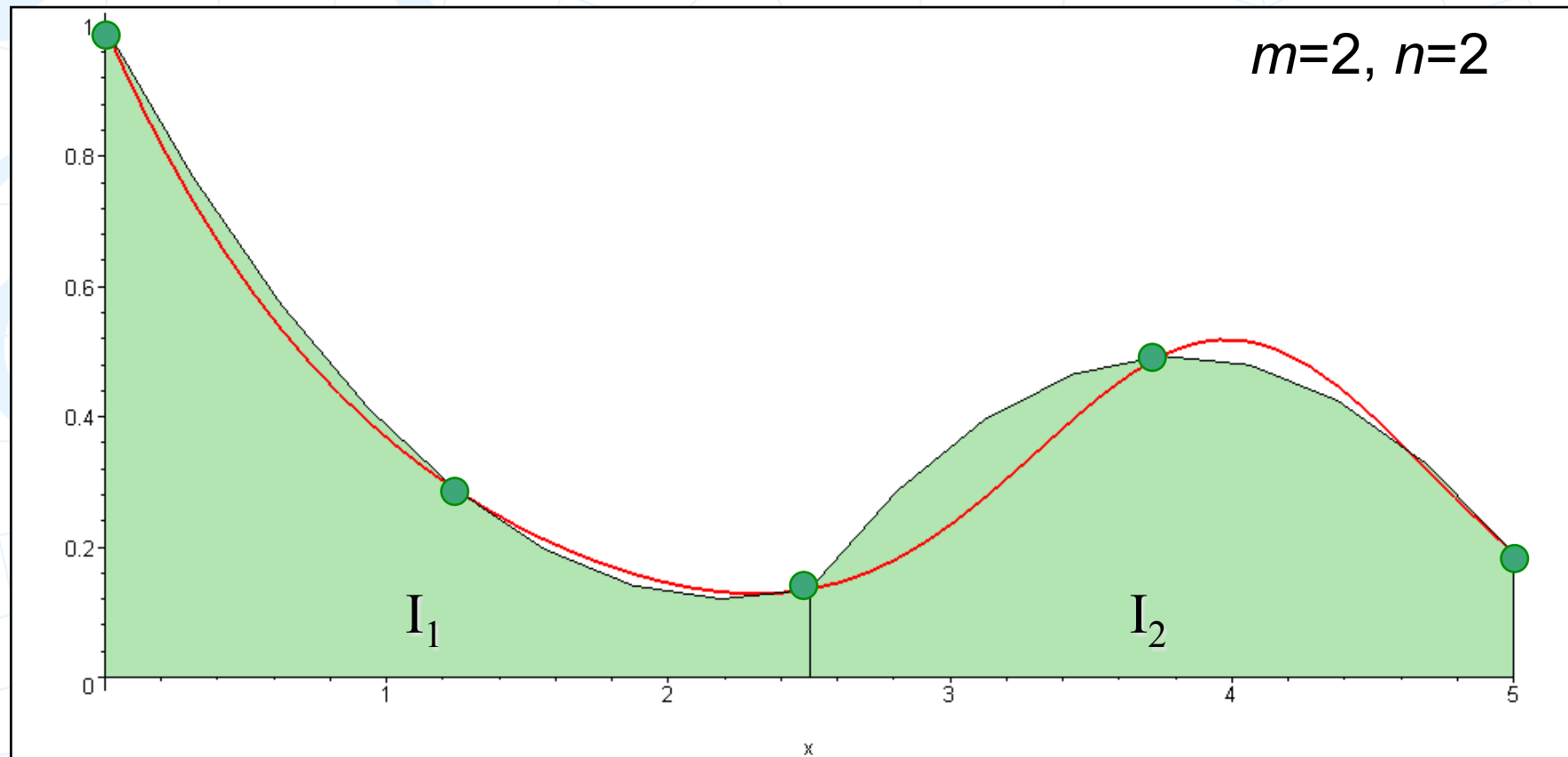
o, equivalentemente,

$$E_m^T = -\frac{(b - a)^3}{12m^2} f^{(2)}(\mu) \xrightarrow{m \rightarrow \infty} 0$$

(si $f^{(2)}$ está acotada)

Ejemplo: fórmula compuesta de Simpson

- En cada uno de los m subintervalos se utiliza la fórmula de Simpson ($n=2$).



- Es decir,

$$\begin{aligned}
 I &= \int_a^b f(x) \, dx = \sum_{i=1}^m \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x) \, dx \\
 &= \sum_{i=1}^m \left(\frac{h_i}{3} \left(f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i}) \right) - \frac{h_i^5}{90} f^{(4)}(\mu_i) \right)
 \end{aligned}$$

- Si los puntos son **equiespaciados**, con $h = (b - a)/2m$

$$I = \int_a^b f(x) \, dx = \frac{h}{3} \sum_{i=1}^m \left(f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i}) \right) + E_n^S$$

- El error es

$$E_m^S = -\frac{h^5}{90} \sum_{i=1}^m f^{(4)}(\mu_i) = -\frac{mh^5}{90} f^{(4)}(\mu)$$

o, equivalentemente,

$$E_m^S = -\frac{(b-a)^5}{2880m^4} f^{(4)}(\mu)$$

- Como en cualquier fórmula compuesta, el error tiende a cero cuando se aumenta el número de puntos:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} E_m^S = 0$$

(si $f^{(4)}$ está acotada)

Llaçan

Cuadraturas de Gauss

Cuadraturas de Gauss

- **Newton-Cotes:**
 - **Predetermined** (equally spaced) integration points $\{x_0, \dots, x_n\}$
 - **$n+1$ d.o.f (w_i) \rightarrow order n**
(Special case: for even $n \rightarrow$ order $n+1$)

- **Gauss quadrature:** we must ask
 - Can we chose the integration points $\{x_0, \dots, x_n\}$ to have a higher order?
 $2n+2$ d.o.f (w_i, x_i) \rightarrow order $2n+1$?
 - What order can be reached?

- Points $\{z_i\}_{i=0}^n$ and weights $\{w_i\}_{i=0}^n$ of the quadrature can be calculated by imposing the Gauss quadrature to verify

$$\int_a^b p(z) dz = \sum_{i=0}^n w_i p(z_i)$$

for $p = 1, p = x, p = x^2, \dots, p = x^{2n+1}$
 (nonlinear system with $2n+2$ unknowns and $2n+2$ equations)

- Quadrature has order $2n+1$

$$E_n = \Omega_n f^{(2n+2)}(\mu), \quad \mu \in (a, b)$$

Exercises:

1) Requiring exact integration for $p_0(x) = 1$, $p_1(x) = x$, find the weights and Gauss points of this quadrature:

[$n=0$, order 1]

$$\int_{-1}^1 f(z) dz \simeq \sum_{i=0}^n w_i f(z_i)$$

2) Requiring exact integration for

$$p_0(x) = 1, p_1(x) = x, p_2(x) = x^2, p_3(x) = x^3$$

find the weights and Gauss points of the above quadrature in this case. [$n=1$, order 3]

Cuadraturas de Gauss

- Consideramos integrales de la forma

$$I = \int_{z_a}^{z_b} \omega(z) f(z) dz$$

- más general
- $\omega(z)$ estrictamente positiva en $[a,b]$ (salvo en un conjunto de medida nula)
- Interpolación polinómica con $n+1$ puntos $\{z_0, \dots, z_n\}$

$$f(z) = p_n(z) + R_n(z) = \sum_{i=0}^n f(z_i) L_i(z) + R_n(z)$$

$L_i(z)$. polinomios de Lagrange

- Integrando se obtiene la cuadratura

$$I \simeq \sum_{i=0}^n w_i f(z_i) \quad w_i = \int_{z_a}^{z_b} \omega(z) L_i(z) dz$$

y el error

$$E_n = \frac{1}{(n+1)!} \int_{z_a}^{z_b} \omega(z) L(z) f^{(n+1)}(\xi(z)) dz$$

$$L(z) = (z - z_0)(z - z_1) \cdots (z - z_n)$$

▪ **Newton-Cotes:**

- Puntos de integración $\{z_0, \dots, z_n\}$ arbitrarios (equiespaciados)
- Se calculan los pesos w_i para que la cuadratura sea de orden n (generalmente): $n+1$ condiciones para $n+1$ parámetros
- Caso especial: para n par \rightarrow orden $n+1$

▪ **Cuadraturas de Gauss:** nos preguntamos

- ¿podemos elegir los puntos de integración $\{z_0, \dots, z_n\}$ para tener mayor orden?
- ¿qué orden se puede alcanzar?

Se eligen los puntos de integración para que se integren exactamente polinomios de grado $\leq 2n+1$

Obtención de la cuadratura

- Consideramos un polinomio de grado $2n+1$

$$f = q_{2n+1} \in \mathcal{P}^{2n+1}$$

- En este caso,

$$q_{2n+1} = p_n + R_n \quad \longrightarrow \quad R_n \in \mathcal{P}^{2n+1}$$

y el residuo de Lagrange se expresa como

$$R_n(z) = L(z) \frac{f^{(n+1)}(\xi(z))}{(n+1)!} = L(z)q_n(z)$$

con $q_n \in \mathcal{P}^n$

$R_n \in \mathcal{P}^{2n+1}, \quad L \in \mathcal{P}^{n+1}$

- Es decir, el error se escribe como

$$E_n = \int_{z_a}^{z_b} \omega(z) L(z) q_n(z) dz$$

- Considerando el producto escalar

$$\langle u, v \rangle = \int_{z_a}^{z_b} \omega(z) u(z) v(z) dz$$

el error de integración para $f = q_{2n+1} \in \mathcal{P}^{2n+1}$ se expresa como

$$E_n = \langle L, q_n \rangle$$

Familia de polinomios ortogonales

- Se considera una familia de polinomios

$$\{Q_0(z), Q_1(z), \dots, Q_k(z), \dots\}$$

tal que

$$(1) \quad Q_k \in \mathcal{P}^k$$

$$(2) \quad \langle Q_i, Q_j \rangle = 0 \quad \text{para } i \neq j \quad (\text{ortogonales})$$

- Propiedades:

- Q_k tiene k raíces simples reales en $]z_a, z_b[$
- ortogonalidad

$$\langle Q_{n+1}, q_n \rangle = 0 \quad \forall q_n \in \mathcal{P}^n$$

- Por lo tanto, si

$$L(z) = (z - z_0)(z - z_1) \cdots (z - z_n) = CQ_{n+1}(z)$$

entonces el error de integración para $f \in \mathcal{P}^{2n+1}$ es

$$E_n = \langle L, q_n \rangle = 0$$

tal como queríamos.

Los puntos de integración de la cuadratura de Gauss son los ceros del polinomio Q_{n+1}

- Producto escalar

$$\langle u, v \rangle = \int_{z_a}^{z_b} \omega(z) u(z) v(z) dz$$

- Polinomios ortogonales (generalmente familias de polinomios ortogonales conocidas): Q_{n+1} tal que

$$\langle Q_{n+1}, q_n \rangle = 0 \quad \forall q_n \in \mathcal{P}^n$$

- Puntos de integración: $\{z_0, z_1, \dots, z_n\}$ ceros de Q_{n+1}

- Pesos de integración:

$$w_i = \int_{z_a}^{z_b} \omega(z) L_i(z) dz$$

Observaciones

- La cuadratura es de **orden $2n+1$**

$$E_n = \Omega_n f^{(2n+2)}(\mu), \quad \mu \in (z_a, z_b)$$

- Los puntos $\{z_i\}_{i=0}^n$ y los pesos $\{w_i\}_{i=0}^n$ de la cuadratura también se pueden calcular imponiendo que la cuadratura de Gauss es exacta

$$\int_{z_a}^{z_b} \omega(z)p(z) dz = \sum_{i=0}^n w_i p(z_i)$$

para $p = 1, p = x, p = x^2, \dots, p = x^{2n+1}$

(sistema **no lineal** con $2n+2$ incógnitas y $2n+2$ ecuaciones)

- También se pueden deducir utilizando interpolación de Hermite con $n+1$ puntos $\{z_0, \dots, z_n\}$

$$f(z) \simeq p_{2n+1}(z) = \sum_{i=0}^n f(z_i)h_i(z) + \sum_{i=0}^n f'(z_i)\hat{h}_i(z)$$

- Los puntos $\{z_0, \dots, z_n\}$ se eligen para que

$$\int_{z_a}^{z_b} \omega(z)\hat{h}_i(z) dz = 0 \quad (i=0, \dots, n)$$

- Aproximación

$$\int_{z_a}^{z_b} \omega(z)f(z) dz \simeq \sum_{i=0}^n f(z_i) \underbrace{\int_{z_a}^{z_b} \omega(z)h_i(z) dz}_{W_i}$$

$$E_n = \int_{z_a}^{z_b} \omega(z) \prod_{i=0}^n (z - z_i)^2 \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n)!} dz$$

Cuadraturas de
Gauss-Legendre:

$$I = \int_{-1}^1 f(z) dz$$

$$z_a = -1, z_b = 1, \omega(z) = 1$$

Cuadraturas de
Gauss-Laguerre:

$$I = \int_0^{\infty} e^{-z} f(z) dz$$

$$z_a = 0, z_b = \infty, \omega(z) = e^{-z}$$

Cuadraturas de Gauss-Hermite:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} f(z) dz$$

$$z_a = -\infty, z_b = \infty, \omega(z) = e^{-z^2}$$

Cuadraturas de Gauss-Chebyshev:

$$I = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} f(z) dz$$

$$z_a = -1, z_b = 1, \omega(z) = \frac{1}{\sqrt{1-z^2}}$$

Los puntos y los pesos están tabulados

Gauss-Legendre

$$\int_{-1}^1 f(z) dz \simeq \sum_{i=0}^n w_i f(z_i)$$

- $n=0$
(orden 1)

$$\begin{aligned} z_0 &= 0 \\ w_0 &= 2 \end{aligned}$$

- $n=1$
(orden 3)

$$\begin{aligned} z_0 &= -\sqrt{3}/3, & z_1 &= \sqrt{3}/3 \\ w_0 &= 1, & w_1 &= 1 \end{aligned}$$

- $n=2$
(orden 5)

$$\begin{aligned} z_0 &= -\sqrt{15}/5, & z_1 &= 0, & z_2 &= \sqrt{15}/5 \\ w_0 &= 5/9, & w_1 &= 8/9, & w_2 &= 5/9 \end{aligned}$$

Cuadratura de Gauss-Legendre

$$\int_{-1}^{+1} f(z)dz \approx \sum_{i=0}^{i=n} \omega_i f(z_i) \quad \int_a^b F(x)dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^{i=n} \omega_i F\left(\frac{(b-a)z_i + (b+a)}{2}\right)$$

<i>n</i>	<i>i</i>	<i>z_i</i>	<i>ω_i</i>
0	0	0.000000000000000E+00	0.200000000000000E+01
1	0	-0.57735026918963E+00	0.100000000000000E+01
	1	0.57735026918963E+00	0.100000000000000E+01
2	0	-0.77459666924148E+00	0.555555555555556E+00
	1	0.000000000000000E+00	0.888888888888889E+00
	2	0.77459666924148E+00	0.555555555555556E+00
3	0	-0.86113631159405E+00	0.34785484513745E+00
	1	-0.33998104358486E+00	0.65214515486255E+00
	2	0.33998104358486E+00	0.65214515486255E+00
	3	0.86113631159405E+00	0.34785484513745E+00
4	0	-0.90617984593866E+00	0.23692688505619E+00
	1	-0.53846931010568E+00	0.47862867049937E+00
	2	0.000000000000000E+00	0.568888888888889E+00
	3	0.53846931010568E+00	0.47862867049937E+00
	4	0.90617984593866E+00	0.23692688505619E+00
5	0	-0.93246951420315E+00	0.17132449237917E+00
	1	-0.66120938646626E+00	0.36076157304814E+00
	2	-0.23861918608320E+00	0.46791393457269E+00
	3	0.23861918608320E+00	0.46791393457269E+00
	4	0.66120938646626E+00	0.36076157304814E+00
	5	0.93246951420315E+00	0.17132449237917E+00



LaCàN

6	0	-0.94910791234276E+00	0.12948496616887E+00
	1	-0.74153118559939E+00	0.27970539148928E+00
	2	-0.40584515137740E+00	0.38183005050512E+00
	3	0.00000000000000E+00	0.41795918367347E+00
	4	0.40584515137740E+00	0.38183005050512E+00
	5	0.74153118559939E+00	0.27970539148928E+00
	6	0.94910791234276E+00	0.12948496616887E+00
7	0	-0.96028985649754E+00	0.10122853629038E+00
	1	-0.79666647741363E+00	0.22238103445337E+00
	2	-0.52553240991633E+00	0.31370664587789E+00
	3	-0.18343464249565E+00	0.36268378337836E+00
	4	0.18343464249565E+00	0.36268378337836E+00
	5	0.52553240991633E+00	0.31370664587789E+00
	6	0.79666647741363E+00	0.22238103445337E+00
	7	0.96028985649754E+00	0.10122853629038E+00
9	0	-0.97390652851717E+00	0.66671344308688E-01
	1	-0.86506336668898E+00	0.14945134915058E+00
	2	-0.67940956829902E+00	0.21908636251598E+00
	3	-0.43339539412925E+00	0.26926671931000E+00
	4	-0.14887433898163E+00	0.29552422471475E+00
	5	0.14887433898163E+00	0.29552422471475E+00
	6	0.43339539412925E+00	0.26926671931000E+00
	7	0.67940956829902E+00	0.21908636251598E+00
	8	0.86506336668898E+00	0.14945134915058E+00
	9	0.97390652851717E+00	0.66671344308688E-01
11	0	-0.98156063424672E+00	0.47175336386511E-01
	1	-0.90411725637047E+00	0.10693932599532E+00
	2	-0.76990267419431E+00	0.16007832854335E+00
	3	-0.58731795428662E+00	0.20316742672307E+00
	4	-0.36783149899818E+00	0.23349253653835E+00
	5	-0.12523340851147E+00	0.24914704581340E+00
	6	0.12523340851147E+00	0.24914704581340E+00
	7	0.36783149899818E+00	0.23349253653835E+00
	8	0.58731795428662E+00	0.20316742672307E+00
	9	0.76990267419431E+00	0.16007832854335E+00
	10	0.90411725637047E+00	0.10693932599532E+00
	11	0.98156063424672E+00	0.47175336386511E-01

Ejemplo de aplicación: Gauss-Legendre

$$I = \int_a^b F(x) dx$$

- Con el cambio de variable de $[-1, 1]$ a $[a, b]$

$$x = \frac{b-a}{2}z + \frac{a+b}{2}, \quad dx = \frac{b-a}{2}dz$$

se escribe la integral como

$$I = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 F\left(\frac{b-a}{2}z + \frac{a+b}{2}\right) dz = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f(z) dz$$

$$f(z) := F\left(\frac{b-a}{2}z + \frac{a+b}{2}\right)$$

- Aplicando la cuadratura de Gauss-Legendre

$$I \simeq \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^n w_i f(z_i)$$

o, utilizando la definición de $f(z)$,

$$I = \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^n w_i F\left(\frac{b-a}{2}z_i + \frac{a+b}{2}\right) + E_n$$

- El error es

$$E_n = \left(\frac{b-a}{2}\right)^{2n+3} \Omega_n F^{(2n+2)}(\mu)$$

Gauss-Hermite

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} f(z) dz \simeq \sum_{i=0}^n w_i f(z_i)$$

- $n=0$
(orden 1)

$$z_0 = 0$$

$$w_0 = \sqrt{\pi}$$

- $n=1$
(orden 3)

$$z_0 = -\sqrt{2}/2, \quad z_1 = \sqrt{2}/2$$

$$w_0 = \sqrt{\pi}/2, \quad w_1 = \sqrt{\pi}/2$$

- $n=2$
(orden 5)

$$z_0 = -\sqrt{6}/2, \quad z_1 = 0, \quad z_2 = \sqrt{6}/2$$

$$w_0 = \sqrt{\pi}/6, \quad w_1 = 2\sqrt{\pi}/3, \quad w_2 = \sqrt{\pi}/6$$

Gauss-Laguerre

$$\int_0^{\infty} e^{-z} f(z) dz \simeq \sum_{i=0}^n w_i f(z_i)$$

- $n=0$
(orden 1)

$$z_0 = 1$$

$$w_0 = 1$$

- $n=1$
(orden 3)

$$z_0 = 2 - \sqrt{2}, \quad z_1 = 2 + \sqrt{2}$$

$$w_0 = 1/2 + \sqrt{2}/4, \quad w_1 = 1/2 - \sqrt{2}/4$$

- $n=2$ (orden 5)

$$z_0 = 0,4157745575, \quad z_1 = 2,294280360, \quad z_2 = 6,289945083$$

$$w_0 = 0,7110930099, \quad w_1 = 0,27851773362, \quad w_2 = 0,01038925651$$

Gauss-Chebyshev

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} f(z) dz \simeq \sum_{i=0}^n w_i f(z_i)$$

- $n=0$
(orden 1)

$$z_0 = 0$$

$$w_0 = \pi$$

- $n=1$
(orden 3)

$$z_0 = -\sqrt{2}/2, \quad z_1 = \sqrt{2}/2$$

$$w_0 = \pi/2, \quad w_1 = \pi/2$$

- $n=2$ (orden 5)

$$z_0 = -\sqrt{3}/2, \quad z_1 = 0, \quad z_2 = \sqrt{3}/2$$

$$w_0 = \pi/3, \quad w_1 = \pi/3, \quad w_2 = \pi/3$$

Ejemplo de aplicación: Gauss-Laguerre

$$I = \int_a^{\infty} F(x) dx$$

- Aplicando el cambio $x = z + a$, $dx = dz$

$$I = \int_0^{\infty} e^{-z} \underbrace{[e^z F(z + a)]}_{f(z)} dz = \int_0^{\infty} e^{-z} f(z) dz$$

- Aplicando la cuadratura

$$I \simeq \sum_{i=0}^n w_i f(z_i) = \sum_{i=0}^n w_i e^{z_i} F(z_i + a)$$

Llaçan

Cuadraturas mixtas

Cuadraturas de Lobatto

$$I = \int_{-1}^1 f(z) dz \simeq \sum_{i=0}^n w_i f(z_i)$$

- 2 puntos de integración prefijados: $z_0 = -1, z_n = 1$
- El resto de puntos de integración $\{z_1, z_2, \dots, z_{n-1}\}$ se eligen para que la cuadratura sea de **orden $2n-1$**
- Pesos de integración:

$$w_i = \int_{-1}^1 L_i(z) dz$$

- El error es

$$\begin{aligned}
 E_n &= \frac{1}{(n+1)!} \int_{-1}^1 (z+1)(z-1) \prod_{i=1}^{n-1} (z-z_i) f^{(n+1)}(\xi) dz \\
 &= \frac{1}{(n+1)!} \int_{-1}^1 (z^2-1) \widehat{L}(z) f^{(n+1)}(\xi) dz
 \end{aligned}$$

con $\widehat{L}(z) = (z-z_1)(z-z_2)\cdots(z-z_{n-1}) \in \mathcal{P}^{n-1}$

- Si $f = q_{2n-1} \in \mathcal{P}^{2n-1} \Rightarrow f^{(n+1)} = q_{n-2} \in \mathcal{P}^{n-2}$

$$E_n = \frac{1}{(n+1)!} \int_{-1}^1 (z^2-1) \widehat{L}(z) q_{n-2}(z) dz$$

- Se considera el producto escalar

$$\langle u, v \rangle = \int_{-1}^1 (1 - z^2) u(z)v(z) dz$$

- Para $f = q_{2n-1} \in \mathcal{P}^{2n-1}$ el error es

$$E_n = \frac{1}{(n+1)!} \int_{-1}^1 (z^2 - 1) \hat{L}(z) q_{n-2}(z) dz = - \langle \hat{L}, q_{n-2} \rangle$$

- Considerando $\hat{L} = (z - z_1) \cdots (z - z_{n-1}) = C Q_{n-1}$ ($\{z_1, z_2, \dots, z_{n-1}\}$ son los ceros del polinomio de grado $n-1$ de la familia de polinomios ortogonales con $\langle \cdot, \cdot \rangle$) se consigue $E_n = 0$ para $f = q_{2n-1} \in \mathcal{P}^{2n-1}$ (orden $2n-1$)

Resumen cuadraturas de Lobatto

- Producto escalar

$$\langle u, v \rangle = \int_{-1}^1 (1 - z^2) u(z)v(z) dz$$

- Polinomios ortogonales: Q_{n-1} tal que

$$\langle Q_{n-1}, q_{n-2} \rangle = 0 \quad \forall q_{n-2} \in \mathcal{P}^{n-2}$$

- Puntos de integración: $z_0 = -1$, $z_n = 1$ y $\{z_1, z_2, \dots, z_{n-1}\}$ son los ceros del polinomio Q_{n-1}

- Pesos de integración: $w_i = \int_{-1}^1 L_i(z) dz$

- Orden $2n-1$

Lobatto

$$\int_{-1}^1 f(z) dz \simeq \sum_{i=0}^n w_i f(z_i)$$

- $n=2$
 (orden 3)

$$z_0 = -1, z_1 = 0, z_2 = 1$$

$$w_0 = 1/3, w_1 = 4/3, w_2 = 1/3$$

- $n=3$
 (orden 5)

$$z_0 = -1, z_1 = -\sqrt{5}/5, z_2 = \sqrt{5}/5, z_3 = 1$$

$$w_0 = 1/6, w_1 = 5/6, w_2 = 5/6, w_3 = 1/6$$

Cuadraturas de Radau

- Producto escalar

$$\langle u, v \rangle = \int_{-1}^1 (z + 1) u(z)v(z) dz$$

- Polinomios ortogonales: Q_n tal que

$$\langle Q_n, q_{n-1} \rangle = 0 \quad \forall q_{n-1} \in \mathcal{P}^{n-1}$$

- Puntos de integración: $z_0 = -1$ y $\{z_1, z_2, \dots, z_{n-1}, z_n\}$ son los ceros del polinomio Q_n

- Pesos de integración: $w_i = \int_{-1}^1 L_i(z) dz$

- Orden $2n$

Radau

$$\int_{-1}^1 f(z) dz \simeq \sum_{i=0}^n w_i f(z_i)$$

- $n=1$
(orden 2)

$$z_0 = -1, z_1 = 1/3$$
$$w_0 = 1/2, w_1 = 3/2$$

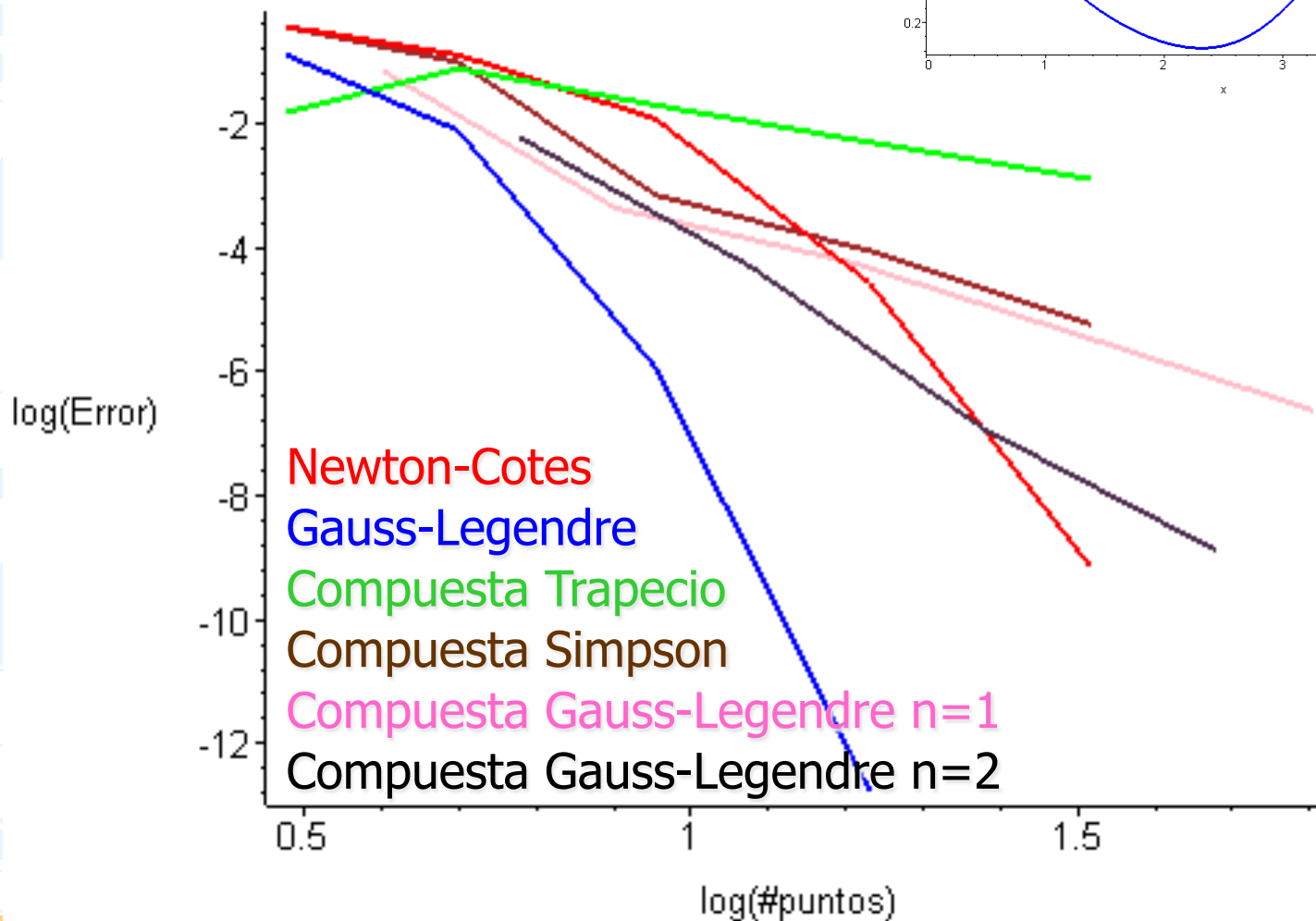
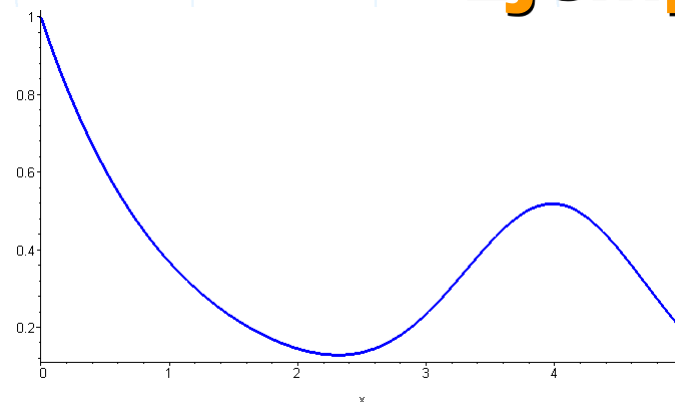
- $n=2$ (orden 4)

$$z_0 = -1, z_1 = (1 - \sqrt{6})/5, z_2 = (1 + \sqrt{6})/5$$
$$w_0 = 2/9, w_1 = -\frac{5\sqrt{6}(-2 + 3\sqrt{6})}{18(-6 + \sqrt{6})}, w_2 = \frac{5\sqrt{6}(2 + 3\sqrt{6})}{18(6 + \sqrt{6})}$$

Convergencia

Ejemplo

$$I = \int_0^5 \left[e^{-x} + \frac{1}{2} e^{-(x-4)^2} \right] dx$$



- Newton-Cotes:

$$E_n = C_n h^{n+2} f^{(n+1)}(\mu) \quad n \text{ impar}$$

$$E_n = C_n h^{n+3} f^{(n+2)}(\mu) \quad n \text{ par}$$

- Gauss-Legendre:

$$E_n = \Omega_n f^{(2n+2)}(\mu)$$

- Compuesta del trapecio:

$$E_m = -\frac{(b-a)^3}{12m^2} f''(\mu)$$

- Compuesta de Simpson:

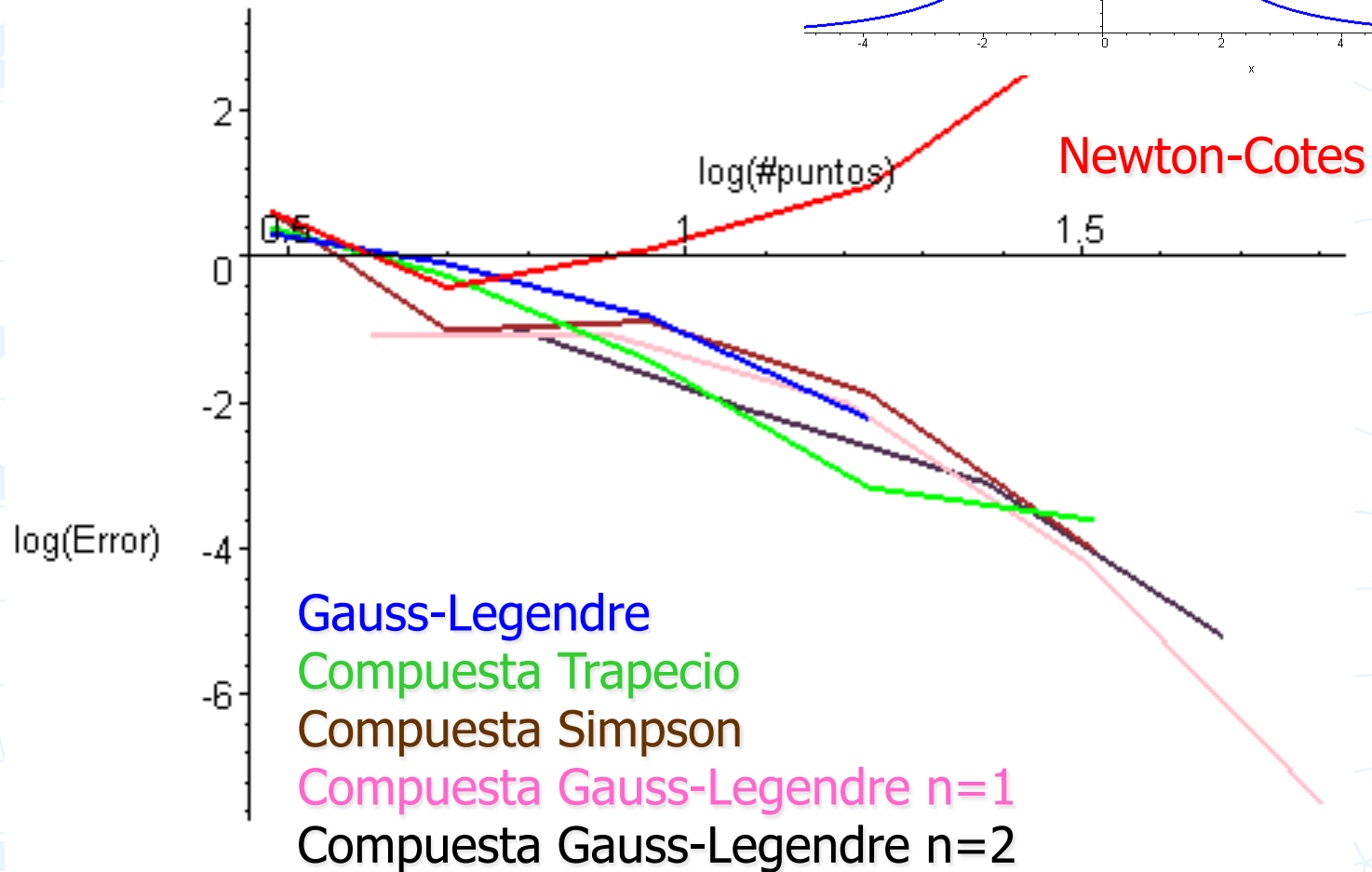
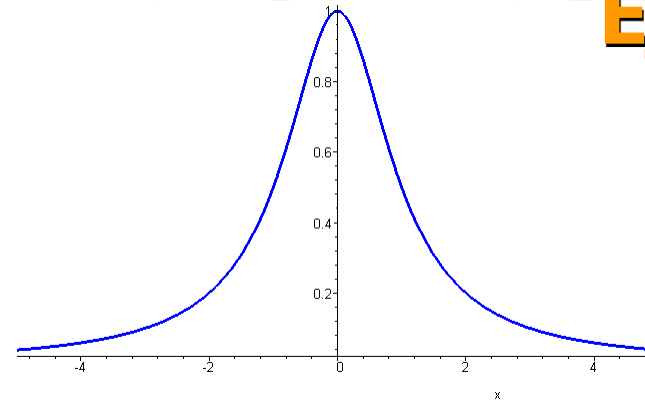
$$E_m = -\frac{(b-a)^5}{2880m^4} f^{(4)}(\mu)$$

- Compuesta de Gauss-Legendre:

$$E_{m,n} = \left(\frac{b-a}{2}\right)^{2n+3} \frac{\Omega_n}{m^{2n+2}} f^{(2n+2)}(\mu)$$

Ejemplo

$$I = \int_{-5}^5 \frac{1}{1+x^2} dx$$



Convergencia

- **NO** tiene asegurada la convergencia:
 - Fórmulas simples de **Newton-Cotes** para puntos equiespaciados (aumentando n)
- **SI** tiene convergencia asegurada:
 - Cuadraturas simples de **Gauss** (aumentando n)
 - **Cuadraturas compuestas** (aumentando m)

Double integration

Consider the double integral

$$\int_c^d \int_a^b f(x, y) dx dy$$

The integration domain is represented by a set of points (grid) having coordinates $(x_{i,j}, y_{i,j})$ where $0 \leq i \leq n$ and $0 \leq j \leq m$.

Numerical double integration can be applied by analogy with analytical double integration, i.e. first integrate with respect to x , then integrate with respect to y .

Exercise: Compute the double integral

$$\int_0^1 \int_0^1 (x^3 + 1)y^3 dx dy$$

using the optimum number of Gauss points in order to obtain the exact result.



FIN

Laboratori de Càlcul Numèric (LaCàN)
Departament de Matemàtica Aplicada III
Universitat Politècnica de Catalunya (Barcelona)
<http://www-lacan.upc.es>

Interpolación de Lagrange

$$f(x) = p_n(x) + R_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i)L_i(x) + R_n(x)$$

- Polinomios de Lagrange

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad i = 0, \dots, n.$$

- Residuo de Lagrange

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\mu)}{(n+1)!} L(x) \quad \mu \in [a, b] \quad L(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j)$$

Interpolación de Hermite

$$f(x) \simeq p_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i)h_i(x) + \sum_{i=0}^n f'(x_i)\hat{h}_i(x)$$

- Polinomios de Hermite $h_i, \hat{h}_i \in \mathcal{P}^{2n+1}, \quad (i = 0, \dots, n)$

$$h_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad h'_i(x_j) = 0, \quad (j = 0, \dots, n)$$

$$\hat{h}_i(x_j) = 0, \quad \hat{h}'_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad (j = 0, \dots, n)$$

- Residuo

$$R_n = (x - x_0)^2(x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2 \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n)!}$$

$$I = \int_{-5}^5 \frac{1}{1+x^2} dx$$

