

FÍSICA E INSTRUMENTACIÓN ESPACIAL

CÁLCULO NUMÉRICO

# Resolución Numérica de la Ecuación de Schrödinger



ABRIL 2024

Autores:

Víctor Ávila Camargo

José Ignacio Miguel Rodríguez

Javier Zaragozano Calvo

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>2</b>
1.1. Deducción de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo . . . . .	2
1.2. Interpretación de la ecuación de Schrödinger y sus soluciones . . . . .	2
<b>2. Métodos de derivación numérica</b>	<b>4</b>
2.1. Método de las diferencias finitas . . . . .	4
2.1.1. Diferencial de primer orden . . . . .	4
2.1.2. Diferencial de segundo orden . . . . .	6
2.1.3. Error de aproximación en el método de las diferencias finitas . . . . .	7
2.2. Aproximación de la ecuación de Schrödinger . . . . .	7
<b>3. Métodos de integración numérica</b>	<b>9</b>
3.1. Regla del punto medio . . . . .	9
3.1.1. Regla del punto medio simple . . . . .	9
3.1.2. Regla del punto medio compuesta . . . . .	11
3.1.3. Error de aproximación en la regla del punto medio . . . . .	12
3.2. Regla de los trapecios . . . . .	12
3.2.1. Error de aproximación en la regla de los trapecios . . . . .	12
3.3. Regla de Simpson . . . . .	12
3.3.1. Regla de Simpson simple . . . . .	13
3.3.2. Generalización de la regla de Simpson simple . . . . .	14
3.3.3. Regla de Simpson compuesta . . . . .	15
3.3.4. Error de aproximación en la regla de Simpson . . . . .	15

## 1. Introducción

La ecuación de Schrödinger es una de las ecuaciones más famosas e importantes de la Física Cuántica. La ecuación de Schrödinger de 1 dimensión en su forma más general es:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H} \Psi(x, t) \quad (1)$$

Donde  $\hat{H}$  es el Hamiltoniano del sistema.

Esta ecuación tiene numerosas variantes. En este artículo, nos centraremos en resolver una de sus variantes, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que, como su propio nombre indica, el tiempo no aparece como variable independiente. Esta ecuación se puede obtener a partir de la ecuación descrita arriba, veámoslo.

### 1.1. Deducción de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

Sea el Hamiltoniano de un sistema cualquiera:  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$ . Si consideramos que es independiente del tiempo,  $V(x, t)$  tiene que ser también independiente del tiempo ya que es el único término del Hamiltoniano con dependencia temporal. Con lo cual  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$

Nuestro objetivo es dejar un lado de la ecuación en función de  $t$  y el otro en función de  $x$ . Al ser una ecuación diferencial, vamos a usar el método de separación de variables. Entonces:  $\Psi(x, t) = g(t)\psi(x)$ . Y nuestra ecuación queda:

$$i\hbar \psi(x) \frac{d}{dt} g(t) = g(t) \hat{H} \psi(x) \quad (2)$$

Como el Hamiltoniano es independiente del tiempo podemos mover libremente  $g(t)$  porque no va a operar sobre él. Multiplicando ambos lados por  $\frac{1}{g(t)\psi(x)}$  obtenemos:

$$i\hbar g(t) \frac{d}{dt} g(t) = \psi(x) \hat{H} \psi(x) \quad (3)$$

Como cada lado depende de una variable distinta, la igualdad se cumplirá sí y solo sí el resultado es igual a una constante la cual llamaremos  $E$ . Entonces por un lado tenemos:

$$\frac{d}{dt} g(t) = -\frac{i}{\hbar} E g(t) \quad (4)$$

Lo que nos da como solución:  $g(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$

Por otro lado tenemos:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (5)$$

Esta es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y es la que nos centraremos en resolver en este artículo. La ecuación se puede abreviar del siguiente modo:  $\hat{H} \psi(x) = E \psi(x)$  y vemos que es una ecuación de autovalores donde  $E$  se corresponde con el autovalor de  $\hat{H}$ .

Sin embargo, resolver esta ecuación no es nada fácil y, por ello, será necesario emplear métodos numéricos, los cuales serán descritos en detalle en las secciones posteriores, para encontrar una solución aproximada.

Una inquietud que le puede surgir al lector es qué interpretación tiene las soluciones que se obtengan. Así que vamos a intentar esclarecer esta duda en el siguiente apartado

### 1.2. Interpretación de la ecuación de Schrödinger y sus soluciones

Las soluciones que obtenemos son funciones de onda que van asociadas a la partícula que queremos describir. Esto es debido a la dualidad onda-partícula que caracteriza a todas las partículas

del Universo. Sin embargo, no podemos ver estas funciones de onda del modo clásico, tenemos que verlas como funciones de probabilidad que nos indican en qué zonas es más probable que se encuentre la partícula. Esta función de probabilidad se puede describir como:  $dP(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 dV$ . Esto es la probabilidad de encontrar una partícula en un fragmento de volumen infinitesimal. Al ser una función de probabilidad cumple que:  $\int_{\text{espacio}} |\Psi(x, t)|^2 d^3x = 1$ .

Por otro lado, también encontramos valores de  $E$  asociados a la función y al Hamiltoniano. Para ver lo que significan las  $E$  que obtenemos, vamos a calcular el valor esperado de  $\hat{H}$ :

$$\begin{aligned}\langle \hat{H} \rangle_{\Psi(x, t)} &= \int \Psi(x, t)^* \hat{H} \Psi(x, t) dx = \\ &= \int \Psi(x, t)^* E \Psi(x, t) dx = E\end{aligned}\tag{6}$$

Por definición del valor esperado de  $\hat{H}$ , sabemos que representa la energía total del sistema. Es decir, los autovalores que obtengamos al resolver la ecuación nos darán un valor para la energía del sistema.

Una vez hechas todas estas aclaraciones introductorias, ya podemos comenzar con la descripción de todos los métodos numéricos y también podemos ver las soluciones obtenidas.

## 2. Métodos de derivación numérica

### 2.1. Método de las diferencias finitas

El método de diferencias finitas (FDM) es un método de aproximación para resolver ecuaciones diferenciales, su principio fundamental es transformar una ecuación diferencial en un sistema de ecuaciones algebraicas que podamos resolver. El principio del método de diferencias finitas fue desarrollado por primera vez por el excelentísimo matemático L. Euler (1707-1783), quien en 1768 dio un formato diferencial para problemas unidimensionales. En 1908, C. Runger (1856-1927) extendió el método de la diferencia a problemas bidimensionales. Sin embargo, en aquellos días, convertir la solución de ecuaciones diferenciales en la solución de un gran número de ecuaciones algebraicas era sin duda transformar un problema en otro, por lo que no se usaba ampliamente. Con el desarrollo de la tecnología informática, es posible resolver de forma rápida y precisa enormes ecuaciones algebraicas, por lo que poco a poco se ha ido utilizando ampliamente.

Este método nos será de gran utilidad ya que si queremos resolver la ecuación de Schrödinger

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (7)$$

Nada más y nada menos que en el primer término ya nos encontramos una derivada segunda, lo que convierte nuestro problema en resolver una ecuación diferencial. Nuestro objetivo será aproximar esta derivada segunda por el método propuesto para que seamos capaces de computar nuestra ecuación obtener soluciones, más tarde estudiaremos el impacto de realizar esta aproximación y error que conlleva aplicarla.

El método de diferencias finitas consiste en discretizar el espacio en el que estemos trabajando y así transformar la distancia infinitesimal entre puntos de las derivadas en una distancia  $h$ . Por tanto dividimos un intervalo  $[a, b]$  donde la función sea continua  $N$  veces, el espacio entre los puntos que nos queden lo llamaremos distancia de paso ( $h$ ) y el tamaño de este nos dará la precisión de nuestra aproximación como veremos más adelante.

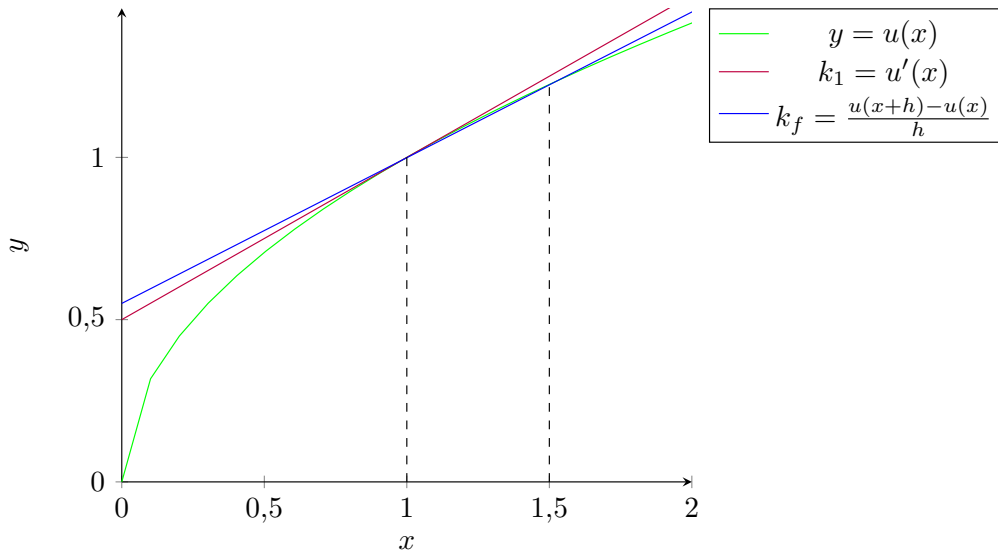
Este concepto puede hacerse más sencillo de comprender al ver la siguiente figura:



#### 2.1.1. Diferencial de primer orden

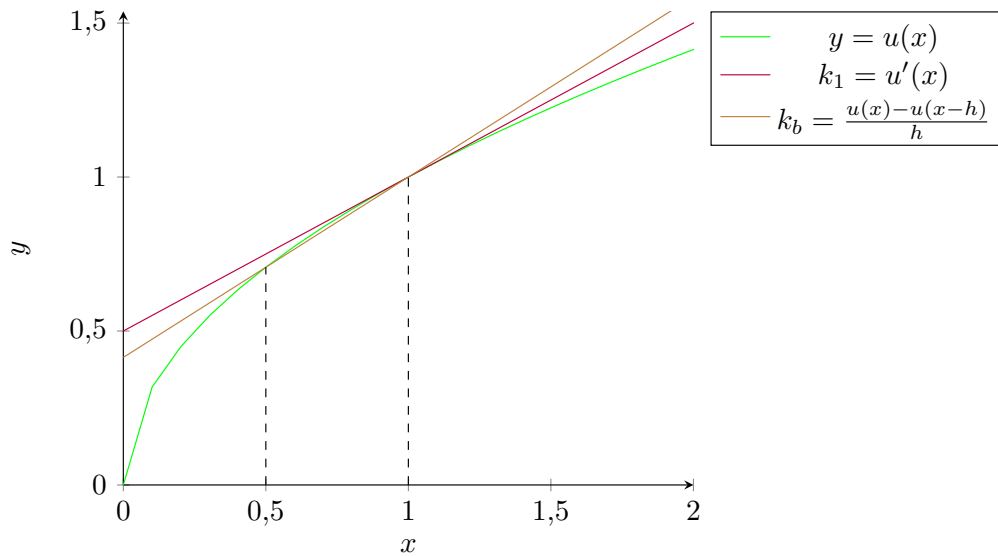
Para obtener una aproximación de la diferenciación en este nuevo espacio lo que nos viene a la mente es la definición de derivada, que la aproximaremos de la siguiente manera:

$$u'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x+h) - u(x)}{h} \approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h} \quad (8)$$



La recta roja corresponde a la derivada de la función  $\sqrt{x}$  en el punto  $x = 1$ , mientras que la recta azul corresponde a la de nuestra aproximación con paso  $h = 1$ . Como se puede observar es realmente parecido y según hagamos el paso más pequeño esta diferencia se hará menor.

Se nos puede ocurrir otra aproximación de la derivada, en vez de aproximarla con el punto siguiente podríamos tratar de aproximarla con el punto anterior.



Por lo tanto, aquí primero necesitamos discretizar el dominio de la solución y luego obtener la aproximación diferencial en cada punto discreto por separado. Para el problema unidimensional divide el intervalo de la solución en partes iguales.

La forma discreta de la ecuación (8) se expresa como:

$$u'_i(x) = \frac{1}{h}(u_{i+1} - u_i) \quad (9)$$

y la misma, pero utilizando el punto anterior y no el siguiente:

$$u'_i(x) = \frac{1}{h}(u_i - u_{i-1}) \quad (10)$$

Demostraremos ahora de donde salen estas fórmulas que tan hábilmente se nos han ocurrido.

Para la derivada de primer orden si aproximamos por Taylor:

$$u(x+h) = u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) + \frac{h^3}{6}u^{(3)}(x+\xi)$$

donde  $\xi \in (0, h)$ . La fórmula de la diferencia directa para el diferencial de primer orden se puede obtener deformando la ecuación anterior:

$$u'_F(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h} - \frac{h^2}{2}u''(x+\xi) \quad (11)$$

Ahora si aproximamos por Taylor  $u(x-h)$ :

$$u(x-h) = u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) - \frac{h^3}{6}u^{(3)}(x+\xi)$$

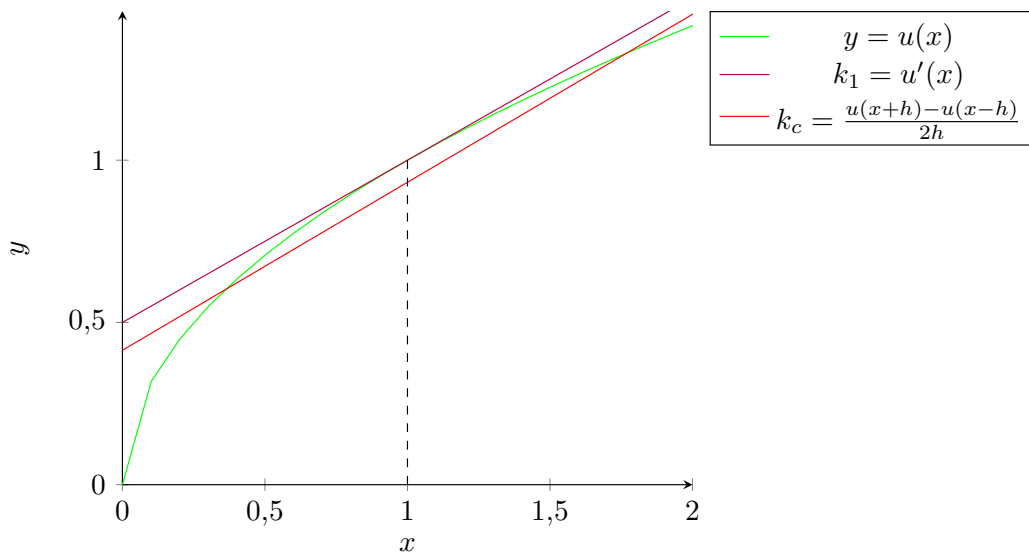
donde  $\xi \in (0, h)$ , si deformamos la ecuación de forma similar al caso anterior obtenemos:

$$u'_B(x) = \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + \frac{h^2}{2}u''(x+\xi) \quad (12)$$

Si juntamos ambas ecuaciones obtenemos la fórmula de la diferencia central para el diferencial de primer orden

$$u'_C(x) = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}u^{(3)}(x+\xi) \quad (13)$$

Dado que el error aquí es relativo al tamaño del paso, se puede ver que las fórmulas de la diferencia hacia adelante y hacia atrás tienen una precisión de aproximación de primer orden  $O(h)$ , mientras que la diferencia central tiene una precisión de aproximación de segundo orden  $O(h^2)$ , es por esto que nos interesa juntar ambas ecuaciones (cuanto mayor sea el orden, antes tiende el error a cero). Para el caso anterior obtendríamos la siguiente aproximación:



Vemos como la pendiente de las rectas es mucho más similar que en los casos anteriores, por tanto, es coherente con nuestra demostración sobre la precisión de esta nueva aproximación de la derivada.

### 2.1.2. Diferencial de segundo orden

Para nuestra ecuación, sin embargo, no necesitamos obtener una aproximación de la derivada de primer orden si no de la de segundo orden. Por tanto, trabajaremos ahora con la demostración de esta.

Como anteriormente realizamos la expansión de Taylor:

$$u(x+h) = u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) + \frac{h^3}{6}u^{(3)}(x) + \frac{h^4}{12}u^{(4)}(x+\xi)$$

Pasando el término  $u''(x)$  a la derecha obtenemos:

$$u''_F(x) = -\frac{2u(x)}{h^2} - \frac{2u'(x)}{h} - \frac{h}{3}u^{(3)}(x) - \frac{h^2}{6}u^{(4)}(x+\xi)h^2 + \frac{2u(x+h)}{h^2} \quad (14)$$

De igual manera obtenemos:

$$u(x-h) = u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) - \frac{h^3}{6}u^{(3)}(x) + \frac{h^4}{12}u^{(4)}(x+\xi)$$

$$u''_B(x) = -\frac{2u(x)}{h^2} + \frac{2u'(x)}{h} + \frac{h}{3}u^{(3)}(x) - \frac{h^2}{6}u^{(4)}(x+\xi)h^2 + \frac{2u(x-h)}{h^2} \quad (15)$$

Juntando ambas obtenemos:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left( -\frac{2u(x)}{h^2} - \frac{2u'(x)}{h} - \frac{h}{3}u^{(3)}(x) - \frac{h^2}{6}u^{(4)}(x+\xi)h^2 + \frac{2u(x+h)}{h^2} - \frac{2u(x)}{h^2} + \right. \\ & \quad \left. + \frac{2u'(x)}{h} + \frac{h}{3}u^{(3)}(x) - \frac{h^2}{6}u^{(4)}(x+\xi)h^2 + \frac{2u(x-h)}{h^2} \right) \rightarrow \\ & \rightarrow u''_C(x) = \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{2h^2} - \frac{h^2}{6}u^{(4)}(x+\xi) \end{aligned} \quad (16)$$

Donde volvemos a apreciar que tenemos una precisión de aproximación de segundo orden relativa al tamaño del paso.

### 2.1.3. Error de aproximación en el método de las diferencias finitas

Si recopilamos los errores de este método de derivación numérica obtenemos:

-Derivada de primer orden: diferencia ordinaria:  $E \leq \frac{M_2}{2}h \sim O(h)$

donde  $M_2 = \max_{x \in [x_0, x_0+h]} |f''(x)|$

-Derivada de primer orden: diferencia central:  $E \leq \frac{M_3}{6}h^2 \sim O(h^2)$

donde  $M_3 = \max_{x \in [x_0-h, x_0+h]} |f'''(x)|$

-Derivada de segundo orden: diferencia ordinaria:  $E \leq \frac{M_4}{12}h^2 \sim O(h^2)$

donde  $M_4 = \max_{x \in [x_0-h, x_0+h]} |f^{(4)}(x)|$

## 2.2. Aproximación de la ecuación de Schrödinger

Si ahora aplicamos esto a nuestra ecuación de Schrödinger:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi$$

Podemos sustituir la derivada segunda por nuestra aproximación, quedando de la siguiente manera:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{i+1}(x) - \psi_i(x) + \psi_{i-1}(x)}{h^2} + V_i(x)\psi_i = E\psi_i(x) \quad (17)$$

Ahora debemos determinar un intervalo  $[a, b]$  que será la región donde resolveremos la ecuación. Esta región la dividiremos en  $N$  subintervalos, resultando en  $N+1$  puntos y siendo  $h$  la distancia entre estos.

El valor de la función en  $x_0$  y en  $x_n$  será 0, ya que la partícula estará confinada en dicho intervalo. Esto será lo que nos dará nuestras condiciones de frontera. Así pues, tendremos que resolver la función en los  $N-1$  puntos restantes.



Nuestra matriz de energía cinética será:

$$T = \frac{-\hbar^2}{2m} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \end{pmatrix} \quad (18)$$

Mientras que la de energía potencial será:

$$V = \begin{pmatrix} V_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & V_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & V_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & V_n \end{pmatrix} \quad (19)$$

Construimos nuestra matriz Hamiltoniana de la siguiente forma:

$$H = T + V \quad (20)$$

Haciendo esto obtenemos el siguiente sistema lineal:

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & V_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & V_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & V_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \\ = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{pmatrix} \quad (21) \end{aligned}$$

Por lo tanto nuestras funciones serán las autofunciones de  $H$  y las energías serán los autovalores asociados a estas autofunciones. No debemos olvidar que estas funciones que obtenemos no tienen porque estar normalizadas.

Para que estas funciones tengan un significado físico, debe cumplirse que  $\int_a^b |\psi(x)|^2 dx = 1$ , ya que de otra forma la probabilidad de encontrar la partícula en nuestro intervalo no sería del 100 % lo cual es imposible ya que la partícula existe y por tanto debe estar dentro de él.

### 3. Métodos de integración numérica

La integración numérica consiste en obtener una solución aproximada a la integral:

$$\int_a^b f(x) dx \quad (22)$$

Donde la función  $f(x)$  es una función de la que no conocemos su primitiva. El problema también se puede ver enunciado como un problema del valor inicial para una ecuación diferencial ordinaria con las siguientes condiciones iniciales:

$$y'(x) = f(x) \quad ; \quad y(a) = 0$$

Es decir, encontrar  $y(b)$  equivale a hallar el valor de la integral.

Sin embargo, en este artículo no nos vamos a centrar en este enfoque, si no que vamos a centrarnos en métodos para aproximar la primera integral descrita. En concreto, vamos a centrarnos en las reglas **del Punto Medio**, la de los **trapecios** y la regla **Simpson**.

Todos estos métodos de integración están basados en funciones de interpolación. Con lo cual, conviene describir qué es un método de integración basado en funciones de interpolación.

#### Métodos basados en funciones de interpolación

Esta familia de métodos se basa en aproximar la función dada  $f(x)$  por otra función  $g(x)$  la cual conocemos el valor de su integral. Para construir esta función, se la hace pasar por un cierto número de puntos en los que  $f$  y  $g$  tienen el mismo valor. Usualmente intentamos que  $g(x)$  sea un polinomio para simplificar el cálculo de su primitiva.

#### 3.1. Regla del punto medio

Usando la regla del punto medio, aproximamos el valor de la integral mediante el valor de la función  $f$  en el punto medio de un intervalo definido.

Existen dos reglas del punto medio dependiendo de la cantidad de divisiones que hagamos en el intervalo: La regla del punto medio **simple** y la **compuesta**.

##### 3.1.1. Regla del punto medio simple

La integral se aproxima como:

$$\int_a^b f(x) dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \quad (23)$$

Donde el error cometido en la aproximación es:

$$E = \frac{f''(\xi)}{24}(b-a)^3 \quad (24)$$

Con  $\xi \in (a, b)$ .

A continuación, vamos a demostrar este resultado:

#### Demostración de la regla del punto medio simple

Antes de comenzar, para esta demostración será necesario definir el Teorema del Valor Medio para Integrales (TVMI). Este teorema postula que:

Sean  $f, g \in C([a, b])$  tal que  $g$  no cambia de signo en  $[a, b]$ . Entonces existe un  $\xi(a, b)$  tal que:

$$\int_a^b f(x)g(x) dx = f(\xi) \int_a^b g(x) dx \quad (25)$$

Una vez definido, ya podemos empezar con la demostración:

Vamos a comenzar desarrollando por Taylor alrededor del punto  $x_0 = \frac{a+b}{2}$ :

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(\theta_x)}{2}(x - x_0)^2 \quad (26)$$

Con  $\theta_x \in (x_0, x)$ .

Integrando obtenemos:

$$\int_a^b f(x) dx = (b - a)f(x_0) + \int_a^b f'(x_0)(x - x_0) dx + \int_a^b \frac{f''(\theta_x)}{2}(x - x_0)^2 dx \quad (27)$$

Como la primera integral del lado derecho de la igualdad se anula, al final obtenemos:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \\ &= (b - a)f(x_0) + \int_a^b \frac{f''(\theta_x)}{2}(x - x_0)^2 dx = \\ &= (b - a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{f''(\xi)}{2} \int_a^b (x - x_0)^2 dx = \\ &= (b - a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{f''(\xi)}{24}(b - a)^3 \end{aligned} \quad (28)$$

Quedando demostrada la fórmula. Sin embargo, para la segunda igualdad, hemos aplicado el TVMI. Con lo cual, también tenemos que demostrar ese paso:

Vamos a suponer, sin pérdida de generalidad, que  $g(x) \geq 0$ ,  $\forall x \in (a, b)$ .

Como  $f$  es continua en  $[a, b]$ , por el Teorema de Weierstrass,  $f$  alcanza un máximo y un mínimo en el intervalo. Además:

$$m = \min_{x \in (a, b)} f(x) \leq f(x) \leq M = \max_{x \in (a, b)} f(x), \forall x \in (a, b).$$

Como  $g$  es positiva, entonces:  $g(x)m \leq g(x)f(x) \leq g(x)M$ ,  $\forall x \in (a, b)$

Integrando y despejando tenemos:

$$m \leq \frac{\int_a^b f(x)g(x) dx}{\int_a^b g(x) dx} \leq M \quad (29)$$

Pero, como  $f$  es continua en  $[a, b]$ , por el teorema de Darboux  $f$  toma todos valores entre el mínimo  $m$  y el máximo  $M$ . Esto significa que  $\exists \xi \in (a, b)$  tal que:

$$f(\xi) = \frac{\int_a^b f(x)g(x) dx}{\int_a^b g(x) dx} \quad (30)$$

Dando así por finalizada toda la demostración.

### 3.1.2. Regla del punto medio compuesta

Para obtener un resultado preciso usando este método, es necesario repetir el procedimiento  $N$  veces. Para ello, tenemos que dividir el intervalo  $[a, b]$  en  $n$  subintervalos de igual longitud definidos por  $n+1$  puntos. Entonces:  $a = x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n = b$ , por lo que  $\Delta x = \frac{b-a}{n}$ .

Donde los puntos  $x_j = a + \Delta x$ ;  $y_j = f(x_j)$  con  $(j = 0, \dots, n)$  definen rectángulos cuyas alturas se calculan en el punto medio del intervalo.

Entonces, si aplicamos la definición de sumas de Riemann obtenemos:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{j=1}^n \text{Area}(R_j) = \sum_{j=1}^n (x_j - x_{j-1}) f\left(\frac{x_j + x_{j-1}}{2}\right) \quad (31)$$

El error en la aproximación tiene una expresión que viene dada por:

$$\begin{aligned} E_n &= \left| \int_a^b f(x) dx - M_n \right| \leq \frac{K_2(b-a)^3}{24n^2} = \\ &= \frac{K_2(b-a)}{24} (\Delta x)^2 \sim O(\Delta x^2) \end{aligned} \quad (32)$$

Donde  $K_2 = \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|$  y  $M_n = \sum_{k=1}^n f\left(\frac{x_{k-1} + x_k}{2}\right) \Delta x \approx \int_a^b f(x) dx$

Cabe destacar que si  $f(x)$  es lineal, entonces la regla del punto medio compuesta es exacta. Antes de demostrarla merece la pena hablar un poco de son las sumas de Riemann.

#### Sumas de Riemann

La sumas de Riemann son un tipo de aproximación al valor de la integral mediante una suma finita, la cual se calcula dividiendo el área de integración típicamente en rectángulos y calculando el área de cada uno de ellos para posteriormente sumar todas.

Matemáticamente se describe como:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n f(c_k) \Delta x_k \quad (33)$$

Donde  $c_k$  son los puntos muestra que cumplen que  $c_k \in [x_{k-1}, x_k]$  y se pueden escribir como:  $c_k = x_{k-1} + w_k \Delta x_k$   $w_k \in [0, 1]$ ;  $k = 1, 2, \dots, n$

Concretamente si  $w_k = \frac{1}{2} \forall k$ , tenemos la regla del punto medio.

#### Demostración de la regla del punto medio compuesta

Vamos a comenzar dividiendo nuestro intervalo  $[a, b]$  en  $n$  subintervalos definidos por  $n+1$  puntos:

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n = b, \Delta x = \frac{b-a}{n}$$

Entonces tenemos:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=1}^n \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x) dx \quad (34)$$

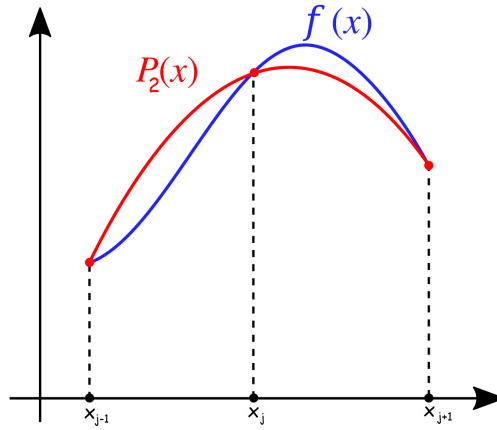
Esencialmente, en cada intervalo  $[x_{k-1}, x_k]$  estamos aplicando la regla del punto medio simple. Con lo cual:



La regla de Simpson aproxima el área calculada por la integral en el intervalo  $[x_{j-1}, x_{j+1}]$  mediante una parábola que pasa por tres puntos. En concreto:

$$x_{j-1} \quad , \quad x_j \quad , \quad x_{j+1}$$

Al tratarse de una parábola, usamos como función con integral conocida (función de interpolación), el polinomio de interpolación de Lagrange de orden 2.



Esta regla también tiene dos desarrollos en función de la precisión que queramos obtener y en función del número de pasos a ejecutar. Son la Regla de Simpson **simple** y la **compuesta**.

### 3.3.1. Regla de Simpson simple

Como explicamos, al aproximar la función por medio de parábolas, usamos el polinomio de interpolación de Lagrange de orden 2 denotado  $P_2(x)$ .

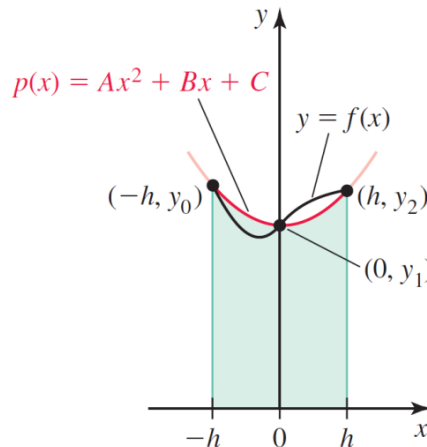
$$P_2(x) = Ax^2 + Bx + C$$

Este polinomio nos es de utilidad ya que conocemos el valor de su integral. Así pues, vamos a realizar la siguiente aproximación:

$$\int_{-h}^h f(x) \cdot dx \approx \int_{-h}^h P_2(x) \cdot dx = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) \quad (38)$$

Donde los valores  $y_0, y_1, y_2$  corresponden, respectivamente a  $f(-h), f(0), f(h)$ , que son los puntos por los que hemos hecho pasar la parábola.

Podemos ver la aproximación que estamos realizando en el siguiente gráfico:



### Demstración de la regla de Simpson simple

Empezamos viendo el área que encierra la parábola descrita por  $P_2(x)$ :

$$\int_{-h}^h P_2(x) \cdot dx = \int_{-h}^h Ax^2 + Bx + C \cdot dx = \frac{2Ah^3}{3} + 2Ch = \frac{h}{3}(2Ah^2 + 6C) \quad (39)$$

Como la parábola pasa por los puntos:

$$(-h, y_0) = (-h, f(-h)) \quad , \quad (0, y_1) = (0, f(0)) \quad , \quad (h, y_2) = (h, f(h))$$

Entonces:

$$\begin{cases} y_0 = P_2(-h) = Ah^2 - Bh + C \\ y_1 = P_2(0) = C \\ y_2 = P_2(h) = Ah^2 + Bh + C \end{cases} \Rightarrow$$

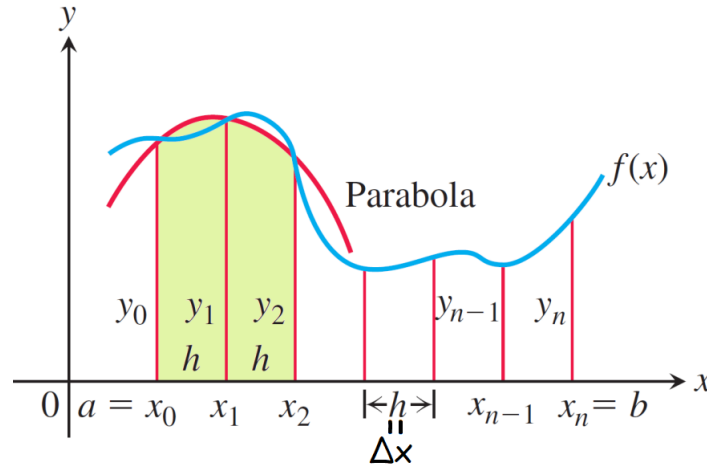
Obteniendo así un sistema de ecuaciones que podemos resolver para A, B y C en función de  $y_0$ ,  $y_1$  e  $y_2$ :

$$\Rightarrow \begin{cases} C = y_1 \\ Ah^2 - Bh = y_0 - y_1 \\ Ah^2 + Bh = y_2 - y_1 \\ 2Ah^2 = y_0 + y_2 - 2y_1 \end{cases} \quad (40)$$

Con estos resultados, podemos sustituir A y C en la ecuación 39.

### 3.3.2. Generalización de la regla de Simpson simple

Si queremos generalizar la regla para otra región que no necesariamente sea el origen, y si queremos aplicarlo a una función que se extiende por el plano, el primer paso es dividir la parte del dominio de la función que queramos aproximar en un número par **n** de intervalos. Es decir, hay que dividir el intervalo  $[a, b]$  en n subintervalos donde n es un número par. Esto es:



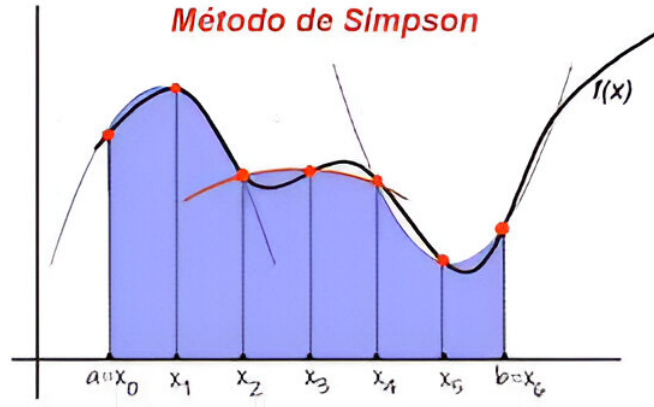
Así, podemos escribir lo siguiente:

- Las posiciones  $x_k$  corresponden a  $x_k = a + \Delta x$  con  $k = 0, 1, \dots, n$ .
- La anchura del intervalo, que denominamos paso, es  $\Delta x = \frac{b-a}{n}$ .

Con estas aclaraciones y la nueva notación, podemos reescribir la expresión 38 de la siguiente forma:

$$\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} f(x) \cdot dx \approx A(P_k) = \frac{\Delta x}{3} (f(x_{k-1}) + 4f(x_k) + f(x_{k+1})) \quad (41)$$

Por último, debemos observar que como  $n$  es par, es decir,  $n = 2r$ , ¡en nuestra aproximación vamos a tener  $r$  parábolas!



En el ejemplo vemos como tenemos 6 intervalos y sin embargo 3 parábolas.

$$(6 = 2r)$$

### 3.3.3. Regla de Simpson compuesta

Con estas últimas consideraciones llegamos a la versión compuesta de este método. Básicamente consiste en aplicar la forma general de la versión simple de la regla sucesivas veces hasta cubrir la región finita que queramos aproximar.

Esto es lo que acabamos de ver, si dividimos el intervalo finito  $[a, b]$  de la función que queremos aproximar en un número par  $n=2r$  de subintervalos de longitud  $\Delta x = \frac{b-a}{n}$ , llegamos a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) \cdot dx &\approx \int \sum_{k=1}^r A(P_k) = \frac{\Delta x}{3} \sum_{k=1}^r [f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})] = \\ &= \frac{\Delta x}{3} [f(x_0) + 4 \sum_{k=1}^r f(x_{2k-1}) + 2 \sum_{k=1}^{r-1} f(x_{2k}) + f(x_n)] = \\ &= \frac{\Delta x}{3} [f(a) + 4 \sum_{k=1}^r f(x_{2k-1}) + 2 \sum_{k=1}^{r-1} f(x_{2k}) + f(b)] \end{aligned} \quad (42)$$

Donde en el penúltimo paso se ha separado  $f(x_0)$  ya que para el caso  $k = 1$ ,  $f(x_{2k-2}) = f(x_0)$  al igual que  $f(x_n)$  ya que para el caso  $k = r$ ,  $f(x_{2k}) = f(x_{2r}) = f(x_n)$ . Además, el último sumatorio está multiplicado por 2 ya que tanto el primer término como el último proporcionan lo mismo para algún valor de  $k$ , a excepción de los extremos (pero al sacarlos, nos deshacemos el problema).

### 3.3.4. Error de aproximación en la regla de Simpson

Al igual que en la regla del punto medio, podemos establecer una cota superior para el error cometido al aproximar la integral de una función según el método de Simpson. Para ello, definamos primero el error global en la etapa  $n$ .

$$E_n = \left| \int_a^b f(x) \cdot dx - S_n \right| \quad (43)$$

Ahora, sea  $S_n$  el resultado de aplicar la regla de Simpson compuesta:

$$S_n = S_{2r} = \frac{\Delta x}{3} [f(a) + 4 \sum_{k=1}^r f(x_{2k-1}) + 2 \sum_{k=1}^{r-1} f(x_{2k}) + f(b)] \quad (44)$$



Y sea  $K_4 = \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|$ . Entonces el error absoluto está acotado por:

$$E_n \leq \frac{K_4(b-a)^5}{180n^4} = \frac{K_4(b-a)}{180}(\Delta x)^4 \sim O((\Delta x)^4) \quad (45)$$

Obtenemos como resultado que la magnitud del error es del orden del paso que utilizamos a la cuarta ( $O((\Delta x)^4)$ ). Esto quiere decir, que si  $f(x)$  es un polinomio de grado 3 o inferior, ¡la regla de Simpson es exacta!

### **Nota**

El método que acabamos de explicar también es conocido como la regla de Simpson 1/3. Existe otra variante de la regla que es la regla de Simpson 3/8, que difiere de la clásica en que esta usa polinomios de interpolación de Lagrange de 3er orden, además de que la función se tabula con cuatro puntos a igual distancia  $h$  formando tres subintervalos.

La regla 3/8, comparada en el mismo intervalo que la 1/3, es 2.25 veces más precisa que su compañera. Aún así, en la práctica, rara vez usamos el método 3/8 debido a que el aumento de complejidad es notable (n pasa a tener que ser múltiplo de tres, necesitamos polinomios de grado 3, etc) y debido a que en la mayoría de aplicaciones el método 1/3 nos proporciona la precisión suficiente.