TEMA IV

INTEGRACIÓN Y DERIVACIÓN NUMÉRICA

4.1. Planteamiento del problema de la integración numérica.

4.1.1. Sobre la integración numérica.

- En la práctica, se hace necesario evaluar numéricamente la expresión

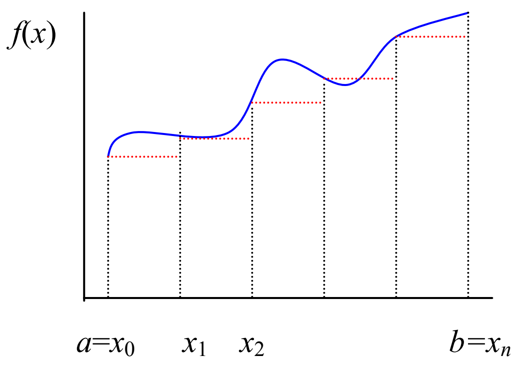
$$I = \int_a^b f(x)dx$$

en aquellos casos en que:

  - Conocida analíticamente $f(x)$, es imposible calcular su primitiva $F(x)$, tal que $F'(x)=f(x)$.
  - $f(x)$ no es conocida analíticamente y sólo se poseen sus valores $f(x_j)$ en n+1 puntos, $\{x_j\}_{j=0,\ldots,n}$

- Basándose en el concepto de integral de Riemann, aparecen las fórmulas más sencillas de aproximación a una integral, que son las denominadas sumas de Riemann. Existen fórmulas de suma por la izquierda, por la derecha y centrales. Recordemos con la figura, las sumas por la izquierda: En estas, el valor de la integral viene sustituido por la suma de las áreas de n rectángulos de altura $f(x_i)$, i=0,1,...,$n-1$, y de base $(x_{i+1} - x_i)$.

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)(x_{i+1} - x_i)$$



De igual forma podíamos haber obtenido la suma por la derecha o una suma central, pues ello depende únicamente de los valores $f(x_i)$ que se utilicen. No vamos a extendernos más sobre las sumas de Riemann pues en todas ellas el error es considerable y sólo pueden servirnos para obtener los extremos que delimitan el intervalo dentro del cual se encuentra el valor buscado. Sobre este error, cabe decir que, si $(x_{i+1} - x_i)$ es pequeño, el error de integración será menor, pero al disminuir $(x_{i+1} - x_i)$, aumentamos considerablemente el número de operaciones y al mismo tiempo lo hará el error debido al redondeo. Por esto, en la práctica, se utilizan las fórmulas de integración basadas en la teoría de interpolación, mediante las que se obtienen mejores resultados sin necesidad de aumentar el número de operaciones.

4.1.2. Planteamiento general mediante el uso de funciones de interpolación.

Recordemos la estrategia de la interpolación: Dada una función $f(x)$, la teoría de interpolación nos permite aproximarla mediante otra función $g(x)$, de forma que

$$f(x) = g(x) + R(x)$$

siendo $R(x)$ el error de la interpolación.

Utilizando la interpolación de Lagrange, la función $g(x)$ es un polinomio de grado n al que llamamos $L_n(x)$

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x) \text{ con } l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

cumpliendo los polinomios $l_i(x)$ de Lagrange la condición $l_i(x_j) = \delta_{ij}$.

Aunque en este curso básico, sólo vamos a utilizar polinomios como funciones interpolantes, podemos hacer uso de cualquier otro conjunto de funciones, siempre que cumplan con la condición de la delta de Kronecker. Así, utilizando funciones $\delta_i(x)$ tales que $\delta_i(x_j) = \delta_{ij}$, podemos expresar la función $f(x)$ de la forma:

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\delta_i(x) + R(x)$$

Con idéntica estrategia a como hemos aproximado el valor de la función $f(x)$ podemos plantear la aproximación de

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

o incluso, generalizando el problema, planteándonos el cálculo de

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

donde $p(x)$ es una función peso cuya introducción obedece fundamentalmente a dos razones:

a) La necesidad de evaluar frecuentemente coeficientes de los términos de desarrollo en serie con polinomios ortogonales.
b) La frecuencia con que algunas funciones aparecen en determinados tipos de integrales.

Con los anteriores supuestos, la evaluación de

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

con $f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\delta_i(x) + R(x)$ queda

$$I = \int_a^b \left[p(x)\left\{ \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\delta_i(x) \right\} + p(x)R(x) \right] dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b p(x)\delta_i(x)dx + \int_a^b p(x)R(x)dx \Rightarrow$$

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

$$\text{con} \quad A_i = \int_a^b p(x)\delta_i(x)dx, \text{ y } r = \int_a^b p(x)R(x)dx.$$

De esta forma hemos cambiado el problema de evaluación de una integral por el del cálculo de unos coeficientes A_i, para los que también tenemos que realizar una integral, pero ahora las funciones del integrando son sencillas.

Utilizando el polinomio de interpolación de Lagrange, $\delta_i(x) \equiv l_i(x)$, los coeficientes toman la forma

$$A_i = \int_a^b p(x)l_i(x)dx$$

Si $f(x)$ es un polinomio de grado n o inferior, podemos reproducirlo exactamente mediante $L_n(x)$; es decir, $L_n(x)$ es idéntico en este caso a $f(x) \Rightarrow R(x)=0$ y el resto procedente de la evaluación de la integral, r, también será nulo. Así, si integramos un polinomio de grado inferior a n, el resultado obtenido es exacto.

El error de la integración viene determinado por

$$r = \int_a^b p(x)R(x)dx$$

siendo $R(x)$ el error de la interpolación, que para el caso de la interpolación de Lagrange toma la forma:

$$R(x) = \frac{w_{n+1}(x) f^{n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

que puede ser evaluado si la función $f(x)$ es $(n+1)$ veces derivable. Sustituyendo en r:

$$r = \int_a^b p(x) \frac{w_{n+1}(x) f^{n+1)}(\xi)}{(n+1)!} dx$$

- Antes de pasar al desarrollo de las distintas fórmulas de integración conviene puntualizar que:
    - Las fórmulas de cálculo de integrales simples son llamadas fórmulas de cuadratura y, las de integrales dobles, fórmulas de cubatura.
    - Se distingue entre fórmulas cerradas y abiertas. Son cerradas aquellas en que los puntos extremos del intervalo de integración $[a, b]$ pertenecen al conjunto de puntos de interpolación. En caso contrario son abiertas.

4.2. Fórmulas simples de cuadratura de Newton-Cotes

Estas fórmulas se obtienen por la particularización de todo lo dicho anteriormente para el caso en que:

a) El conjunto de puntos $\{x_j\}_{j=0,\ldots,n}$ esté equiespaciado.
b) La función peso sea la unidad, $p(x) = 1$.
c) Utilizamos polinomios de Lagrange.

Recordando que para evaluar la integral

$$I = \int_{a=x_0}^{b=x_n} f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + r$$

debemos evaluar los coeficientes

$$A_i = \int_{a=x_0}^{b=x_n} l_i(x)dx$$

y por tanto tenemos que hacer la integral:

$$A_i = \int_{x_0}^{x_n} \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j} dx = \int_{x_0}^{x_n} \frac{\prod\limits_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} x-x_j}{\prod\limits_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} x_i-x_j} dx$$

Hacemos un cambio de variable, utilizando la hipótesis de que los puntos x_j están equiespaciados; es decir $h=x_{i+1}-x_i$, $\forall i$ del conjunto $\{i\}_{i=0,\ldots,n}$. Este cambio de variable es:

$$\left.\begin{matrix} x_j = x_0 + j\,h \\ x = x_0 + t\,h \end{matrix}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{matrix} x_i - x_j = (i-j)h \\ x - x_j = (t-j)h \end{matrix}\right\} \text{ y } dx = hdt$$

Con el cambio de variable, los límites de integración también se transforman:

$$\begin{cases} \text{Si } x = x_0 \Rightarrow t = 0 \\ \text{Si } x = x_n \Rightarrow t = n \end{cases}$$

Llevando el cambio a la expresión del coeficiente A_i, obtenemos

$$A_i = \int_0^n \frac{\prod\limits_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n}(t-j)}{\prod\limits_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n}(i-j)} hdt = \int_0^n \frac{\prod\limits_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n}(t-j)}{\underbrace{i(i-1)(i-2)\cdots\underbrace{(i-(i-1))}_{\Downarrow \atop 1}}_{i \text{ factores positivos}}\underbrace{\underbrace{(i-(i+1))}_{\Downarrow \atop -1}\cdots(i-n)}_{n-i \text{ factores negativos}}} hdt \Rightarrow$$

$$A_i = \frac{(-1)^{n-i} h}{i!(n-i)!} \int_0^n dt \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (t-j)$$

Los coeficientes anteriores tienen el pequeño inconveniente de depender del caso particular de integración que se está realizando, ya que en ellos aparece la longitud h del intervalo entre abscisas sucesivas. Para solucionar esto y obtener unos coeficientes totalmente generales, que sean independientes del caso particular de integración que se esté llevando a cabo, se definen los denominados coeficientes de Cotes H_i, relacionados con A_i por

$$A_i = (b-a)\, H_i = nhH_i$$

De esta forma resumiendo lo anterior:

$$\boxed{I = \int_a^b f(x)dx = (b-a)\sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i) + r}$$

$$\boxed{\text{con } H_i = \frac{1}{n}\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!}\int_0^n dt \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (t-j)}$$

habiéndose convertido el cálculo de la integral en una suma de coeficientes H_i, cuyos valores se encuentran tabulados, multiplicados por los valores de la función del integrando. Nos falta calcular los valores de los coeficientes de Cotes H_i y estimar el error de la integración.

4.2.1. Cálculo de los coeficientes de Cotes (H_i).

Con $n = 1$

$$H_0 = \frac{1}{1}\frac{(-1)^1}{0!1!}\int_0^1 \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq 0}}^{1} (t-j)dt = -\int_0^1 (t-1)dt = -\left[\frac{t^2}{2} - t\right]_0^1 = \frac{1}{2}$$

$$H_1 = \frac{1}{1}\frac{(-1)^0}{1!0!}\int_0^1 \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq 1}}^{1} (t-j)dt = \int_0^1 t\,dt = \left[\frac{t^2}{2}\right]_0^1 = \frac{1}{2}$$

Con $n = 2$

$$H_0 = \frac{1}{2}\frac{(-1)^2}{0!2!}\int_0^2 \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq 0}}^{2} (t-j)dt = \frac{1}{4}\int_0^2 (t-1)(t-2)dt = \frac{1}{4}\int_0^2 (t^2-3t+2)dt =$$

$$= \frac{1}{4}\left[\frac{t^3}{3} - \frac{3t^2}{2} + 2t\right]_0^2 = \frac{1}{4}\left[\frac{2^3}{3} - \frac{3\cdot 2^2}{2} + 2^2\right] = \frac{2}{3} - \frac{3}{2} + 1 = \frac{4-9+6}{6} = \frac{1}{6}$$

$$H_1 = \frac{1}{2}\frac{(-1)^1}{1!1!}\int_0^2 \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq 1}}^{2} (t-j)dt = \frac{(-1)}{2}\int_0^2 t(t-2)dt = -\frac{1}{2}\int_0^2 (t^2-2t)dt =$$

$$=\frac{-1}{2}\left[\frac{t^3}{3}-\frac{2t^2}{2}\right]_0^2=-\frac{1}{2}\left[\frac{2^3}{3}-\frac{2\cdot 2^2}{2}\right]=-\frac{4}{3}+2=\frac{-4+6}{3}=\frac{2}{3}=\frac{4}{6}$$

$$H_2=\frac{1}{2}\frac{(-1)^0}{2!0!}\int_0^2\prod_{\substack{j=0\\ j\neq 2}}^{2}(t-j)dt=\frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt=\frac{1}{4}\int_0^2(t^2-t)dt=$$

$$=\frac{1}{4}\left[\frac{t^3}{3}-\frac{t^2}{2}\right]_0^2=\frac{1}{4}\left[\frac{2^3}{3}-\frac{2^2}{2}\right]=\frac{2}{3}-\frac{1}{2}=\frac{4-3}{6}=\frac{1}{6}$$

Calculando para n=3, 4, ..., se puede construir la siguiente tabla de coeficientes de Cotes, donde, para evitar los denominadores, se representan los coeficientes multiplicados por el denominador N, común a los términos de un determinado valor n.

Tabla de coeficientes de Cotes

$$H_i=\frac{\hat{H}_i}{N},\quad \text{con } N=\text{común denominador para un valor } n.$$

n	$\hat{H}_0$	$\hat{H}_1$	$\hat{H}_2$	$\hat{H}_3$	$\hat{H}_4$	$\hat{H}_5$	$\hat{H}_6$	$\hat{H}_7$	$\hat{H}_8$	N	Coeficiente de error(C_e)
1	1	1								2	−1/12
2	1	4	1							6	−1/90
3	1	3	3	1						8	−3/80
4	7	32	12	32	7					90	−8/945
5	19	75	50	50	75	19				288	−275/12096
6	41	216	27	272	27	216	41			840	−9/1400
7	751	3577	1323	2989	2989	1323	3577	751		17280	−8183/518400
8	989	5888	−928	10496	−4540	10496	−928	5888	989	28350	−2368/467775

En la tabla también se incluyen coeficientes de error, los primeros de los cuales se calcularán posteriormente.

En la tabla no se incluyen ordenes superiores a n=8, porque en la práctica no se utilizan. Como apreciamos en la tabla para n=8, para este orden y ordenes superiores los coeficientes pasan de positivos a negativos, lo que hace que la utilización de órdenes superiores no revierta en una mayor exactitud.

Observando los coeficientes se aprecia que son simétricos alrededor del punto central del intervalo de integración [a, b]; es decir, $H_i = H_{n-i}$. Esta propiedad hace que estas fórmulas de cuadratura sean exactas para funciones impares respecto del punto central del intervalo de integración:

Si $f(x)$ es impar en $[a, b] \Rightarrow \int_a^b f(x)dx = 0$

También

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

ya que si H_i es par y $f(x)$ es impar, por cada $f(x_i)$ positivo a la derecha del punto central del intervalo, hay otro $f(x_i)$ negativo a la izquierda.

4.2.2. Estimación del error.

Con $p(x)=1$, la expresión del error toma la forma:

$$r = \int_{a=x_0}^{b=x_n} \frac{w_{n+1}(x) f^{n+1)}(\xi)}{(n+1)!} dx \text{, con } w_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^{n}(x - x_j) \text{ y } \xi \in [a,b]$$

Si tenemos espaciado constante ente las abscisas, podemos realizar el mismo cambio de variable que ya llevamos a cabo en anteriormente:

$$\left.\begin{array}{l} x_j = x_0 + j\,h \\ x = x_0 + t\,h \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{cases} dx = hdt \\ \text{Si } x = x_0 \Rightarrow t = 0 \\ \text{Si } x = x_n \Rightarrow t = n \end{cases}$$

Con el que

$$w_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^{n}(x_0 + th - x_0 - jh) = \prod_{j=0}^{n}(t-j)h = h^{n+1}\prod_{j=0}^{n}(t-j)$$

Llevando esta última expresión y el cambio de variable a r, queda:

$$r = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!}\int_0^n f^{n+1)}(\xi)\left[\prod_{j=0}^{n}(t-j)\right]dt$$

La dependencia $\xi = \xi(x)$ no se conoce por lo que no podemos llevar a cabo la integral anterior de forma estricta. Algunos autores suponen que ξ es independiente de x y por tanto puede salir fuera de la integral, otros que $f^{n+1)}(\xi)$ no cambia fuertemente dentro del intervalo de integración y suponen a esta derivada constante, otros cambian el punto ξ por otro punto η, donde $f^{n+1)}(\eta)$ encuentre su mayor valor en el intervalo. En cualquier caso podemos escribir, teniendo en cuenta que ξ es diferente para cada x, pero siempre $\xi \in [a,b]$, que

$$r = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} f^{n+1)}(\eta)\int_0^n \left[\prod_{j=0}^{n}(t-j)\right]dt \quad \text{con} \quad \eta \in [a,b]$$

o bien

$$r = h^{n+2} f^{n+1)}(\eta) C_e \quad \text{con} \quad C_e = \frac{1}{(n+1)!}\int_0^n \left[\prod_{j=0}^{n}(t-j)\right]dt$$

siendo C_e el coeficiente de error tabulado en la tabla de los coeficientes de Cotes, con algunas particularidades para n par que comentaremos posteriormente.

4.2.3. Fórmula o regla del trapecio.

La llamada fórmula del trapecio se obtiene de la expresión general de Newton-Cotes

$$I = \int_a^b f(x) \quad dx \simeq (b-a)\sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i)$$

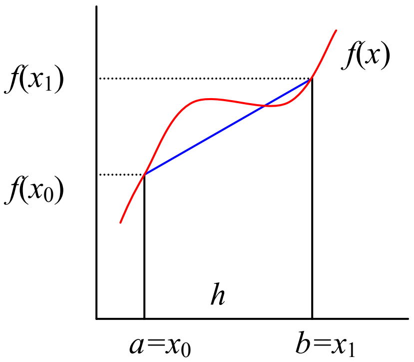
para el caso n=1⇒

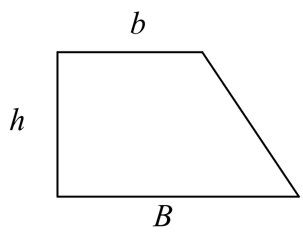
$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\sum_{i=0}^{1} H_i f(x_i) = (b-a)\left[H_0 f(x_0) + H_1 f(x_1)\right]$$

con $a \equiv x_0,\ b \equiv x_1,\ b-a = x_1 - x_0 = h,$ y $H_0 = H_1 = \frac{1}{2} \Rightarrow$

$$\boxed{I = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right]}$$

que es justamente al área del trapecio de la figura





$$S = \frac{1}{2}(B+b)h$$

Evaluación del resto.

El error cometido viene dado por la diferencia de las áreas subtendidas por $f(x)$ y la línea recta que aproxima a la función en el intervalo $[a,\ b]$. Este error viene dado por la ecuación por la expresión general

$$r = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} f^{n+1)}(\eta)\int_0^n \left[\prod_{j=0}^{n}(t-j)\right]dt = h^{n+2} f^{n+1)}(\eta) C_e$$

Particularizando para n=1⇒

$$r=\frac{h^3}{2!}f''(\eta)\int_0^1 t(t-1)dt=\frac{h^3}{2}f''(\eta)\left[\frac{t^3}{3}-\frac{t^2}{2}\right]_0^1=\frac{-1}{12}h^3 f''(\eta)\Rightarrow$$

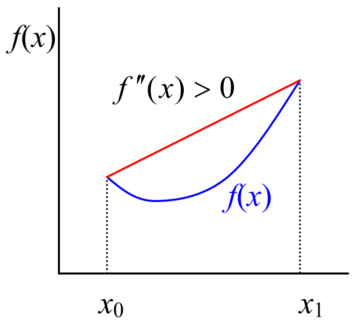
$$r=\frac{-1}{12}h^3 f''(\eta)=h^3 f''(\eta)C_e \quad \text{con} \quad C_e=\frac{-1}{12}$$

Acotando este error:

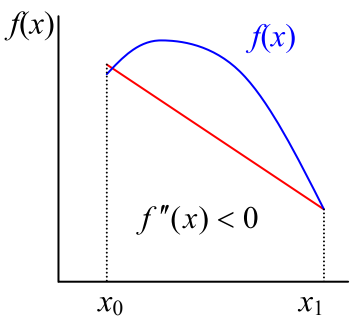
$$\boxed{|r|\le\frac{h^3}{12}\max_{x\in[a,b]}|f''(x)|}$$

De las ecuaciones anteriores se desprende:

- El error depende del intervalo $h=b-a$ y de la derivada segunda de la función $f(x)$.
- Si $f''(x)>0$ a lo largo del intervalo $[a, b]$, es decir, la curva se mantiene cóncava mirada desde arriba, la fórmula del trapecio calcula la integral en exceso.
- Si $f''(x)<0$ a lo largo del intervalo $[a, b]$, es decir, la curva se mantiene convexa mirada desde arriba, la fórmula del trapecio calcula la integral por defecto.



Calculo de la integral en exceso



Calculo de la integral por defecto

4.2.4. Fórmula de Simpson o de la parábola.

La fórmula de Simpson (Thomas Simpson, matemático inglés, siglo XVIII) es muy usada por su precisión y sencillez. Se obtiene particularizando la expresión general de Newton-Cotes para $n=2$.

$$\text{Con } n=2\Rightarrow I=\int_a^b f(x)dx\cong(b-a)\sum_{i=0}^{2}H_i f(x_i)=$$

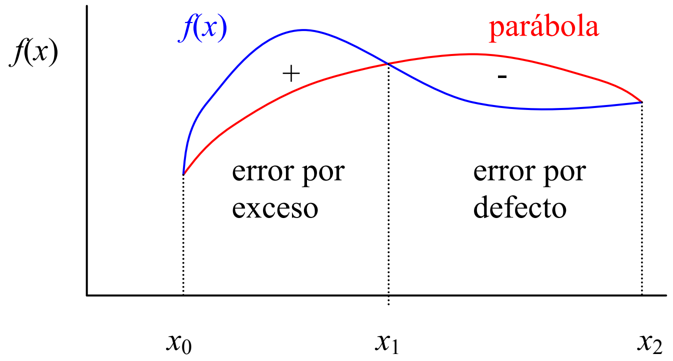
$$=(b-a)\left[H_0 f(x_0)+H_1 f(x_1)+H_2 f(x_2)\right]$$

Utilizando la tabla de coeficientes de Cotes, $H_0=\frac{1}{6}, H_1=\frac{2}{3}, H_2=\frac{1}{6}$, y con $(b-a)=(x_2-x_0)=2h\Rightarrow$

$$\boxed{I=\frac{h}{3}[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)]}$$

que es la denominada fórmula de Simpson o regla de la parábola.

En este caso, la curva que representa a $f(x)$ es sustituida por una parábola que pasa por $f(x_0)$, $f(x_1)$ y $f(x_2)$, ya que la función $f(x)$ se aproxima por un polinomio de grado 2 (una parábola). En la siguiente figura se aprecian dos zonas: Una con el signo (+) que da un error por exceso (positivo), y otra con signo (−) que da un error por defecto (negativo), compensándose parcialmente entre ambos.



Evaluación del resto.

Para evaluar cuantitativamente el error, acudimos a la fórmula general particularizando para n=2 ⇒

$$r = \frac{h^4}{3!} f'''(\eta) \int_0^2 t(t-1)(t-2)dt$$

Hacemos la integral

$$\int_0^2 t(t-1)(t-2)dt = \int_0^2 (t^3 - 3t^2 + 2t)dt = \left[\frac{t^4}{4} - 3\frac{t^3}{3} + 2\frac{t^2}{2} \right]_0^2 = 2^2 - 2^3 + 2^2 = 0 \Rightarrow r = 0$$

Que la expresión anterior del error sea nula no quiere decir que el error que cometemos al integrar una función arbitraria, aproximándola por una parábola, sea nulo, sino que el error cometido es de un orden superior (de orden n+1); es decir, el error vendrá dado por la expresión general de r con n=3, pero conservando el intervalo de integración $[a, b]$ que tenemos, es decir [0, 2] ⇒

$$r = \frac{h^5}{4!} f^{IV}(\eta) \int_0^2 t(t-1)(t-2)(t-3)dt$$

Realizamos la integral de la expresión anterior:

$$\int_0^2 t(t-1)(t-2)(t-3)dt = \int_0^2 (t^4 - 6t^3 + 11t^2 - 6t)dt =$$

$$= \left[\frac{t^5}{5} - 6\frac{t^4}{4} + 11 \ \frac{t^3}{3} - 6\frac{t^2}{2} \right]_0^2 = \frac{32}{5} - 24 + \frac{88}{3} - 12 = \frac{96 + 440 - 540}{15} = \frac{-4}{15} \Rightarrow$$

$$\boxed{r = -\frac{h^5}{90} f^{IV}(\eta) = C_e h^5 f^{IV}(\eta)}$$

siendo $C_e = \frac{-1}{90}$, el coeficiente de error con n=2 en la tabla de coeficientes de Cotes.

Comparando la expresión del error cometido con la fórmula de Simpson con la que obtuvimos con la regla del trapecio, podemos observar:

- La regla del trapecio (n=1) es exacta para polinomios de primer grado ya que contiene $f''(\eta)$.
- La fórmula de Simpson (n=2) es exacta para polinomios de tercer grado, ya que contiene $f^{IV}(\eta)$, obteniéndose una exactitud mayor de la esperada.
- Lo anterior ocurre para todas las fórmulas de Newton-Cotes con n par. Así podemos resumir diciendo que $r = C_e h^{n+3} f^{(n+2)}(\eta)$ para n par y $r = C_e h^{n+2} f^{(n+1)}(\eta)$ para n impar.

4.2.5. Fórmulas de Newton-Cotes de órdenes superiores. Regla de los 3/8.

Aumentando progresivamente el valor de n en la expresión general, se obtienen las distintas fórmulas de Newton-Cotes.

Para n=3, se obtiene la regla conocida como regla de los 3/8, cuya expresión, con $x_0=a$ y $x_3=b$, es:

$$I = \int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = (x_3 - x_0)\sum_{i=0}^{3} H_i f(x_i) = 3h\left[\frac{1}{8}f(x_0) + \frac{3}{8}f(x_1) + \frac{3}{8}f(x_2) + \frac{1}{8}f(x_3)\right] \Rightarrow$$

$$\boxed{I = \frac{3}{8}h\left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)\right]}$$

Evaluación del resto.

El valor del resto vienen dado por

$$r = \frac{h^5}{4!} f^{IV}(\eta)\int_0^3 t(t-1)(t-2)(t-3)dt \quad .$$

La integral de la expresión anterior ya la realizamos en el apartado anterior:

$$\int_0^3 t(t-1)(t-2)(t-3)dt = \left[\frac{t^5}{5} - 6\frac{t^4}{4} + 11\frac{t^3}{3} - 6\frac{t^2}{2}\right]_0^3 = \frac{3^5}{5} - 6\frac{3^4}{4} + 11\frac{3^3}{3} - 6\frac{3^2}{2} = \frac{-9}{10} \Rightarrow$$

$$r = -\frac{9}{10}\frac{1}{24}h^5 f^{IV}(\eta) \Rightarrow \boxed{r = -\frac{3}{80}h^5 f^{IV}(\eta)}$$

A la vista de las sucesivas fórmulas de cálculo de las integrales y las expresiones de los restos, podemos hacer las siguientes observaciones:

- El error se compone de tres factores: el primero es un coeficiente que no cambia sustancialmente al hacerlo *n*; el segundo es una potencia de *h*; y el tercero es la derivada de un determinado orden de la función que integramos.

- Con $h<1$, el segundo factor se reduce conforme *n* aumenta.

- El factor relacionado con la derivada de la función se complica a medida que aumenta *n*, complicándose el cálculo de la acotación del error y aumentando normalmente la cota de error que podemos asociar al valor calculado.

De las observaciones anteriores se deduce que necesitamos un *h* pequeño y que no es práctico utilizar *n* elevados, aunque el número de puntos conocidos de la función sea elevado. Todo esto nos lleva a la formulación de las de las llamadas fórmulas compuestas de Newton-Cotes que vamos a ver a continuación.

4.3. Fórmulas compuestas de Newton-Cotes.

Como veremos a lo largo de este apartado, con las fórmulas de Newton-Cotes se consigue disminuir el valor de *h* sin aumentar el orden de la derivada que interviene en el valor del resto.

4.3.1. Regla del trapecio compuesta.

Se trata, simplemente, de aplicar la regla del trapecio simple a cada uno de los *n* subintervalos que aparecen tomando los puntos por parejas. Los subintervalos serán $[x_0, x_1]$, $[x_1, x_2]$, $[x_2, x_3]$, …,$[x_{n-1}, x_n]$.

Si cuando teníamos sólo dos puntos $I = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right]$, ahora cuando tenemos $n+1$ puntos (*n* subintervalos),

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right] + \frac{h}{2}\left[f(x_1) + f(x_2)\right] + \cdots + \frac{h}{2}\left[f(x_{n-1}) + f(x_n)\right] =$$

$$= h\left[\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{n-1}) + \frac{f(x_n)}{2}\right] \Rightarrow$$

$$\boxed{I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_n)\right] + h\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)}$$

Evaluación del resto.

El resto es la suma de los errores parciales. Para la regla del trapecio simple:

$$r = -\frac{h^3}{12} f''(\eta) \quad ; \quad \eta \in [a, b]$$

Ahora el resto será:

$$r = -\frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i) \quad ; \quad \eta_i \in [x_{i-1}, x_i]$$

La media aritmética de las derivadas segundas, μ, que aparecen en la ecuación anterior

$$\mu = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i) \quad \text{ó} \quad \sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i) = n\mu$$

nos dará un valor medio para la derivada segunda de la función, tal que:

$$\text{mínimo de } f''(x) \text{ en } [a, b] \le \mu \le \text{máximo de } f''(x) \text{ en } [a, b]$$

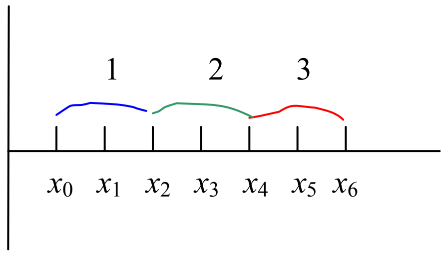
y por tanto, existirá un punto ζ, interior al intervalo$[a, b]$, que cumpla:

$$f''(\zeta) = \mu, \quad \zeta \in [a, b] \Rightarrow$$

$$\boxed{r = -\frac{h^3}{12} n f''(\zeta) = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\zeta) \text{ con } \zeta \in [a,b]}$$

4.3.2. Regla de Simpson compuesta.

Para aplicar la regla de Simpson compuesta, agrupamos los puntos de tres en tres, haciendo subintervalos que tienen $2h$ de longitud cada uno; por tanto, necesitaremos un número n par.



Como el último punto de un subintervalo es también el primero del siguiente, los subíndices pares interviene en dos subintervalos excepto x_0 y x_n. Los subintervalos son: $[x_0, x_2]$, $[x_2, x_4]$, $[x_4, x_6]$, …,$[x_{n-2}, x_n]$.

Si la regla de Simpson simple tenía la forma:

$$I = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right],$$

su aplicación a los diferentes subintervalos nos aproxima la integral como

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right] + \frac{h}{3}\left[f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)\right] +$$

$$+ \frac{h}{3}\left[f(x_4) + 4f(x_5) + f(x_6)\right] + \cdots + \frac{h}{3}\left[f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right] =$$

$$=\frac{h}{3}\left[f(x_0)+f(x_n)\right]+\frac{h}{3}4\left[f(x_1)+f(x_3)+\cdots+f(x_{n-1})\right]+\frac{h}{3}2\left[f(x_2)+\cdots+f(x_{n-2})\right]\Rightarrow$$

$$\boxed{I=\int_a^b f(x)dx\cong\frac{h}{3}\left\{f(x_0)+f(x_n)+4\sum_{i\text{ impares}}f(x_i)+2\sum_{\substack{i\text{ pares}\\ i\neq 0,n}}f(x_i)\right\}}$$

Evaluación del resto.

Como tenemos $\frac{n}{2}$ subintervalos y el resto en cada uno de ellos viene dado por

$$r_i=-\frac{h^5}{90}f^{IV}(\eta_i)\ ;\ \eta_i\in\left[x_{2i-2},x_{2i}\right]$$

sumando la aportación de todos los intervalos

$$r=-\frac{h^5}{90}\sum_{i=1}^{n/2}f^{IV}(\eta_i)$$

Haciendo como en el apartado anterior

$$f^{IV}(\varsigma)=\frac{1}{(n/2)}\sum_{i=1}^{n/2}f^{IV}(\eta_i)\Rightarrow$$

$$\boxed{r=-\frac{n\,h^5}{180}f^{IV}(\varsigma)=-\frac{(b-a)\,h^4}{180}f^{IV}(\varsigma)\quad\text{con }\varsigma\in\left[a,b\right]}$$

Ejemplo 1.

Calcular $I=\int_0^1\frac{dx}{1+x}$, mediante la fórmula de Newton-Cotes con 7 abscisas (n=6).

Con siete coordenadas, a=x_0=0, x_1, ..., b=x_6=1, tenemos 6 subintervalos de longitud $h=\frac{1-0}{6}=\frac{1}{6}$. La fórmula general de Newton-Cotes era

$$I=\int_a^b f(x)dx\cong(b-a)\sum_{i=0}^{n}H_i f(x_i)$$

o bien, particularizando para nuestro caso

$$I\cong(b-a)\sum_{i=0}^{6}H_i f(x_i)=\frac{(b-a)}{N}\sum_{i=0}^{6}\hat{H}_i f(x_i)$$

con N = 840 por ser n=6, a=0 y b=1. Para evaluar la expresión anterior podemos formar la siguiente tabla:

i	x_i	$f(x_i)$	$\hat{H}_i$	$\hat{H}_i\, f(x_i)$
0	0	1	41	41
1	1/6	6/7	216	185.142857
2	1/3	3/4	27	20.25
3	1/2	2/3	272	$181.\hat{3}$
4	2/3	3/5	27	16.2
5	5/6	6/11	216	117.818181
6	1	1/2	41	20.5
			$\sum_{i=0}^{n} \hat{H}_i\, f(x_i) =$	582.2443722

Sumando la última columna y dividiendo por 840 $\Rightarrow$

$$I = \frac{1}{840} 582.244372 = 0.693148062$$

Evaluación del resto.

Tenemos muchas cifras decimales y no todas serán exactas. Evaluamos el error cometido con la expresión del resto del método de Newton-Cotes:

$$r = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} f^{n+1)}(\eta) \int_0^n dt \prod_{j=0}^{n} (t-j)$$

En principio podíamos pensar, equivocadamente, que

$$r = h^{n+2} f^{n+1)}(\eta) C_e, \quad \text{con } C_e = \frac{-9}{1400} \quad \text{para } n=6,$$

pero como ocurrió en la cuadratura de Simpson (n=2), para todos los casos en que n sea par, el error es de un orden superior al esperado. Vamos a comprobar esto:

$$r = \frac{h^8}{7!} f^{VII}(\eta) \int_0^6 t(t-1)(t-2)(t-3)(t-4)(t-5)(t-6) \quad dt =$$

$$= \frac{h^8}{7!} f^{VII}(\eta) \int_0^6 \ (t^7 - 21t^6 + 175t^5 - 735t^4 + 1624t^3 - 1764t^2 + 720t) \ \ dt =$$

$$= \frac{h^8}{7!} f^{VII}(\eta) \left[\frac{t^8}{8} - 21\frac{t^7}{7} + 175\frac{t^6}{6} - 735\frac{t^5}{5} + 1624\frac{t^4}{4} - 1764\frac{t^3}{3} + 720\frac{t^2}{2} \right]_0^6 =$$

$$= \frac{h^8}{7!} f^{VII}(\eta) [209952 - 839808 + 1360800 - 1143072 + 526176 - 127008 + 12960] = 0$$

Por tanto, al igual que ocurre con n=2 y en todas las demás situaciones de n par, el resto será el correspondiente al orden superior, pero conservando el intervalo de integración $\Rightarrow$ Tomamos n=7 salvo en los límites de la integral:

$$r = \frac{h^9}{8!} f^{VIII}(\eta) \int_0^6 \prod_{j=0}^{7} (t-j) \quad dt \;= h^9 f^{VIII}(\eta) C_e$$

Evaluamos la integral anterior:

$$\int_0^6 \prod_{j=0}^{7} (t-j) \quad dt \;= \int_0^6 t(t-1)(t-2)(t-3)(t-4)(t-5)(t-6)(t-7)\, dt =$$

$$= \int_0^6 (t^8 - 28t^7 + 3221t^6 - 1960t^5 + 6769t^4 - 13132t^3 + 13068t^2 - 50400t)\, dt =$$

$$= \left[\frac{t^9}{9} - 28\frac{t^8}{8} + 322\frac{t^7}{7} - 1960\frac{t^6}{6} + 6769\frac{t^5}{5} - 13132\frac{t^4}{4} + 13068\frac{t^3}{3} - 5040\frac{t^2}{2} \right]_0^6 =$$

$$= 1119744 - 5878656 + 12877056 - 15240960 + \frac{52635744}{5} - 4254768 + 940896 - 90720 = \frac{-1296}{5}$$

que da indicios de inestabilidad, puesto que mediante diferencias de números grandes, hemos obtenido un valor relativamente pequeño.

El coeficiente de error, $C_e = \frac{1}{8!}\frac{(-1296)}{5} = \frac{-9}{1400}$ que es el aparece en la tabla de coeficientes de Newton-Cotes para $n = 6$.

Calculamos ahora las derivadas de la función:

$$f = (1+x)^{-1} \Rightarrow \quad f' = -(1+x)^{-2} \Rightarrow \quad f'' = 2(1+x)^{-3} \Rightarrow \quad f''' = -2\cdot 3(1+x)^{-4} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow f^{IV} = +2\cdot 3\cdot 4(1+x)^{-5} \Rightarrow f^{V} = -2\cdot 3\cdot 4\cdot 5(1+x)^{-6} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow f^{VI} = +2\cdot 3\cdot 4\cdot 5\cdot 6(1+x)^{-7} \Rightarrow f^{VII} = -7!(1+x)^{-8} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow f^{VIII} = 8! \;\; (1+x)^{-9}$$

El mayor valor absoluto de la función y de su derivadas en el intervalo [0,1] están en x=0, donde $f^{VIII} = 8!$

Llevando todos los valores encontrados a la expresión del resto

$$r = \frac{h^{n+3}}{(n+2)!} f^{n+2)}(\eta) \int_0^n dt \prod_{j=0}^{n+1} (t-j) = h^{n+3} f^{n+2)}(\eta) C_e \Rightarrow$$

$$r = \left(\frac{1}{6}\right)^9 \left(\frac{-9}{1400}\right) \frac{8!}{(1+\eta)^9}$$

En η=0 y tomando módulos

$$r \quad \le \quad \left| \left(\frac{1}{6}\right)^9 \frac{9}{1400} 8! \right| = 2.6\cdot 10^{-5} \Rightarrow$$

que asegura hasta la cuarta cifra decimal exacta $\Rightarrow$

$$I = 0.69315 \pm 0.00003$$

Si calculamos el resultado exacto de forma analítica:

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x}dx = \ln(1+x)\big]_0^1 = \ln 2 - \ln 1 = \ln 2 = 0.69314718$$

que nos confirma como efectivamente el error está por debajo de la cota encontrada que nos asegura cuatro cifras exactas.

Ejemplo 2.

Calcular la misma integral del apartado anterior, pero utilizando la regla compuesta de Simpson con n=10.

Si n=10, tenemos 5 subintervalos y $h = \frac{1-0}{10} = 0.1$.

Particularizando la expresión general

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{h}{3}\left\{ f(x_0) + f(x_n) + 4\sum_{i \text{ impares}} f(x_i) + 2\sum_{\substack{i \text{ pares} \\ i\neq 0,n}} f(x_i) \right\} \Rightarrow$$

$$I = \frac{h}{3}\Big\{ \left[f(x_0)+f(x_{10})\right] + 4\left[f(x_1)+f(x_3)+f(x_5)+f(x_7)+f(x_9)\right] + $$
$$+2\left[f(x_2)+f(x_4)+f(x_6)+f(x_8)\right]\Big\}$$

Con la finalidad de evaluar la expresión anterior, construimos una pequeña tabla en la que colocamos, en columnas separadas, los valores de la función para abscisas pares e impares. Sumamos la columna de las abscisas impares y multiplicamos por cuatro. Por otro lado, sumamos la columna de las abscisas pares, salvo el primer y último dato, y multiplicamos por dos. Finalmente, como indica la expresión anterior, sumamos el valor de la función para la primera y última abscisa, con las sumas anteriores.

i	x_i	$f(x_{2i-1})$	$f(x_{2i})$
0	0		1
1	0.1	0.909090909	
2	0.2		0.833333333
3	0.3	0.769230769	
4	0.4		0.714285714
5	0.5	0.666666667	
6	0.6		0.625000000
7	0.7	0.588235294	
8	0.8		0.555555556
9	0.9	0.526315789	
10	1		0.5

Se suman y se multiplican por 4

Se suman y se multiplican por 2

$$I = \int_0^1 \frac{1}{1+x}dx \cong \frac{0.1}{3}(1+0.5+13.83815772+5.456349206) = 0.69315023$$

Evaluación del resto.

Para la fórmula compuesta de Simpson, el error viene dado por

$$r = \frac{-nh^5}{180} f^{IV}(\eta)$$

Con n=10, h=0.1 y $f^{IV}(x) = \dfrac{4!}{(1+x)^5}$, calculada en el apartado anterior ⇒

$$r = -\frac{(0.1)^5 \cdot 10}{180} \frac{24}{(1+\eta)^5}$$

El valor más elevado se encuentra con η =0 ⇒ $|r| \leq 1.3 \cdot 10^{-5}$, que asegura la exactitud de la cuarta cifra decimal ⇒

$$\mathrm{I} = 0.69315 \pm 0.00002$$

Regla Compuesta de Simpson n=6.

Los resultados obtenidos en este ejemplo (Simpson con n=10) y en el anterior (Newton-Cotes simple con n=6) dan unos resultados muy parecidos en el grado de exactitud. Pero para comparar ambos métodos deberíamos de repetir para Simpson compuesta con n=6.

Para este último caso, n=6, h=1/6 y la valoración numérica de la integral queda:

$$I = \frac{h}{3}\left\{\left[f(x_0)+f(x_6)\right]+4\left[f(x_1)+f(x_3)+f(x_5)\right]+2\left[f(x_2)+f(x_4)\right]\right\}$$

Apoyándonos en una tabla como la anterior:

i	x_i	$f(x_{2i-1})$	$f(x_{2i})$
0	0		1
1	1/6	6/7	
2	1/3		3/4
3	1/2	2/3	
4	2/3		3/5
5	5/6	6/11	
6	1		1/2

$$I = \frac{1}{18}(1.5 + 8.277056277 + 2.7) = 0.693169793$$

Con los nuevos valores de n y h (n=6, h=1/6), el error queda:

$$r = \frac{-6\left(\frac{1}{6}\right)^5}{180}\frac{4!}{(1+\eta)^5} \quad \Rightarrow \quad |r| \cong 10^{-4} \quad \text{que asegura 3 cifras exactas.}$$

Por tanto $I = 0.6932 \pm 0.0001$ recordemos que el valor exacto era 0.69314718

La fórmula general de Newton-Cotes y órdenes inferiores a 8 ó 9 se muestra más exacta que la de Simpson compuesta con el mismo valor de n. El problema que presenta la fórmula de cuadratura de Newton-Cotes, para órdenes superiores a 8, es que comienzan a aparecer coeficientes negativos y positivos, y la fórmula pierde estabilidad.

El siguiente programa Fortran resuelve el anterior ejemplo para valores de n (n siempre par) que van aumentando sucesivamente hasta que la diferencia entre los valores de la integral para dos n sucesivos sea menor que una cierta cota introducida en el programa.

```
      Program SimpsonCompuesto
      real I, Ianterior
* Definición de la función a integrar como función interna.
      f(x)=1./(1.+x)
* Intervalo de integración.
      a=0.0
      b=1.0
* Definición de la exactitud deseada.
      exactitud=1.0e-8
* Ianterior es una variable auxiliar para ir comparando
      Ianterior=0.0
* Se inicia un ciclo con sucesivos valores de n hasta que dos valores
* consecutivos de n den unos valores para la integral cuya diferencia
* sea menor que el valor dado a exactitud.
      do 100 n=2,1000,2 !n debe ser par
* Con el n dado por el ciclo se calcula h
      h=(b-a)/float(n)
      sumextremos=f(a)+f(b)
      sumimpar=0.0
      sumpar=0.0
      do 200 k=1,n-1,2
      sumimpar=sumimpar+f(a+k*h)
200   end do
      do 300 k=2,n-2,2
      sumpar=sumpar+f(a+k*h)
300   end do
      I=(sumextremos+4.*sumimpar+2.*sumpar)*(h/3.)
      print *, n,I
      if (abs(I-Ianterior).le.exactitud) exit
      Ianterior=I
100   end do
      stop
      end
```

Los resultados aportados por el programa, que se muestran en la siguiente tabla, coinciden con los obtenidos anteriormente (n igual a 6 y 10), y con el valor analítico. También vemos como son necesarios sólo 26 intervalos para encontrar un resultado que se va a ir repitiendo indefinidamente dentro del grado de exactitud que aporta la simple precisión.

```
           2   0.6944445
           4   0.6932540
           6   0.6931698
           8   0.6931545
          10   0.6931502
          12   0.6931487
          14   0.6931480
          16   0.6931477
          18   0.6931475
          20   0.6931474
          22   0.6931473
          24   0.6931472
          26   0.6931472

Press any key to continue
```

4.3.3. Integración de Romberg.

A tenor de los desarrollos anteriores, una pregunta común es: ¿En cuántos subintervalos deberemos dividir el intervalo de integración para encontrar una solución adecuada? Una forma de contestar a esta pregunta es la siguiente: Deberemos ir dividiendo más y más el intervalo de integración hasta que alcancemos un número de subintervalos en el que, si seguimos dividiendo, encontremos el mismo resultado anterior o la diferencia sea despreciable.

En este sentido trabaja la integración de Romberg; es decir, ir aumentando el número de subintervalos pero sin que tengamos que ir desechando el trabajo previamente realizado. Supongamos que estamos trabajando con la regla del trapecio compuesto con el fin de llevar a cabo una integración numérica. En este caso, el valor numérico de la integral viene dado por

$$I_n = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_n) \right] + h \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) ,$$

donde el subíndice n indica el número de subintervalos utilizados. Con $x_0 = a$, $x_n = b$ y $x_i = x_0 + ih$, la expresión anterior toma la forma

$$I_n = \frac{h}{2}\left[f(a) + f(b) \right] + h \sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih) .$$

Supongamos que comenzamos trabajando con un solo subintervalo (n = 1), estaríamos con la regla simple del trapecio y el subintervalo y la integral tendrían los valores:

$$h_1 = b - a \qquad\qquad I_1 = \frac{h_1}{2}\left[f(a) + f(b) \right]$$

Si doblamos el número de subintervalos pasando a n = 2, tendríamos:

$$h_2 = \frac{b-a}{2} = \frac{h_1}{2} \qquad I_2 = \frac{h_2}{2}\left[f(a)+f(b)\right] + h_2 \sum_{i=1}^{1} f(a+ih_2) \Rightarrow$$

$$I_2 = \frac{h_1}{4}\left[f(a)+f(b)\right] + h_2 f(a+h_2) \Rightarrow$$

$$I_2 = \frac{1}{2} I_1 + h_2 f(a+h_2)\,.$$

Si este número de subintervalos no fuese suficiente, doblaríamos de nuevo el nuevo, dividiendo cada subintervalo anterior en dos. Con n = 4, tendríamos

$$h_4 = \frac{b-a}{4} = \frac{h_2}{2} \qquad I_4 = \frac{h_4}{2}\left[f(a)+f(b)\right] + h_4 \sum_{i=1}^{3} f(a+ih_4) \Rightarrow$$

$$I_4 = \frac{h_2}{4}[f(a)+f(b)] + h_4[f(a+h_4) + \overset{\substack{a+h_2\\ \uparrow}}{f(a+2h_4)} + f(a+3h_4)] \Rightarrow$$

$$I_4 = \frac{1}{2} I_2 + h_4\left[f(a+h_4)+f(a+3h_4)\right].$$

Si volvemos a doblar el número de subintervalos, pasaríamos a n = 8 y la integral tomaría la forma

$$h_8 = \frac{b-a}{8} = \frac{h_4}{2} \qquad I_8 = \frac{h_8}{2}\left[f(a)+f(b)\right] + h_8 \sum_{i=1}^{7} f(a+ih_8) \Rightarrow$$

$$I_8 = \frac{h_4}{4}\left[f(a)+f(b)\right] +$$

$$+ h_8[f(a+h_8) + \overset{\substack{a+h_4\\ \uparrow}}{f(a+2h_8)} + f(a+3h_8) + \overset{\substack{a+2h_4\\ \uparrow}}{f(a+4h_8)} +$$

$$+ f(a+5h_8) + \overset{\substack{a+3h_4\\ \uparrow}}{f(a+6h_8)} + f(a+7h_8)] \Rightarrow$$

$$I_8 = \frac{1}{2} I_4 + h_8\left[f(a+h_8)+f(a+3h_8)+f(a+5h_8)+f(a+7h_8)\right]$$

Vemos como se ha trazado un proceso iterativo en el que calculamos, el valor dado a la integral en una etapa, a partir del obtenido en la etapa anterior.

Generalizando las expresiones anteriores:

$$I_{2^p} = \frac{1}{2} I_{2^{p-1}} + h_{2^p} \sum_{i=1}^{2^{p-1}} f\left(a + (2i-1)h_{2^p}\right) \Rightarrow$$

4.4. Método de integración o cuadratura de Gauss.

- Consideremos los siguientes puntos:
  - La expresión $I = \int_a^b p(x) f(x) dx \cong \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ es exacta, haciéndose r=0, cuando $f(x)$ es un polinomio de grado n o inferior, ya que entonces la función $f(x)$ y su polinomio de interpolación son idénticos $\Rightarrow I = \int_a^b p(x) P_n(x) dx = \sum_{i=0}^{n} A_i P_n(x_i)$.
  - Por otro lado, en las fórmulas de Newton-Cotes, hemos encontrado que las fórmulas con n par son exactas para polinomios de grado n+1, como se desprende de sus expresiones particulares de error: La regla del trapecio (n=1) es exacta para polinomios de primer grado ya que su error depende de $f''(x)$, mientras que la fórmula de Simpson (n=2) es exacta para polinomios de tercer grado ya que su error depende de $f^{IV}(x)$.
  - También recordamos que en las fórmulas de Newton-Cotes los puntos o abscisas $\{x_i\}$ son equiespaciados, lo que supone una fuerte restricción.

- A la vista de lo anterior, cabe preguntarse si es posible encontrar una fórmula de integración exacta, partiendo de n+1 abscisas no equiespaciadas, para un polinomio de grado superior a n. Es decir, nos preguntamos si podemos encontrar la expresión:

$$\int_a^b p(x) P_{n+q}(x) dx = \sum_{i=0}^{n} A_i P_{n+q}(x_i)$$

donde q=1,2,..., es un valor entero por determinar y $P_{n+q}(x)$ un polinomio arbitrario de grado $n+q$. En la expresión anterior nos queda por determinar:

- El conjunto de n+1 puntos x_i (abscisas de Gauss) que dejan de ser equiespaciadas.
- Los coeficientes o pesos A_i.
- El valor máximo del entero q.

La expresión anterior nos permitirá realizar la integral

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

pero ahora, la función $f(x)$ está aproximada por un polinomio de grado $n+q$, por lo que esperamos una mayor exactitud.

- Comprobemos que es posible encontrar la expresión

$$\int_a^b p(x)P_{n+q}(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i P_{n+q}(x_i)$$

Comencemos dividiendo $P_{n+q}(x)$ por $w_{n+1}(x)=\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$, siendo $w_{n+1}(x)$ un polinomio cuyas raíces son el conjunto de abscisas de Gauss, $\{x_i\}_{i=0,1,\dots,n}$:

$$\begin{array}{l|l} P_{n+q}(x) & w_{n+1}(x) \\ \cline{2-2} R_n(x) & Q_{q-1}(x) \end{array} \qquad \Rightarrow \quad P_{n+q}(x) = w_{n+1}(x)\, Q_{q-1}(x)+R_n(x)$$

donde $R_n(x)$ es un polinomio de grado n o inferior, ya que si fuese de grado superior a n podríamos seguir haciendo la división y $Q_{q-1}(x)$ es un polinomio de grado $q-1$.

Llevando la expresión anterior a la izquierda y derecha de la igualdad que queremos demostrar, tenemos:

$$\int_a^b p(x)P_{n+q}(x)dx = \int_a^b p(x)w_{n+1}(x)Q_{q-1}(x)dx + \int_a^b p(x)R_n(x)dx$$

Queremos hacer → ‖ Deben ser → ‖ ‖ ← Por ser $R_n(x)$ de grado n o inferior

$$\sum_{i=0}^{n} A_i P_{n+q}(x_i) = \sum_{i=0}^{n} A_i w_{n+1}(x_i)Q_{q-1}(x_i) + \sum_{i=0}^{n} A_i R_n(x_i)$$

Si hacemos que los primeros sumandos de la parte derecha de las dos ecuaciones anteriores sean iguales, y que también lo sean los dos segundos sumandos, habremos demostrado la igualdad de los dos términos a la izquierda del igual, que es nuestra finalidad.

Es claro, por ser $R_n(x)$ un polinomio de grado n o inferior, que

$$\int_a^b p(x)R_n(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i R_n(x_i)$$

Por otro lado, por la propia definición del polinomio $w_{n+1}(x)$, $w_{n+1}(x_i) = 0$, por lo que

$$\sum_{i=0}^{n} A_i w_{n+1}(x_i)Q_{q-1}(x_i) = 0$$

Es decir, $\int_a^b p(x)P_{n+q}(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i P_{n+q}(x_i)$, si

$$\int_a^b p(x)w_{n+1}(x)Q_{q-1}(x)dx = 0$$

que se debe cumplir para cualquier polinomio $Q_{q-1}(x)$, con q=1,2,..., hasta un máximo por determinar , ya que $P_{n+q}(x)$ es un polinomio cualquiera de grado $n+q$.

- La ecuación anterior nos va a permitir calcular el conjunto de abscisas $\{x_i\}_{i=0,\dots,n}$ y el valor máximo de q:

Si la ecuación anterior se cumple para cualquier polinomio $Q_{q-1}(x)$ de grado $q-1$ o inferior, se debe de cumplir para los polinomios 1, x, x^2, ..., x^{q-1}. Sustituyendo $Q_{q-1}(x)$ por cada uno de los valores anteriores, se obtiene el siguiente sistema de q ecuaciones, aunque todavía q esté indeterminado:

$$\left.\begin{array}{l} \int_a^b p(x) w_{n+1}(x) \; dx = 0 \\ \int_a^b p(x) w_{n+1}(x) \, x \, dx = 0 \\ \qquad \vdots \\ \int_a^b p(x) w_{n+1}(x) \, x^{q-1} dx = 0 \end{array}\right\} \text{Sistema de } q \text{ ecuaciones.}$$

Si expresamos el polinomio $w_{n+1}(x)$ como

$$w_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^{n} (x - x_j) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n + x^{n+1}$$

donde destacamos que el coeficiente del término correspondiente a la mayor potencia de x, x^{n+1}, es la unidad, el sistema de ecuaciones toma la forma:

$$a_0 \int_a^b p(x) dx + a_1 \int_a^b p(x) x dx + \cdots + a_n \int_a^b p(x) x^n dx + \int_a^b p(x) x^{n+1} dx = 0$$

$$a_0 \int_a^b p(x) x dx + a_1 \int_a^b p(x) x^2 dx + \cdots + a_n \int_a^b p(x) x^{n+1} dx + \int_a^b p(x) x^{n+2} dx = 0$$

...

$$a_0 \int_a^b p(x) x^{q-1} dx + a_1 \int_a^b p(x) x^q dx + \cdots + a_n \int_a^b p(x) x^{n+q-1} dx + \int_a^b p(x) x^{n+q} dx = 0$$

Llevando el último término de cada una de las ecuaciones anteriores a la derecha de su correspondiente ecuación, como término independiente:

$$a_0 \int_a^b p(x) dx + a_1 \int_a^b p(x) x dx + \cdots + a_n \int_a^b p(x) x^n dx = -\int_a^b p(x) x^{n+1} dx$$

$$a_0 \int_a^b p(x) x dx + a_1 \int_a^b p(x) x^2 dx + \cdots + a_n \int_a^b p(x) x^{n+1} dx = -\int_a^b p(x) x^{n+2} dx$$

...

$$a_0 \int_a^b p(x) x^{q-1} dx + a_1 \int_a^b p(x) x^q dx + \cdots + a_n \int_a^b p(x) x^{n+q-1} dx = -\int_a^b p(x) x^{n+q} dx$$

que constituye un sistema de q ecuaciones con los coeficientes $\{a_i\}_{i=0,\dots,n}$ como incógnitas (n+1 incógnitas) $\Rightarrow$

$$\Rightarrow \left.\begin{cases} \text{Si } q = n+1, \text{ solución única.} \\ \text{Si } q < n+1, \text{ el sistema tiene solución , pero no es única} \end{cases}\right\} \Rightarrow q \le n+1$$

Resuelto el sistema, conocemos $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n \Rightarrow$ conocemos $w_{n+1}(x) \Rightarrow$ podemos calcular sus raíces $\{x_i\}_{i=1,\dots,n}$, que son las abscisas de Gauss.

- Hasta ahora hemos calculado los posibles valores de q y las abscisas $\{x_i\}_{i=1,\dots,n}$, de forma que

$$\int_a^b p(x)P_{n+q}(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i P_{n+q}(x_i)$$

y de aquí la fórmula de integración aproximada

$$I = \int_a^b p(x)f(x)dx \simeq \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

que será exacta cuando $f(x)$ sea un polinomio de grado $n+q_{\text{máximo}} = n+n+1 = 2n+1$ o inferior.

- Pero el proceso del cálculo de la abscisas puede simplificarse si volvemos la vista a la ecuación

$$\int_a^b p(x)w_{n+1}(x)Q_{q-1}(x)dx = 0$$

que se cumple para cualquier polinomio $Q_{q-1}(x)$ de grado igual o inferior a $q_{\text{máximo}}-1 = n+1-1=n$. Esta ecuación coincide con la de ortogonalidad de los polinomios. De esta forma tendremos:

1º) Si $a = -1,\ b = 1,\ p(x) = 1$

$w_{n+1}(x)$ es un polinomio de Legendre, $P_{n+1}(x)$, salvo una constante.

(Debemos de tener en cuenta que el término de mayor grado de w_{n+1}, x_{n+1}, tiene de coeficiente la unidad, mientras que los polinomio de Legendre y otros polinomios especiales tienen este coeficiente distinto de la unidad).

2º) Si $a = -\infty$, $b = \infty$, $p(x) = e^{-x^2}$

$w_{n+1}(x)$ es un polinomio de Hermite, $H_{n+1}(x)$, salvo una constante.

3º) Si $a = 0,\ b = \infty,\ p(x) = e^{-x}$

$w_{n+1}(x)$ es un polinomio de Laguerre, $L_{n+1}(x)$, salvo una constante.

4º) Si $a = -1$, $b = 1$, $p(x) = \dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$

$w_{n+1}(x)$ es un polinomio de Tchebychev, $T_{n+1}(x)$, salvo una constante.

Dependiendo de la función peso $p(x)$ y del intervalo de integración $[a, b]$, hacemos coincidir $w_{n+1}(x)$ con el correspondiente polinomio. Las abscisas de Gauss son los ceros de estos polinomios. $w_{n+1}(x)$ y el polinomio especial correspondiente pueden ser diferentes en los coeficientes, $\{a_i\}$, pero tienen idénticas raíces, $\{x_i\}$, ya que sólo los separa una constante.

- Pero nuestro interés primario era realizar la integral y por lo tanto evaluar

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

donde los A_i cumplen

$$\int_a^b p(x) P_{n+q}(x) dx = \sum_{i=0}^{n} A_i P_{n+q}(x_i) \quad \text{con} \quad q \leq n+1$$

Para calcular los coeficientes o pesos A_i, aplicamos la ecuación anterior a un polinomio especial de grado n, el polinomio de Lagrange $l_i(x)$. Como polinomio de grado n, la expresión anterior es exacta para él $\Rightarrow$

$$\int_a^b p(x) l_i(x) dx = \sum_{k=0}^{n} A_k l_i(x_k) = \sum_{k=0}^{n} A_k \delta_{i,k} = A_i \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{A_i = \int_a^b p(x) l_i(x) dx}$$

Expresión que ya obtuvimos en el planteamiento general de la integración numérica; muy similar a la de las fórmulas de cuadratura de Newton-Cotes, pero las abscisas, $\{x_i\}$, en ambos métodos son diferentes.

También podíamos haber hecho lo anterior utilizando los polinomios $l_i^2(x)$ (polinomio de grado $2n$), obteniéndose

$$A_i = \int_a^b p(x) l_i^2(x) dx, \quad \text{ya que} \quad \int_a^b l_i^2(x) dx = \int_a^b l_i(x) dx,$$

expresión que es utilizada por muchos autores, ya que pone de manifiesto A_i que tiene el mismo signo que $p(x)$, si es que $p(x)$ no cambia su signo a lo largo del intervalo $[a, b]$.

En resumen: Para evaluar numéricamente $I = \int_a^b p(x) f(x) dx \simeq \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$, sólo necesitamos las abscisas de Gauss, $\{x_i\}$, y los coeficientes o pesos, A_i. Los ceros de los polinomios especiales nos dan las abscisas y los pesos los obtenemos de $A_i = \int_a^b p(x) l_i(x) dx$.

- Cálculo de los coeficientes o pesos A_i.

Los coeficientes o pesos A_i se encuentran tabulados y listos para ser usados directamente. A continuación, antes de exponer las tablas con los pesos A_i más utilizados, vamos a calcular algunos de ellos para ver como sería el proceso de cálculo.

Legendre con n=1: $[a,b]=[-1,1]$, $p(x)=1$

Con n=1, tendremos dos abscisas de Gauss, x_0 y x_1, y los pesos A_0 y A_1.

$w_{n+1}(x)= w_2(x)$, y como $P_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)\Rightarrow \frac{3}{2}w_2(x)=P_2(x)$.

Las abscisas de Gauss o ceros de estos polinómios vienen dados por la ecuación

$$3x^2-1=0 \;\Rightarrow\; x=\pm\frac{1}{\sqrt{3}} \;\Rightarrow\; \begin{cases} x_0 = \dfrac{-1}{\sqrt{3}} \\ x_1 = \dfrac{+1}{\sqrt{3}} \end{cases}$$

que son los valores que aparecen en la tabla de la cuadratura de Gauss-Legendre.

Para calcular $A_i=\int_a^b l_i(x)dx$ con i=0 ó 1, necesitamos conocer $l_0(x)$ y $l_1(x)$. De

$$l_i(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\Rightarrow$$

$$l_0(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq 0}}^{n}\frac{x-x_j}{x_0-x_j}=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}=\frac{x-\frac{1}{\sqrt{3}}}{-2\frac{1}{\sqrt{3}}}=\frac{x\sqrt{3}-1}{-2}=\frac{1-x\sqrt{3}}{2},$$

$$l_1(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq 1}}^{1}\frac{x-x_j}{x_1-x_j}=\frac{x-x_0}{x_1-x_0}=\frac{x+\frac{1}{\sqrt{3}}}{2\frac{1}{\sqrt{3}}}=\frac{x\sqrt{3}+1}{2}=\frac{1+x\sqrt{3}}{2}\Rightarrow$$

$$A_0=\int_{-1}^{1}l_0(x)dx=\int_{-1}^{1}\frac{x-x_1}{x_0-x_1}dx=\int_{-1}^{1}\frac{1-x\sqrt{3}}{2}dx=\frac{1}{2}\left[x-\sqrt{3}\frac{x^2}{2}\right]_{-1}^{+1}=1$$

$$A_1=\int_{-1}^{1}l_1(x)dx=\int_{-1}^{1}\frac{x-x_0}{x_1-x_0}dx=\int_{-1}^{1}\frac{1+x\sqrt{3}}{2}dx=\frac{1}{2}\left[x+\sqrt{3}\frac{x^2}{2}\right]_{-1}^{+1}=1$$

que son los valores, que para estos pesos, aparecen en la tabla de cuadratura de Gauss-Legendre.

Hermite con n=1: $[a, b] = [-\infty,\infty]$, $p(x) = e^{-x^2}$

Con n=1, tendremos de nuevo dos abscisas de Gauss, x_0 y x_1, y los pesos A_0 y A_1.

$w_{n+1}(x)= w_2(x)$, y como $H_2(x) = 4x^2 - 2 \Rightarrow 4w_2(x) = H_2(x)$.
Las abscisas de Gauss o ceros de estos polinómios vienen dados por la ecuación

$$4x^2-2 = 0 \;\Rightarrow\; x = \pm\frac{1}{\sqrt{2}} \;\Rightarrow\; \begin{cases} x_0 = \dfrac{-1}{\sqrt{2}} = -0.707107 \\ x_1 = \dfrac{+1}{\sqrt{2}} = +0.707107 \end{cases}$$

que son los valores que aparecen en la tabla de la cuadratura de Gauss-Hermite.

Siguiendo un proceso paralelo al caso anterior:

$$A_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} l_0(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\frac{x-x_1}{x_0-x_1}dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\frac{x-\frac{1}{\sqrt{2}}}{-\sqrt{2}}dx = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}(1-\sqrt{2}\,x)dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$A_1 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} l_1(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\frac{x-x_0}{x_1-x_0}dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\frac{x+\frac{1}{\sqrt{2}}}{\sqrt{2}}dx = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}(1+\sqrt{2}\,x)dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

donde hemos hecho uso de que

$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}x\,dx = 0$, ya que la función e^{-x^2} es par y la función x impar, y

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\,dx = 2\int_{0}^{\infty} e^{-x^2}\,dx = 2\frac{\sqrt{\pi}}{2} = \sqrt{\pi} \Rightarrow$$

$\Rightarrow A_0 = A_1 = \dfrac{\sqrt{\pi}}{2} = 0.886226925$, que es el valor que aparece en las tablas para estos pesos.

Laguerre con n=1: $[a, b] = [0, \infty]$, $p(x) = e^{-x}$

Con n=1, tendremos, como en los casos anteriores, dos abscisas de Gauss, x_0 y x_1, y los pesos A_0 y A_1.
$w_{n+1}(x)= w_2(x)$, y como $L_2(x) = x^2 - 4x + 2 \Rightarrow w_2(x) = L_2(x)$.
Las abscisas de Gauss o ceros de estos polinómios vienen dados por la ecuación

$$x^2-4x+2 = 0 \;\Rightarrow\; x = \frac{4\pm\sqrt{16-8}}{2} = 2\pm\sqrt{2} \;\Rightarrow\; \begin{cases} x_0 = -0.585786 \\ x_1 = +3.414214 \end{cases}$$

que son los valores que aparecen en la tabla de la cuadratura de Gauss-Laguerre. Siguiendo un proceso paralelo al caso anterior, con $(x_1 - x_0) = (2+\sqrt{2}) - (2-\sqrt{2}) = 2\sqrt{2}$

$$A_0 = \int_0^{\infty} e^{-x} l_0(x)dx = \int_0^{\infty} e^{-x}\frac{x-x_1}{x_0-x_1}dx = \frac{-1}{2\sqrt{2}}\left\{\int_0^{\infty} xe^{-x}\,dx - \int_0^{\infty}(2+\sqrt{2})e^{-x}\,dx\right\} =$$

$$= \frac{-1}{2\sqrt{2}}(1-2-\sqrt{2}) = 0.853553$$

$$A_1 = \int_0^\infty e^{-x} l_1(x)dx = \int_0^\infty e^{-x}\ \frac{x-x_0}{x_1-x_0}dx = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left\{\int_0^\infty xe^{-x}\ dx - \int_0^\infty (2-\sqrt{2})e^{-x}\ dx\right\} =$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}}(1-2+\sqrt{2}) = 0.146447$$

donde hemos hecho uso de que

$$\int_0^\infty x\,e^{-x}\ dx = \left[\frac{e^{-x}}{-1}(x+1)\right]_0^\infty = 1(0+1) = 1\,,\quad \text{y} \qquad \int_0^\infty e^{-x}\ dx = \left[\frac{e^{-x}}{-1}\right]_0^\infty = 1$$

- Tablas de raíces y pesos para la cuadratura de Gauss.

Siguiendo el proceso marcado por los cálculos anteriores podemos construir las siguientes tablas:

n	Abscisas x_j	Pesos A_j
1	$\pm 0.577350 = \pm\frac{1}{\sqrt{3}}$	1
2	0 ±0.774597	8/9 5/9
3	±0.339981 ±0.861136	0.652145 0.347855
4	0 ±0.538469 ±0.906180	0.568889 0.478629 0.236927

$[a, b]=[-1,1]$

$p(x)=1$

Tabla 1. Raíces de los polinomios de Legendre, $P_n(x_j)$, y sus coeficientes correspondientes (A_j).

n	Abscisas x_j	Pesos A_j
1	±0.707107	0.886227
2	0 ±1.224745	1.181636 0.295409
3	±0.524648 ±1.650680	0.804914 0.081313
4	0 ±0.958572 ±2.020183	0.945309 0.393619 0.019953

$[a, b]=[-\infty, \infty]$

$p(x) = e^{-x^2}$

Tabla 2. Raíces de los polinomios de Hermite, $H_n(x_j)$, y sus coeficientes correspondientes (A_j).

n	Abscisas x_j	Pesos A_j
1	0.585786 3.414214	0.853553 0.146447
2	0.415775 2.294280 6.289945	0.711093 0.278518 0.010389
3	0.322548 1.745761 4.536620 9.395071	0.603154 0.357419 0.038888 0.000539
4	0.263560 1.413403 3.596426 7.085810 12.640801	0.521756 0.398667 0.075942 0.003612 0.000023

$[a, b]=[0, \infty]$

$p(x) = e^{-x}$

Tabla 3. Raíces de los polinomios de Lagerre, $L_n(x_j)$, y sus coeficientes correspondientes (A_j).

- Evaluación del resto de la integración.

En la interpolación de Hermite aproximábamos una función $f(x)$ por un polinomio $P_{2n+1}(x)$, de grado $2n+1$. El resto del polinomio de interpolación de Hermite estaba dado por:

$$f(x) - P_{2n+1}(x) = R(x) = \frac{f^{2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} w_{n+1}^2(x)$$

En el planteamiento general del problema de la integración, veíamos que el error de la integración viene determinado por

$$r = \int_a^b p(x) R(x) dx$$

Combinando las dos expresiones anteriores y haciendo un razonamiento análogo al que ya hicimos para la cuadratura de Newton-Cotes, el error cometido en la cuadratura de Gauss viene dado por

$$r = \frac{f^{2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!} \int_a^b p(x) w_{n+1}^2(x) dx \qquad \text{con } \eta \in [a, b]$$

que muestra que la cuadratura de Gauss es exacta para polinomios de grado $2n+1$ o inferior.

Ejemplo 1. Calcular $I = \int_1^3 \frac{dx}{x}$, mediante el método de Gauss-Legendre con $n = 2$.

Debemos utilizar la expresión $\int_{-1}^{+1} f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$, donde las abscisas de Gauss, x_i, coinciden con los ceros de los polinomios de Legendre y los pesos, $A_i = \int_{-1}^{+1} l_i(x) dx$, ya están tabulados.

Para que coincida la integral que queremos calcular con la expresión de Gauss-Legendre debemos realizar un cambio de variable que transforme en intervalo [1, 3] en [-1, 1]. Este cambio es sencillo ya que es una simple traslación:

$$y = x - 2 \Rightarrow dy = dx \left\{ \begin{matrix} si \quad x = 1 & \Rightarrow & y = -1 \\ si \quad x = 3 & \Rightarrow & y = 1 \end{matrix} \right\} \Rightarrow \quad I = \int_1^3 \frac{dx}{x} = \int_{-1}^1 \frac{dy}{y+2}$$

$$I = \int_{-1}^1 \frac{dy}{y+2} \cong \sum_{i=0}^2 A_i f(y_i) = A_0 f(y_0) + A_1 f(y_1) + A_2 f(y_2)$$

Haciendo uso de la tabla de Gauss-Legendre, con $y_0 = -0.774579$, $y_1 = 0$, $y_2 = 0.774579$, $A_0 = A_2 = 5/9$ y $A_1 = 8/9$:

$$I = \frac{5}{9} f(-0.774579) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f(0.774597) =$$

$$= \frac{5}{9} \frac{1}{2 - 0.774597} + \frac{8}{9}\frac{1}{2} + \frac{5}{9} \frac{1}{2 + 0.774597} = 1.098039$$

Cálculo del error cometido.

Para conocer el número de cifras exactas que tenemos en el resultado anterior, debemos evaluar la expresión del resto de la integración

$$r = \frac{f^{2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!} \int_a^b p(x) w_{n+1}^2(x) dx$$

Con $n = 2 \Rightarrow w_{n+1}(x) = w_3(x)$, y como $P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \Rightarrow P_3(x) = \frac{5}{2} w_3(x)$

Como $p(x)=1$, la integral del resto queda en la forma:

$$\int_a^b p(x) w_{n+1}^2(x) dx = \int_{-1}^{+1} w_{n+1}^2(x) dx = \int_{-1}^1 \left(\frac{2}{5}\right)^2 P_3^2(x) dx = \frac{4}{25}\,\frac{2}{7}$$

ya que

$$\int_{-1}^{+1} P_m^2(x) dx = \frac{2}{2m+1}$$

Una vez calculada la integral que aparece en la expresión del resto, para evaluar el error cometido en la integración, debemos calcular la derivada sexta de la función que integramos:

$$f = (y+2)^{-1} \Rightarrow \quad f' = -(y+2)^{-2} \Rightarrow \quad f'' = 2(y+2)^{-3} \Rightarrow \quad f''' = -3\,!\,(y+2)^{-4} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow f^{IV} = 4!\,(y+2)^{-5} \Rightarrow f^{V} = -5!\,(y+2)^{-6} \Rightarrow \quad f^{VI} = 6!\,(y+2)^{-7} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow r = \frac{1}{6!}\frac{6!}{(\eta+2)^7}\frac{4}{25}\frac{2}{7}$$, que tiene su valor máximo con $\eta = -1 \Rightarrow$

$$|r| \le \left|\frac{8}{175}\right| \approx 0.046 \Rightarrow I = 1.10 \pm 0.05$$

Finalmente, calculamos el valor exacto para comparar con el numérico que acabamos de obtener:

$$I_{\text{analítica}} = \int_1^3 \frac{dx}{x} = \ln x\Big]_1^3 = \ln 3 = 1.0986$$

que cae dentro del intervalo de error del cálculo numérico realizado previamente.

Ejemplo 2. Evaluar $\int_0^\infty x^7 e^{-x} dx$, mediante el método de Gauss con 3 abscisas (n=2).

Dado que aparece en le integrando la función peso e^{-x}, utilizamos la cuadratura de Gauss-Laguerre. Con $f(x)= x^7$ y n=2,

$$\left.\begin{aligned} x_0 &= 0.415775 \\ x_1 &= 2.294280 \\ x_2 &= 6.289945 \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$I = \int_0^\infty x^7 e^{-x} dx = \sum_{i=0}^{2} A_i f(x_i) = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) =$$

$$=0.711093\cdot(0.415775)^7 + 0.278518\cdot(2.294280)^7 + 0.010389\cdot(6.289945)^7 = 4139.8997$$

Evaluación del error cometido.

La evaluación del error cometido para por la estimación de la expresión

$$r = \frac{f^{2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_a^b p(x) w_{n+1}^2(x) dx$$

Con n=2, el polinomio asociado es $L_3(x) = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6 \Rightarrow w_3(x) = -L_3(x)$.

Y como $\int_0^\infty e^{-x} L_m^2(x) dx = (m!)^2 \Rightarrow \int_a^b p(x) w_{n+1}^2(x) dx = \int_0^\infty e^{-x} L_3^2(x) dx = (3!)^2$

Calculamos la derivada sexta de la función $f(x)=x^7$:

$$f' = 7x^6 \Rightarrow f'' = 7\cdot 6x^5 \Rightarrow f''' = 7\cdot 6\cdot 5x^4 \Rightarrow f^{IV} = 7\cdot 6\cdot 5\cdot 4x^3 \Rightarrow f^{V} = 7\cdot 6\cdot 5\cdot 4\cdot 3x^2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow f^{VI} = 7\cdot 6\cdot 5\cdot 4\cdot 3\cdot 2x = 7!\, x$$

Con todo lo anterior:

$$|r| = \frac{7!\,\eta}{6!}(3!)^2 = 252\eta \text{ que no puede ser acotado con } \eta \in [0,\infty].$$

No nos sorprendería una diferencia sustancial entre los valores exactos y la estimación numérica que hemos realizado.

Cálculo con n =3.

En este caso particular, si pasamos a n=3, el error es proporcional a $f^{VIII}(\eta)$=0, ya que $f^{VII}(\eta)$=7! es una constante $\Rightarrow$ ¡Obtendríamos un valor exacto con 4 abscisas! Pero este resultado no nos debe extrañar ya que la cuadratura de Gauss utiliza un polinomio de interpolación de grado 2n+1 para aproximar la función que integramos. En nuestro caso, al ser la función un polinomio de grado 7, queda perfecta y exactamente reproducida por el polinomio de interpolación y el resultado de la integral debe de ser exacto.

El valor exacto viene dado por

$$I = \sum_{i=0}^{3} A_i f(x_i) = 0.603154\cdot(0.322548)^7 + 0.357419\cdot(1.745761)^7 +$$
$$+ 0.38888\cdot(4.536620)^7 + 0.000539\cdot(9.395071)^7 = 5038.101$$

El valor exacto viene dado por:

De $\int_0^\infty x^n e^{-ax}dx = \frac{\Gamma(n+1)}{a^{n+1}} = \frac{n!}{a^{n+1}}$, ya que si n es entero, $\Gamma(n+1) = n! \Rightarrow$

$$\Rightarrow \int_0^\infty x^7 e^{-x} dx = 7! = 5040$$

que no coincide exactamente con el valor numérico anterior debido a que las abscisas y pesos tabulados están expresados con un número finito de dígitos.

4.5. Derivación numérica.

4.5.1. Planteamiento general.

El problema que abordamos en este apartado es el siguiente: Conocidos n+1 valores de la función $f(x)$ en el intervalo $[a,b]$, hallar el valor de la derivada de μ-ésima de la función, $f^{\mu)}(x)$, en un punto de dicho intervalo y estimar el error cometido. Lógicamente, para abordar este problema es necesario suponer que $f(x)$ es μ veces derivable y sus derivadas son continuas.

Como en el caso de la integración numérica, abordaremos el problema de la derivación numérica a través de la interpolación, aproximando la función $f(x)$ a través de una función de interpolación $g(x)$; es decir

$$f(x) = g(x) + R(x)$$

con $R(x)$ el error de la interpolación.

En su forma más general

$$f(x) = \underbrace{\sum_{i=0}^{n} f(x_i)\delta_i(x)}_{g(x)} + R(x) \qquad \text{con } \delta_i(x_j) = \delta_{ij}\text{, la delta de Kronecker.}$$

Derivando μ veces la expresión anterior:

$$f^{\mu)}(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\underbrace{\delta_i^{\mu)}(x)}_{A_i(x)} + \underbrace{R^{\mu)}(x)}_{r(x)}$$

Llamando $\boxed{A_i(x) = \delta_i^{\mu)}(x)}$ y $r(x) = R^{\mu)}(x) \Rightarrow \boxed{f^{\mu)}(x) = \sum_{i=0}^{n} A_i(x) f(x_i) + r(x)}$

Habiéndose reducido el problema de la interpolación al cálculo de n coeficientes $A_i(x)$, dependientes del punto donde se hace la derivada, y que se obtienen derivando μ veces una función conocida.

4.5.2. Cálculo de los $A_i(x)$ mediante los polinomios de interpolación de Lagrange.

Haciendo $\delta_i(x) \equiv l_i(x)$, siendo $l_i(x)$ el correspondiente polinomio de Lagrange, los coeficientes $A_i(x)$ que intervienen en la derivación numérica, toman la forma

$$A_i(x) = \frac{d^\mu}{dx^\mu} l_i(x) = l_i^{\mu)}(x) \quad \text{con} \quad l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Y encontrar la función $f^{\mu)}(x)$ se reduce a calcular la derivada de polinomios.

4.5.3. Evaluación del resto.

El error en la derivación viene dado por $r(x) = \frac{d^\mu}{dx^\mu} R(x)$, donde $R(x)$ es el resto de la interpolación de Lagrange,

$$R(x) = \frac{f^{n+1)}(\xi)}{(n+1)\;!} w_{n+1}(x), \text{ con } \xi \in [x_0, x_n] \Rightarrow$$

$$r(x) = R^{\mu)}(x) = \frac{d^\mu}{dx^\mu}\left[\frac{f^{n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x)\right]$$

El problema de llevar a cabo la derivada anterior reside en el hecho de que no sabemos la dependencia $\xi = \xi(x)$. Habitualmente elegimos ξ para obtener el mayor valor de $R(x)$, de forma que el error cometido quede acotado. Para evaluar la anterior derivada vamos a cambiar temporalmente ξ por x, realizaremos la derivada y posteriormente deshacemos el cambio para poder elegir ξ como el punto que maximice la expresión encontrada ⇒

$$r(x) \approx \frac{d^\mu}{dx^\mu}\left[\frac{f^{n+1)}(x)}{(n+1)!}w_{n+1}(x)\right]$$

Utilizando la fórmula de Leibniz para la derivada k-ésima de un producto:

$$\frac{d^k}{dx^k}(uv) = \sum_{i=0}^{k}\binom{k}{i}\frac{d^i}{dx^i}u\ \frac{d^{k-i}}{dx^{k-i}}v\,,$$

$$r(x) \approx \frac{1}{(n+1)!}\sum_{i=0}^{\mu}\binom{\mu}{i}w_{n+1}^{i)}(x)f^{n+1+\mu-i)}(x)$$

Si deshacemos el cambio, el error vendrá dado por

$$r(x) = \frac{1}{(n+1)!}\sum_{i=0}^{\mu}\frac{\mu!}{i!(\mu-i)!}w_{n+1}^{i)}(x)f^{n+1+\mu-i)}(\xi_i)$$

donde $\xi_i \in$ [a,b] es el punto que hace máxima la derivada $f^{n+1+\mu-i)}$. Aunque hayamos encontrado la expresión final para el resto de la derivación numérica que aparece en la mayoría de los libros que tratan sobre el tema, no deberemos de dejar de observar la contradicción que entraña el hecho de que para obtener el error cometido al evaluar una derivada numéricamente, necesitemos conocer derivadas analíticas de mayor grado.

- Particularización de $r(x)$ para la 1ª derivada (μ=1)

  Para $\mu = 1$

$$r(x) = \frac{1}{(n+1)!}w_{n+1}(x)f^{n+2)}(\xi_0) + \frac{1}{(n+1)!}w'_{n+1}(x)f^{n+1)}(\xi_1)$$

y debemos conocer la derivada de orden n+1 y n+2 (¡?).

Para puntos tabulares $\{x_j\}_{j=0,\dots,n}$, la función $w_{n+1}(x)$ se anula ya que por definición $w_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$, quedando solamente el segundo sumando de la expresión anterior para el error; esto es

$$r(x_j) = \frac{1}{(n+1)!}w'_{n+1}(x_j)f^{n+1)}(\xi_1)$$

obteniéndose, para este caso y estos puntos tabulares, la misma expresión que se obtendría si ξ fuese una constante independiente de x. Recalcamos el hecho de que para conocer el error la primera derivada en un conjunto de n+1 puntos, se necesite conocer la derivada de orden n+1 de la función.

Los errores que se cometen en la evaluación de la derivada de una función suelen ser bastante grandes y pueden aumentar a medida que aumenta el orden de la derivada, ya que aunque los valores de $f(x)$ y $g(x)$ están próximos, sus derivadas no tienen porqué estarlo.

4.5.4. Relación entre derivación numérica y las diferencias finitas y divididas.

Existe una relación entre la derivada n-ésima de una función y sus diferencias divididas y diferencias finitas. Esta relación la podemos establecer de manera general de la siguiente forma:

Con $f(x) \cong L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f[x_0,\dots,x_i]\prod_{j=0}^{i-1}(x-x_j)$, tomando la derivada n-ésima $\Rightarrow$

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} \cong L_n^{n)}(x) = \frac{d^n}{dx^n}\left(\sum_{i=0}^{n} f[x_0,\dots,x_i]\prod_{j=0}^{i-1}(x-x_j)\right) = f[x_0,\dots x_n]\,n!$$

siendo nulos todos los términos procedentes de la sumatoria, excepto $i=n$, ya que contienen polinomios de orden n o inferior a n y al derivarlos se anulan.

Utilizando el teorema que liga diferencias finitas con diferencias divididas cuando los puntos tabulares están equiespaciados,

$$\Delta^m f_k = m!h^m f\left[x_k,\dots,x_{k+m}\right]$$

que con k=0 y m=n queda

$$\Delta^n f_0 = n!h^n f\left[x_0,\dots,x_n\right]$$

Llevando esta expresión a la de la derivada n-ésima de la función nos queda:

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} \cong f\left[x_0,\dots x_n\right]n! = \frac{\Delta^n f_0}{h^n}$$

que relaciona la derivada con ambos tipos de diferencias.

4.6. Derivación numérica y desarrollo de Taylor. Extrapolación de Richardson.

Paralelamente a como se define la diferencia finita progresiva “hacia delante” (forward), como sabemos, podemos acercarnos numéricamente a la primera derivada a través de su definición, esto es:

$$f'(x) = \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

donde h representa un incremento o intervalo en la variable independiente. Con h suficientemente pequeño:

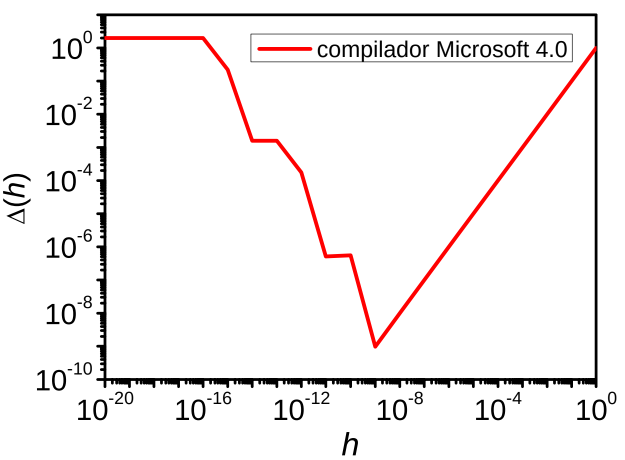
$$f'(x) \simeq \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Esta ecuación no parece presentar graves problemas desde un punto de vista teórico, pero hay que tratarla cuidadosamente desde un punto de vista numérico porque sólo es válida con $h\to 0$ y es conocida la limitación para guardar y trabajar con números pequeños en un ordenador que, en simple precisión, está restringida a números superiores a 10^{-39} y en doble precisión a 10^{-308}.

El error que se comete en la evaluación de $f'(x)$ por la expresión anterior viene dado por

$$\Delta(h) = \left| f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \right|.$$

Este error, cuya forma dependerá del compilador usado, se representa en la gráfica siguiente para un compilador Fortran Microsoft. En su obtención, se ha hecho uso del programa que la acompaña, en simple precisión, para $f(x)=x^2$ y $x=1$.




```
      f(x)=x**2
      fp(x)=2*x
      x=1.0
      open (10,file="salida.dat")
      do i=0,20
      h=10.0**(-i)
      d=abs(fp(x)-(f(x+h)-f(x))/h)
      write (10,100) h,d
      write (*,100) h,d
      end do
      stop
100   format (2(2x,e14.8))
      end
```

En la figura se observa como el error disminuye inicialmente de manera lineal a medida que lo hace h, pero, posteriormente, la reducción de h sólo hace que aumente considerablemente el error y, alcanzado el punto donde $f(x+h)$ no es diferenciada por el ordenador de $f(x)$, el error viene dado por $f'(x)$ en x=1.

En general, para evaluar el error que se comete al aproximar la primera derivada par la expresión de su definición, podemos hacer uso del desarrollo de Taylor

$$f(x+h)=f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(\xi) \text{ con } \xi\in[x,x+h].$$

De aquí

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

Expresión más útil que la inicial porque además de darnos, en el 1^er^ término del 2º miembro de la ecuación, el valor aproximado de la derivada, nos da un 2º término que permite estimar el error que se comete. El termino del error consta de dos partes, una potencia de h que nos dice que el error sería menor a medida que $h\to 0$ y un factor que depende de una derivada superior y del que difícilmente podemos tener información si desconocemos la primera derivada que estamos evaluando.

Ahora bien, esta técnica puede ayudarnos a encontrar fórmulas con menos error para la primera derivada y expresiones para evaluar derivadas de órdenes superiores. Basándonos en la expresión de la derivada centrada

$$f'(x)=\lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h},$$

y en los desarrollos de Taylor

$$f(x+h)=f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(\xi)+\frac{h^3}{6}f'''(\xi_+) \text{ con } \xi_+\in[x,x+h]$$
$$f(x-h)=f(x)-hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(\xi)-\frac{h^3}{6}f'''(\xi_-) \text{ con } \xi_-\in[x-h,x]$$

Restando las ecuaciones anteriores

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}-\frac{h^2}{12}\left(f'''(\xi_+)+f'''(\xi_-)\right)$$

Si las derivadas terceras existen y son continuas, existirá un punto $\xi\in[x-h,x+h]$ tal que

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}-\frac{h^2}{6}f'''(\xi)$$

Como podemos apreciar, además de un primer término para la evaluación de la primera derivada, el segundo miembro contiene un término de error pero proporcional a h^2, lo que nos indica una mayor precisión que en el caso anterior en el que el error era proporcional a h.

Si añadimos un término más a los desarrollos de Taylor anteriores y, en lugar de restar, sumamos, se obtiene

$$f''(x+h)=\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{IV}(\xi) \text{ con } \xi\in[x-h,x+h],$$

Expresión que permite evaluar la 2ª derivada de manera aproximada. Estas expresiones, por otro lado, son totalmente paralelas a las desarrolladas con diferencias finitas y, tal como hicimos allí, podemos evaluar derivadas de orden superior a partir de las derivadas anteriores.

Basada en los desarrollos de Taylor con los que acabamos de trabajar, la extrapolación de Richardson permite obtener la derivada de una función incrementando la precisión, tal como veremos a continuación. Partimos, de nuevo, de los desarrollos de Taylor que podemos expresar como

$$f(x+h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} h^k f^{(k)}(x)$$
$$f(x-h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-1)^k h^k f^{(k)}(x)$$

Si restamos ambas ecuaciones, tal como hemos hecho antes, desaparecerán todos los términos *k* pares quedando

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + \frac{2h^3}{3!} f'''(x) + \frac{2h^5}{5!} f^{V}(x) + \cdots = 2h\sum_{k=0}^{\infty} \frac{h^{2k}}{(2k+1)!} f^{(2k+1)}(x),$$

y de aquí podemos obtener la derivada que viene dada por

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{h^{2k}}{(2k+1)!} f^{(2k+1)}(x),$$

donde el término de mayor error viene dado por $k=1$, esto es $\frac{h^2}{3!} f'''(x)$.

Vamos a ver que es posible eliminar este término. Para ello volvemos a desarrollar la ecuación anterior, pero tomando un paso mitad $\frac{h}{2}$, obteniéndose

$$f'(x) = \frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})}{h} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\left(\frac{h}{2}\right)^{2k}}{(2k+1)!} f^{(2k+1)}(x) =$$
$$= \frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})}{h} - \frac{\left(\frac{h^2}{4}\right)}{3!} f'''(x) - \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\left(\frac{h}{2}\right)^{2k}}{(2k+1)!} f^{(2k+1)}(x)$$

Si multiplicamos esta ecuación por 4 y le restamos la anterior, se obtiene

$$4f'(x)-f'(x)=4\left(\frac{f(x+\frac{h}{2})-f(x-\frac{h}{2})}{h}\right)-\left(\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}\right)-$$

$$-4\sum_{k=2}^{\infty}\frac{\left(\frac{h}{2}\right)^{2k}}{(2k+1)!}f^{(2k+1)}(x)+\sum_{k=2}^{\infty}\frac{h^{2k}}{(2k+1)!}f^{(2k+1)}(x)$$

Finalmente, dividiendo por 3 y reagrupando

$$f'(x)=\frac{4}{3}\left(\frac{f(x+\frac{h}{2})-f(x-\frac{h}{2})}{h}\right)-\frac{1}{3}\left(\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}\right)-\frac{1}{3}\sum_{k=2}^{\infty}\frac{4-4^k}{4^k}\frac{h^{2k}}{(2k+1)!}f^{(2k+1)}(x),$$

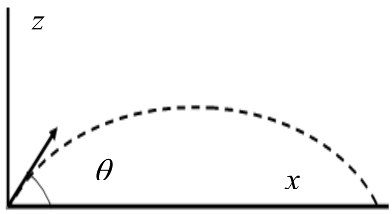
donde ahora el término de mayor error es proporcional a h^4. Por tanto la expresión

$$f'(x)\simeq\frac{4}{3}\left(\frac{f(x+\frac{h}{2})-f(x-\frac{h}{2})}{h}\right)-\frac{1}{3}\left(\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}\right)$$

nos facilita la derivada con una mayor precisión que expresiones anteriores.

Este procedimiento puede repetirse de manera indefinida, siempre con la intención de eliminar el término existente con la mayor potencia de h. Así, si la expresión anterior para $f'(x)$ se evalúa en h y en $\frac{h}{2}$, podemos combinarlas adecuadamente para eliminar el término de h^4.

Ejemplo. Simulación de la trayectoria de un proyectil.



Supongamos que se lanza un proyectil con velocidad $\vec{v}_0$ desde el origen de coordenadas. Para calcular su trayectoria deberemos resolver las ecuaciones del movimiento

$$\frac{d\vec{r}}{dt}=\vec{v},\quad \frac{d\vec{v}}{dt}=\vec{a}$$

donde $\vec{r}=x\hat{x}+z\hat{z}$, $\vec{v}=v_x\hat{x}+v_z\hat{z}$, por ser un problema bidimensional y la aceleración viene dada por la segunda ley de Newton, $\vec{F}=m\vec{a}=-mg\,\hat{z}-\frac{1}{2}C\rho A|\vec{v}|\vec{v}\ \Rightarrow$ $\vec{a}=-g\,\hat{z}-\frac{1}{2}\frac{C\rho A}{m}|\vec{v}|\vec{v}$, donde, además de la acción de la gravedad, se ha incluido el rozamiento del aire. En este último término, ρ es la densidad del aire, A la sección transversal del proyectil y C el coeficiente de rozamiento. Este coeficiente, adimensional, es bastante complejo y depende de la propia velocidad del proyectil y del posible movimiento de rotación con que se desplace; pero en nuestro caso, por sencillez, lo consideraremos constante y de valor $C = 0.35$. Para ρ tomaremos el valor 1.2 kg/m^3, m = 1 kg y $A = 4.76 \cdot 10^{-3}$ m^2, de forma que $\frac{1}{2}\frac{C\rho A}{m} = 10^{-3}$.

Para el caso de que no se considere el rozamiento del aire, el problema es simple y puede ser calculado analíticamente. Con $\vec{a} = -g\,\hat{z}$, las ecuaciones del movimiento quedan

$$\left.\begin{array}{c} \dfrac{d\vec{v}}{dt} = -g\,\hat{z} \\ \dfrac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} \dfrac{dv_x}{dt} = 0 \Rightarrow v_x = cte \Rightarrow v_x = v_{x_0} \\ \dfrac{dv_z}{dt} = -g \Rightarrow v_z = v_{z_0} - gt \\ \dfrac{dx}{dt} = v_x \Rightarrow x = x_0 + v_{x_0} t \\ \dfrac{dz}{dt} = v_z \Rightarrow z = z_0 + v_{z_0} t - \dfrac{1}{2} g t^2 \end{array}\right.$$

que con $x_0 = z_0 = 0, v_{x_0} = v_0 \cos\theta, v_{z_0} = v_0 \sin\theta$, hace que las componentes de la trayectoria vengan dadas por

$$x = (v_0 \cos\theta)\, t$$

$$z = (v_0 \sin\theta)\, t - \frac{1}{2} g t^2$$

A partir de estas expresiones, podemos calcular el tiempo de vuelo haciendo $z = 0$ y, con el tiempo de vuelo, el valor máximo de x. También, a partir de $v_z = \frac{dz}{dt} = 0$, se puede calcular el tiempo en que se alcanza la máxima altura o el ángulo ($\theta = 45$º) con el que se alcanza un mayor desplazamiento horizontal, derivando el valor máximo de x respecto de θ.

Pero, si consideramos el rozamiento del aire, el problema no puede ser resuelto analíticamente y tenemos que recurrir a técnicas numéricas. Para ello vamos a resolver la pareja de ecuaciones diferenciales acopladas

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}, \quad \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{a},$$

aproximando las derivadas por la primera expresión que vimos en este apartado; esto es:

$$\frac{\vec{r}(t+\tau) - \vec{r}(t)}{\tau} \simeq \vec{v}(t), \quad \frac{\vec{v}(t+\tau) - \vec{v}(t)}{\tau} \simeq \vec{a}(t)$$

Numéricamente, vamos a calcular la posición del proyectil en los tiempos $t_n = n\tau$, con $n = 0, 1, 2,\ldots$, por lo que introducimos la notación $f(t_n) = f_n$. Con esta notación las ecuaciones toman la forma

$$\left.\begin{array}{l}\dfrac{\vec{v}_{n+1}-\vec{v}_n}{\tau}=\vec{a}_n \\ \dfrac{\vec{r}_{n+1}-\vec{r}_n}{\tau}=\vec{v}_n\end{array}\right\} \Rightarrow \begin{cases}\vec{v}_{n+1}=\vec{v}_n+\tau\vec{a}_n \\ \vec{r}_{n+1}=\vec{r}_n+\tau\vec{v}_n\end{cases}$$

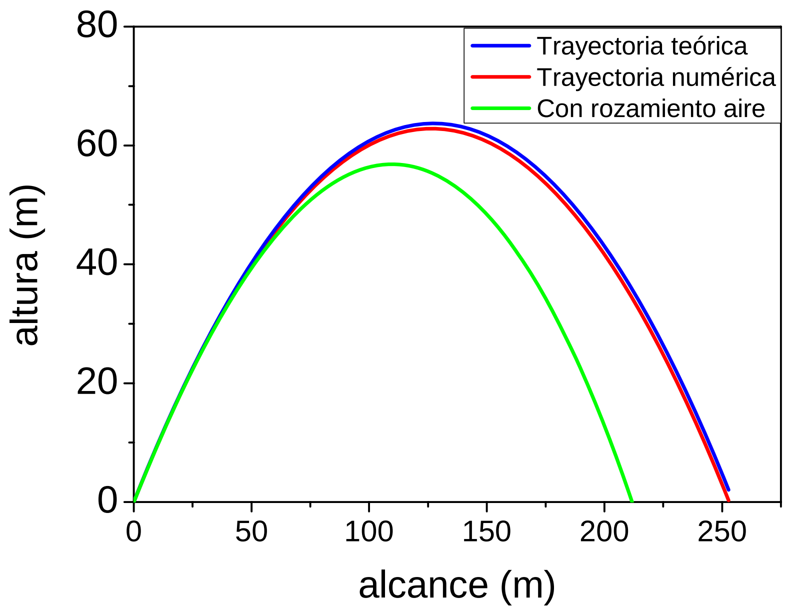
que con

$$a_x=-\frac{1}{2}\frac{C\rho A}{m}\left(v_x^2+v_z^2\right)^{1/2} v_x$$
$$a_z=-g-\frac{1}{2}\frac{C\rho A}{m}\left(v_x^2+v_z^2\right)^{1/2} v_z$$

pueden ser descompuestas en sus componentes

$$(v_x)_{n+1}=(v_x)_n+\tau\left[-\frac{1}{2}\frac{C\rho A}{m}\left((v_x)_n^2+(v_z)_n^2\right)^{1/2}(v_x)_n\right]$$
$$(v_z)_{n+1}=(v_z)_n+\tau\left[-g-\frac{1}{2}\frac{C\rho A}{m}\left((v_x)_n^2+(v_z)_n^2\right)^{1/2}(v_z)_n\right]$$
$$x_{n+1}=x_n+\tau(v_x)_n$$
$$z_{n+1}=z_n+\tau(v_z)_n$$

Formándose así un proceso escalonado en el tiempo en el que, a partir de los valores iniciales, calculamos velocidad y posición para el tiempo t_1, con estos valores pasamos a calcular para el siguiente intervalo, y así sucesivamente hasta que alcancemos un valor negativo para z que nos indicará que el proyectil ha tomado tierra. El siguiente programa Fortran implementa este proceso iterativo, tanto con rozamiento como si él, y los resultado se muestran en la figura junto con los valores analíticos sin rozamiento, con v_0 = 50 m/s, θ = 45º y τ = 0.01 s. El número de intervalos temporales resultantes son 143 para el caso sin rozamiento y 136 para el caso con rozamiento.



```
      CpA2m=-1.0E-3 !0.0
      g=9.81
      tau=0.05
      v0=50
      th=atan(1.)
      vx=v0*cos(th)
      vz=v0*sin(th)
      x=0.0
      z=0.0
      k=0  !contador de iteraciones
      open (10,file='trayectoriath.dat')
      open (11,file='trayectoria.dat')
      do while (z.ge.0.0)
      t=k*tau
      xtheorica=v0*cos(th)*t
      ztheorica=v0*sin(th)*t-0.5*g*t**2
      write(10, 200) xtheorica, ztheorica
      write(*, 100) k,t,vx,vz,x,z
      write(11, 100) k,t,vx,vz,x,z
      vx=vx+tau*CpA2m*vx*sqrt(vx**2+vz**2)
      vz=vz+tau*(-g+CpA2m*vz*sqrt(vx**2+vz**2))
      x=x+tau*vx
      z=z+tau*vz
      k=k+1
      end do
      stop
100   format(2x,i6,2x,5(e12.6,2x))
200   format(2(2x,e12.6))
      end
```