

Tema 5

Métodos numéricos

5.1. Resolución de ecuaciones

Nos ocuparemos de encontrar *numéricamente* las soluciones (raíces) de ecuaciones

$$f(x) = 0$$

donde f es una función dada, real de variable real. El caso más sencillo es aquel en que f es una función polinómica. Si el grado es 1, la resolución es inmediata; el caso cuadrático es igualmente simple. Existen fórmulas para resolver las ecuaciones de grados 3 y 4, pero no para grado 5. Las ecuaciones polinómicas de grado ≥ 5 han de resolverse utilizando técnicas numéricas, y con mayor razón las ecuaciones en las que f no es una función polinómica.

5.1.1. Método de bisección

Supongamos que $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ es continua en $[a, b]$, y que toma valores de signo contrario en a y b (i.e., que $f(a) > 0, f(b) < 0$, o bien $f(a) < 0, f(b) > 0$). En estas condiciones, el teorema de Bolzano garantiza que existe $c \in (a, b)$ tal que $f(c) = 0$.

Sea $I_1 = [a_1, b_1]$ donde $a_1 = a$ y $b_1 = b$ y sea p_1 el punto medio $p_1 = (a_1 + b_1)/2$. Si tenemos la suerte de que $f(p_1) = 0$, hemos hallado una solución y paramos. Si $f(p_1) \neq 0$, $f(p_1)$ tiene o bien el signo de $f(b)$ o bien el signo de $f(a)$, y uno de los dos intervalos $[a, p_1], [p_1, b]$ tiene la propiedad de que en sus extremos f toma valores de signo contrario. Llamemos $I_2 = [a_2, b_2]$ a ese intervalo en cuyos extremos la función toma valores de signo contrario. Ahora estamos como en la situación de partida pero con I_2 reemplazando a I_1 ; la ventaja es que la longitud de I_2 es la mitad que la de I_1 .

Iterando el proceso se llega a un punto p_n tal que $f(p_n) = 0$ o se dispone de un intervalo $I_n = [a_n, b_n]$ de longitud $b_n - a_n = (b - a)/2^{n-1}$ que contiene una solución.

Ejemplo

La ecuación $f(x) = xe^x - 2 = 0$ tiene una raíz c en el intervalo $[0, 1]$, porque f es continua en este intervalo y $f(0) = -2 < 0$ y $f(1) = e - 2 > 0$. Construimos la tabla siguiente en donde el signo de $f(p_n)$ determina el intervalo en el siguiente paso. La columna situada más a la derecha proporciona una cota superior del error cuando p_n se utiliza para aproximar la raíz c , puesto que

$$|p_n - c| \leq b_{n+1} - a_{n+1} = \frac{b_n - a_n}{2} = \frac{b - a}{2^n} = \frac{1}{2^n}.$$

Encontraremos una aproximación p_n con error menor que 10^{-2} .

n	a_n	b_n	p_n	$f(p_n)$	$(b_n - a_n)/2$
1	0	1	0.5	-1.176	0.5
2	0.5	1	0.75	-0.412	0.25
3	0.75	1	0.875	+0.099	0.125
4	0.75	0.875	0.8125	-0.169	0.0625
5	0.8125	0.875	0.84375	-0.038	0.03125
6	0.84375	0.875	0.859375	+0.029	0.015625
7	0.84375	0.859375	0.8515625		0.0078125

Paramos en $n = 7$, obteniendo $c \approx p_7 = 0.8515625$, siendo una cota superior del error 0.0078125. Este es el primer paso para el cual el error es menor que 10^{-2} . Los valores de la parte decimal de p_7 a partir del segundo no deben tomarse en serio, pero podemos concluir que $0.843 < c < 0.860$.

5.1.2. Método de Newton

El método de bisección tiene la desventaja de converger a una solución con bastante lentitud. Un método para el que con frecuencia la convergencia resulta mucho más rápida está basado en la idea geométrica de aproximar sucesivamente una curva por rectas tangentes. El método se debe a Isaac Newton (1642-1727).

Sea f una función derivable que tiene un cero en r (es decir, $f(r) = 0$) y sea x_1 una estimación inicial de r . La recta tangente a la gráfica en $(x_1, f(x_1))$ tiene por ecuación

$$y = f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1)$$

y corta al eje de abscisas en el punto (cf. Figura 5.1)

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

(se supone $f'(x_1) \neq 0$). Si reemplazamos x_1 por la segunda estimación x_2 obtenemos un punto x_3 , etc. En la n -ésima iteración obtenemos el punto x_{n+1} a partir del punto x_n mediante la fórmula

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Bajo hipótesis adecuadas, la sucesión (x_n) converge rápidamente a una raíz de la ecuación $f(x) = 0$.¹

¹El método fue descrito por Newton en una monografía que hizo circular entre sus amigos en 1669 titulada *De analysi per aequationes numero terminorum infinitas*, que fue publicada en 1711, y también en el libro *Methodus fluxionum et serierum infinitarum*, escrito en 1671 pero no publicado hasta 1736 (en una traducción al inglés realizada por el clérigo y matemático John Colson (1680-1760), con el título *Method of fluxions*). Sin embargo, la descripción de Newton difiere sustancialmente de la moderna: Newton aplica el método sólo a funciones polinómicas, no calcula las aproximaciones sucesivas x_n sino que halla una sucesión de polinomios y solamente al final llega a una aproximación para la raíz r . Newton tiene una visión puramente algebraica del método, sin conexión con el cálculo. El método de Newton fue publicado por primera vez en 1685, en la obra *A treatise of Algebra, both historical and practical*, del matemático inglés John Wallis (1616-1703). En 1690, Joseph Raphson (1648-1715) en su obra *Analysis aequationum universalis*, publica una descripción más simple del método. Raphson también consideró el método como puramente algebraico y restringió su uso a funciones polinómicas, pero lo describió en términos de aproximaciones sucesivas x_n en lugar de la sucesión de polinomios usada por Newton, lo cual resultaba más sencillo. Finalmente, Thomas Simpson (1710-1761), en sus *Essays on several curious and useful subjects, in speculative and mixed Mathematics* (1740), describió el método de Newton como un método iterativo para resolver ecuaciones no lineales generales usando cálculo de fluxiones, proporcionando esencialmente la visión moderna. El método de Newton se conoce también con el nombre de método de Newton-Raphson.

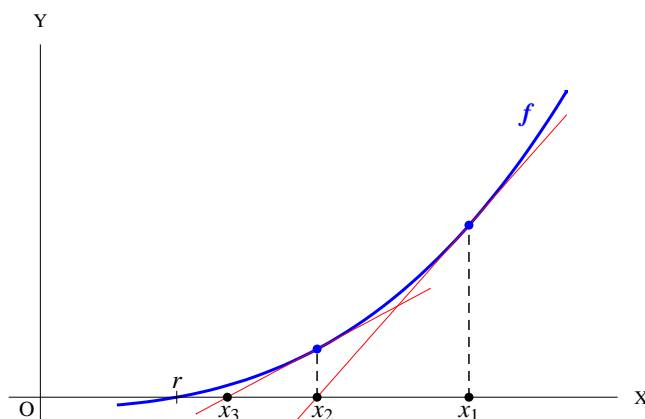


Figura 5.1: El método de Newton.

Teorema 5.1.1 (Método de Newton) Sea $I = [a, b]$ y sea $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ derivable dos veces en I . Supongamos que $f(a)f(b) < 0$ y que existen constantes m, M tales que $|f'(x)| \geq m > 0$ y $|f''(x)| \leq M$ para todo $x \in I$. Sea $K = M/2m$. Entonces existe un subintervalo I^* que contiene un cero r de f tal que para cualquier $x_1 \in I^*$ la sucesión (x_n) definida por

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n \in \mathbb{N}$$

pertenece a I^* y converge hacia r . Además

$$|x_{n+1} - r| \leq K|x_n - r|^2, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Ejemplo

Utilizaremos el método de Newton para aproximar $\sqrt{2}$. Si escribimos $f(x) = x^2 - 2, x \in \mathbb{R}$, entonces buscamos la raíz positiva de la ecuación $f(x) = 0$. Como $f'(x) = 2x$, la fórmula de iteración es

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} = x_n - \frac{x_n^2 - 2}{2x_n} = \frac{1}{2} \left(x_n + \frac{2}{x_n} \right).$$

Si tomamos como estimación inicial $x_1 = 1$ obtenemos los valores sucesivos

$$x_2 = \frac{3}{2} = 1.5, \quad x_3 = \frac{17}{12} = 1.416666\dots, \quad x_4 = \frac{577}{408} = 1.414215\dots$$

$$\text{y } x_5 = \frac{665857}{470832} = 1.414213562374\dots$$

que es correcto hasta la undécima cifra decimal.

Notas

- (a) Si ponemos $e_n = x_n - r$ entonces la desigualdad del teorema anterior puede escribirse así

$$|Ke_{n+1}| \leq |Ke_n|^2.$$

En consecuencia, si $|Ke_n| < 10^{-m}$, entonces $|Ke_{n+1}| < 10^{-2m}$ de modo que el número de dígitos significativos de Ke_n ha sido doblado. Por eso, la sucesión generada por el método de Newton se dice que converge *cuadráticamente*.

- (b) En la práctica, cuando el método de Newton se programa en un ordenador se suele hacer una estimación inicial x_1 , y se le deja trabajar al ordenador. Si x_1 se escoge mal o si la raíz está demasiado próxima a un extremo de I , el procedimiento puede no converger a un cero de f . Una estrategia usual es utilizar el método de bisección para llegar a una estimación bastante próxima a la raíz y luego poner en marcha el método de Newton.

5.2. Integración aproximada

El teorema fundamental del Cálculo (primera forma) proporciona un método eficaz para calcular la integral $\int_a^b f$ siempre que podamos encontrar una función F tal que $F'(x) = f(x)$ para todo $x \in [a, b] \setminus E$ ($E \subset [a, b]$ finito). Si no puede encontrarse una tal F , no puede usarse el teorema fundamental. Sin embargo, cuando f es continua hay varias técnicas para aproximar la integral de Riemann $\int_a^b f$ utilizando sumas que se parecen a las sumas de Riemann.

Un procedimiento muy elemental para obtener estimaciones rápidas de $\int_a^b f$ es observar que si $g(x) \leq f(x) \leq h(x)$ para todo $x \in [a, b]$, entonces

$$\int_a^b g \leq \int_a^b f \leq \int_a^b h.$$

Si podemos calcular las integrales de g y h , entonces tenemos cotas para $\int_a^b f$. Con frecuencia estas cotas son suficientemente precisas para nuestras necesidades.

Ejemplo

Deseamos estimar el valor de $\int_0^1 e^{-x^2} dx$. Es fácil demostrar que $e^{-x} \leq e^{-x^2} \leq 1$ para $x \in [0, 1]$, de modo que

$$\int_0^1 e^{-x} dx \leq \int_0^1 e^{-x^2} dx \leq \int_0^1 1 dx.$$

En consecuencia, se tiene

$$1 - \frac{1}{e} \leq \int_0^1 e^{-x^2} dx \leq 1.$$

Si consideramos la media aritmética de los valores extremos, obtenemos la estimación $1 - \frac{1}{2e} \approx 0.816$ para la integral con una cota superior del error $\frac{1}{2e} < 0.184$. Esta estimación es tosca, pero se obtiene rápidamente y puede ser satisfactoria para nuestras necesidades. Si se desea una mejor aproximación, se pueden intentar encontrar funciones aproximantes g y h más cercanas.

5.2.1. Particiones con subintervalos de igual longitud

Si $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ es continua, sabemos que su integral de Riemann existe. Para encontrar un valor aproximado de esta integral con mínima cantidad de cálculos, es conveniente considerar particiones \mathcal{P}_n de $[a, b]$ en n subintervalos iguales de longitud $h_n = (b - a)/n$:

$$a < a + h_n < a + 2h_n < \cdots < a + nh_n = b.$$

Si tomamos como etiquetas los extremos de la izquierda y los extremos de la derecha de los subintervalos, obtenemos la ***n-ésima aproximación por la izquierda*** dada por

$$L_n(f) = h_n \sum_{k=0}^{n-1} f(a + kh_n)$$

y la ***n*-ésima aproximación por la derecha** dada por

$$R_n(f) = h_n \sum_{k=1}^n f(a + kh_n).$$

Observamos que es casi tan fácil calcular ambas aproximaciones como solamente una de ellas, ya que difieren solamente en los términos $f(a)$ y $f(b)$.

Salvo que tengamos alguna razón para creer que una de las aproximaciones anteriores está más próxima al valor de la integral que la otra, generalmente se toma su media aritmética

$$\frac{1}{2} (L_n(f) + R_n(f)),$$

que vemos fácilmente que es igual a

$$T_n(f) = h_n \left(\frac{1}{2} f(a) + \sum_{k=1}^{n-1} f(a + kh_n) + \frac{1}{2} f(b) \right) \quad (1)$$

como una aproximación razonable a $\int_a^b f$.

Observa que si f es creciente en $[a, b]$, entonces

$$L_n(f) \leq \int_a^b f \leq R_n(f). \quad (2)$$

En este caso vemos fácilmente que

$$\left| \int_a^b f - T_n(f) \right| \leq \frac{1}{2} (R_n(f) - L_n(f)) = \frac{1}{2} h_n (f(b) - f(a)) = (f(b) - f(a)) \cdot \frac{b-a}{2n}.$$

Una estimación del error como ésta es útil ya que proporciona una cota superior para el error de la aproximación en términos de cantidades que son conocidas al principio. En particular puede usarse para determinar cómo debe elegirse n para tener una aproximación que será correcta con un margen de error determinado $\varepsilon > 0$.

Si f es decreciente, las desigualdades (2) deben invertirse. Resumimos ambos casos en el siguiente teorema.

Teorema 5.2.1 *Si la función continua $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ es monótona y si $T_n(f)$ está dada por (1), entonces*

$$\left| \int_a^b f - T_n(f) \right| \leq |f(b) - f(a)| \cdot \frac{b-a}{2n}. \quad (3)$$

Ejemplo

Sea $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = e^{-x^2}$; la función f es decreciente. Se sigue de (3) que si $n = 8$, entonces

$$\left| \int_0^1 e^{-x^2} dx - T_8(f) \right| \leq \frac{1 - e^{-1}}{16} < 0.04,$$

y si $n = 16$, entonces

$$\left| \int_0^1 e^{-x^2} dx - T_{16}(f) \right| \leq \frac{1 - e^{-1}}{32} < 0.02.$$

De hecho la aproximación es considerablemente mejor, como veremos después.

5.2.2. La regla del trapecio

El método de integración numérica llamado *regla del trapecio* se basa en aproximar la función continua $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ por una función continua lineal a trozos. Sea $n \in \mathbb{N}$ y, como antes, $h_n = (b - a)/n$ y consideremos la partición \mathcal{P}_n . Aproximamos f por la función lineal a trozos g_n que pasa por los puntos $(a + kh_n, f(a + kh_n))$, $k = 0, 1, \dots, n$. Parece razonable que la integral $\int_a^b f$ será “aproximadamente igual” a la integral $\int_a^b g_n$ para n suficientemente grande (siempre que f sea razonablemente suave).

Como el área de un trapecio con base horizontal h y lados verticales l_1 y l_2 es $\frac{1}{2} h(l_1 + l_2)$, se tiene

$$\int_{a+kh_n}^{a+(k+1)h_n} g_n = \frac{1}{2} h_n (f(a + kh_n) + f(a + (k+1)h_n))$$

para $k = 0, 1, \dots, n-1$. Sumando estos términos y observando que cada punto de la partición \mathcal{P}_n , excepto a y b , pertenece a dos subintervalos adyacentes, se obtiene

$$\int_a^b g_n = h_n \left(\frac{1}{2} f(a) + f(a + h_n) + \dots + f(a + (n-1)h_n) + \frac{1}{2} f(b) \right).$$

El término de la derecha es precisamente $T_n(f)$, que encontramos en (1) como la media aritmética de $L_n(f)$ y $R_n(f)$. $T_n(f)$ recibe el nombre de ***n-ésima aproximación trapezoidal*** de f . La Figura 5.2 ilustra la regla del trapecio en el caso $n = 5$.

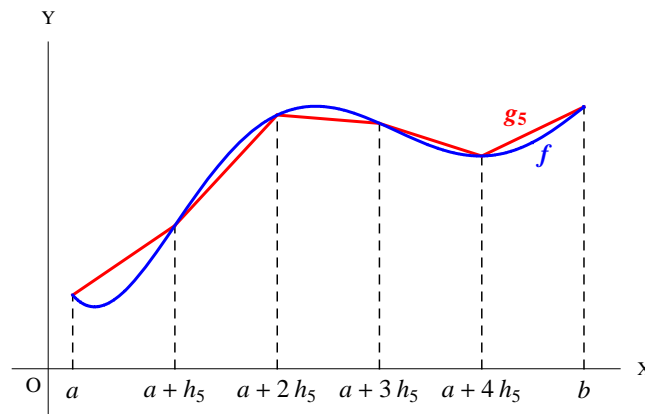


Figura 5.2: La regla del trapecio.

Antes obtuvimos una estimación del error en el caso en que f sea monótona. El siguiente teorema proporciona una estimación sin esta restricción sobre f , pero en términos de la segunda derivada f'' de f .

Teorema 5.2.2 Sean f, f' y f'' continuas en $[a, b]$ y sea $T_n(f)$ la n -ésima aproximación trapezoidal (1). Entonces existe $c \in [a, b]$ tal que

$$T_n(f) - \int_a^b f = \frac{(b-a)h_n^2}{12} \cdot f''(c). \quad (4)$$

La igualdad (4) es interesante por cuanto puede proporcionar tanto una cota superior como una cota inferior para la diferencia $T_n(f) - \int_a^b f$. Por ejemplo, si $f''(x) \geq A > 0$ para todo $x \in [a, b]$, entonces (4) implica que esta diferencia es mayor o igual que $\frac{1}{12} A(b-a)h_n^2$. Si solamente se tiene

$f''(x) \geq 0$ para $x \in [a, b]$ (lo que ocurre cuando f es convexa) entonces la aproximación trapezoidal es siempre “por exceso”.

Sin embargo, usualmente es de mayor interés la cota superior.

Corolario 5.2.1 Sean f, f' y f'' continuas en $[a, b]$ y sea $|f''(x)| \leq B_2$ para todo $x \in [a, b]$. Entonces

$$\left| T_n(f) - \int_a^b f \right| \leq \frac{(b-a)h_n^2}{12} \cdot B_2 = \frac{(b-a)^3}{12n^2} \cdot B_2. \quad (5)$$

Cuando puede encontrarse una cota superior B_2 , (5) puede usarse para determinar cómo debe elegirse n para asegurar una precisión deseada.

Ejemplo

Sea $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = e^{-x^2}$. Entonces $f''(x) = 2e^{-x^2}(2x^2 - 1)$ y podemos tomar $B_2 = 2$. Así pues, si $n = 8$, se tiene

$$\left| T_8(f) - \int_0^1 f \right| \leq \frac{2}{12 \cdot 64} = \frac{1}{384} < 0.003,$$

y si $n = 16$, se tiene

$$\left| T_{16}(f) - \int_0^1 f \right| \leq \frac{2}{12 \cdot 256} = \frac{1}{1536} < 0.00066.$$

5.2.3. La regla del punto medio

Un método obvio para aproximar la integral de f es tomar las sumas de Riemann evaluando f en los puntos medios de los subintervalos. Así, si \mathcal{P}_n es la partición dada antes, la ***n-ésima aproximación mediante el punto medio*** de f viene dada por

$$M_n(f) = h_n \left(f\left(a + \frac{1}{2}h_n\right) + f\left(a + \frac{3}{2}h_n\right) + \cdots + f\left(a + \left(n - \frac{1}{2}\right)h_n\right) \right) = h_n \sum_{k=1}^n f\left(a + \left(k - \frac{1}{2}\right)h_n\right). \quad (6)$$

Otro método podría ser utilizar funciones lineales a trozos que sean tangentes a la gráfica de f en los puntos cuyas abscisas son los puntos medios de los subintervalos. A primera vista, parece que necesitaríamos conocer la pendiente de la tangente a la gráfica de f en cada uno de los puntos de abscisa $a + (k - \frac{1}{2})h_n, k = 1, 2, \dots, n$. Sin embargo es un ejercicio fácil de geometría demostrar que el área del trapecio cuya parte superior es esta recta tangente en el punto de abscisa $a + (k - \frac{1}{2})h_n$ es igual al área del rectángulo cuya altura es $f(a + (k - \frac{1}{2})h_n)$. Así pues, esta área está dada por (6), y la “regla del trapecio tangente” resulta ser la misma que la “regla del punto medio”.

Establecemos ahora un teorema que nos muestra que la regla del punto medio es más precisa que la regla del trapecio en un factor 2.

Teorema 5.2.3 Sean f, f' y f'' continuas en $[a, b]$ y sea $M_n(f)$ la n -ésima aproximación mediante el punto medio (6). Entonces existe $\gamma \in [a, b]$ tal que

$$\int_a^b f - M_n(f) = \frac{(b-a)h_n^2}{24} \cdot f''(\gamma). \quad (7)$$

Como antes, la fórmula (7) puede utilizarse para proporcionar tanto una cota superior como una cota inferior para la diferencia $\int_a^b f - M_n(f)$, si bien es una cota superior la que usualmente tiene mayor interés. En contraste con la regla del trapecio, si la función es convexa ($f''(x) \geq 0$ para todo $x \in [a, b]$), entonces la aproximación mediante el punto medio es siempre “por defecto”.

Corolario 5.2.2 Sean f, f' y f'' continuas en $[a, b]$, y sea $|f''(x)| \leq B_2$ para todo $x \in [a, b]$. Entonces

$$\left| M_n(f) - \int_a^b f \right| \leq \frac{(b-a)h_n^2}{24} \cdot B_2 = \frac{(b-a)^3}{24n^2} \cdot B_2. \quad (8)$$

5.2.4. La regla de Simpson

El último procedimiento que consideraremos proporciona con frecuencia una aproximación mejor que las reglas del trapecio y del punto medio y no requiere esencialmente cálculos adicionales. Sin embargo, para este método, la convexidad (o la concavidad) de f no proporciona ninguna información sobre el error.

Mientras que las reglas del trapecio y del punto medio estaban basadas en la aproximación de f mediante funciones lineales a trozos, la regla de Simpson está basada en la aproximación de la gráfica de f mediante arcos de parábola.

Es fácil ver que dados tres puntos $(-h, y_0), (0, y_1), (h, y_2)$, la función cuadrática

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

cuya gráfica pasa por estos puntos verifica

$$\int_{-h}^h q = \frac{1}{3} h(y_0 + 4y_1 + y_2).$$

En efecto:

$$y_0 = A(-h)^2 + B(-h) + C,$$

$$y_1 = C,$$

$$y_2 = Ah^2 + Bh + C,$$

luego

$$y_0 + 4y_1 + y_2 = 2Ah^2 + 6C.$$

Por otra parte,

$$\int_{-h}^h (Ax^2 + Bx + C) dx = \left(\frac{1}{3} Ax^3 + \frac{1}{2} Bx^2 + Cx \right) \Big|_{-h}^h = \frac{1}{3} h(2Ah^2 + 6C).$$

Sea f una función continua en $[a, b]$ y sea $n \in \mathbb{N}$ par, y $h_n = (b-a)/n$. En cada “subintervalo doble”

$$[a, a + 2h_n], [a + 2h_n, a + 4h_n], \dots, [b - 2h_n, b]$$

aproximamos f por una función cuadrática, $\frac{n}{2}$ funciones cuadráticas en total cuyas gráficas pasan por los puntos

$$(a, y_0 = f(a)), (a + h_n, y_1 = f(a + h_n)), (a + 2h_n, y_2 = f(a + 2h_n)), \dots, (b, y_n = f(b)).$$

Sea $g_{n/2}$ la función resultante. Estas consideraciones conducen a la ***n*-ésima aproximación de Simpson**,² definida por

$$S_n(f) = \frac{1}{3} h_n (f(a) + 4f(a + h_n) + 2f(a + 2h_n) + 4f(a + 3h_n) + 2f(a + 4h_n) + \cdots + 2f(b - 2h_n) + 4f(b - h_n) + f(b)). \quad (9)$$

Observa que los coeficientes de los valores de f en los $n + 1$ puntos de la partición siguen la pauta 1, 4, 2, 4, 2, \dots , 4, 2, 4, 1.

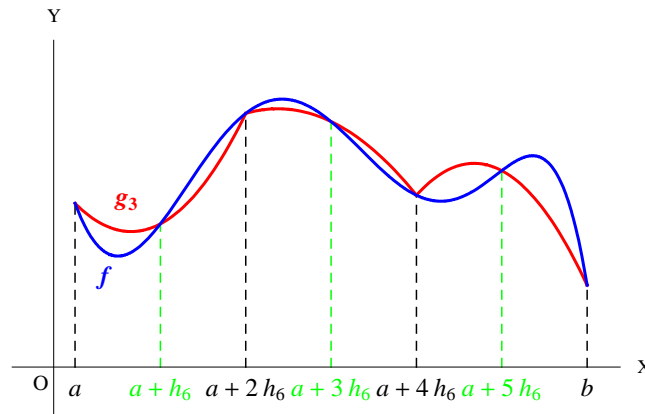


Figura 5.3: La regla de Simpson.

En la Figura 5.3 se ilustra la regla de Simpson en el caso $n = 6$. Los puntos medios de los subintervalos dobles aparecen marcados en verde.

Establecemos ahora un teorema que proporciona una estimación de la precisión de la aproximación de Simpson; involucra la cuarta derivada de f .

Teorema 5.2.4 Sean $f, f', f'', f^{(3)}$ y $f^{(4)}$ continuas en $[a, b]$ y sea $n \in \mathbb{N}$ par. Si $S_n(f)$ es la n -ésima aproximación de Simpson (9), entonces existe $c \in [a, b]$ tal que

$$S_n(f) - \int_a^b f = \frac{(b-a)h_n^4}{180} \cdot f^{(4)}(c). \quad (10)$$

Corolario 5.2.3 Sean $f, f', f'', f^{(3)}$ y $f^{(4)}$ continuas en $[a, b]$ y sea $|f^{(4)}(x)| \leq B_4$ para todo $x \in [a, b]$. Entonces

$$\left| S_n(f) - \int_a^b f \right| \leq \frac{(b-a)h_n^4}{180} \cdot B_4 = \frac{(b-a)^5}{180n^4} \cdot B_4. \quad (11)$$

²La estimación

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{1}{3} \cdot \frac{b-a}{2} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]$$

es conocida con el nombre de regla de Simpson, en honor del matemático inglés Thomas Simpson, que la menciona en su obra *Mathematical dissertations on a variety of physical and analytical subjects*, publicada en 1743. Pero el propio Simpson reconoció que la había aprendido de Newton. De hecho, la regla fue desarrollada por el astrónomo y matemático alemán Johannes Kepler (1571-1630). A finales de 1613, con motivo de su reciente matrimonio, Kepler había comprado algunos barriles de vino a un vinatero austriaco. A los pocos días de ser colocados en las bodegas de su casa en Linz, vino el vendedor y comenzó a calcular de manera rápida y misteriosa con una varilla la capacidad de los diferentes barriles. Kepler decidió investigar las leyes geométricas de tal procedimiento de medición. De esta manera, el *Visierkunst*, es decir, el arte de la medición con mira de la capacidad de los barriles, fue objeto de un estudio sistemático por parte de Kepler. El resultado de su trabajo fue el libro *Nova Stereometria doliorum vinariorum*, publicado en Linz en 1615. En esta obra figura la estimación que lleva el nombre de regla de Simpson, razón por la que se conoce también con el nombre de “regla del barril” de Kepler.

El éxito de la estimación (11) depende de si somos capaces de encontrar una cota superior para la cuarta derivada.

Ejemplo

Sea $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = e^{-x^2}$. Entonces

$$f^{(4)}(x) = 4e^{-x^2}(4x^4 - 12x^2 + 3).$$

Para $x \in [0, 1]$ es $|e^{-x^2}| = e^{-x^2} \leq e^0 = 1$. Pongamos $g(x) = 4x^4 - 12x^2 + 3$. Se tiene

$$g'(x) = 8x(2x^2 - 3),$$

$$g'(x) = 0 \Leftrightarrow x = 0 \quad \text{o} \quad x = \pm\sqrt{\frac{3}{2}}.$$

Estudiando el signo de g' concluimos que la función g es decreciente en $[0, 1]$, $g(0) = 3$, $g(1) = -5$. Así pues $|g(x)| \leq 5$ para $x \in [0, 1]$. Por tanto $|f^{(4)}(x)| \leq 20$ para $x \in [0, 1]$, luego podemos tomar $B_4 = 20$.

Se sigue de (11) que si $n = 8$, entonces

$$\left| S_8(f) - \int_0^1 f \right| \leq \frac{1}{180 \cdot 8^4} \cdot 20 = \frac{1}{36864} < 0.00003,$$

y si $n = 16$, entonces

$$\left| S_{16}(f) - \int_0^1 f \right| \leq \frac{1}{180 \cdot 16^4} \cdot 20 = \frac{1}{589824} < 0.0000017.$$

5.3. Ejercicios

1. Demuestra que la ecuación $x = \cos x$ tiene una solución en el intervalo $[0, \frac{\pi}{2}]$. Utiliza el método de bisección para encontrar una solución aproximada de esta ecuación, con error menor que 10^{-3} .
2. Demuestra que la ecuación $2 \ln x + \sqrt{x} = 2$ tiene una solución en el intervalo $[1, 2]$. Utiliza el método de bisección para encontrar la solución con error menor que 10^{-2} .
3. Si utilizas el método de bisección en un intervalo de longitud 1 para encontrar p_n con error $|p_n - c| < 10^{-5}$, determina el menor valor de n que te asegurará esta precisión.
4. La ecuación $\ln x = x - 2$ tiene dos soluciones. Aproxímalas utilizando el método de Newton. ¿Qué ocurre si $x_1 = \frac{1}{2}$ es el punto inicial?
5. La función $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x) = 8x^3 - 8x^2 + 1$ tiene dos ceros en $[0, 1]$. Aproxímalos, utilizando el método de Newton, con puntos iniciales (a) $x_1 = \frac{1}{8}$, (b) $x_1 = \frac{1}{4}$. Explica lo que ocurre.
6. Aproxima la solución de la ecuación $x = \cos x$ hasta conseguir seis cifras decimales exactas.
7. Sea $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ una función positiva, con derivada continua negativa. Para cualquier número real x_1 , ¿la sucesión (x_n) obtenida por el método de Newton ($x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$, $n \in \mathbb{N}$) tiene límite $+\infty$?

8. Sea $f : [0, 1] \longrightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$. Utiliza las aproximaciones trapezoidal y de Simpson con $n = 4$ para calcular $\frac{\pi}{4} = \int_0^1 f(x) dx$. ¿Cómo debe elegirse n en cada caso para asegurar que el error sea menor que 10^{-6} ?

9. Aproxima las integrales siguientes, proporcionando estimaciones del error:

(a) $\int_0^2 \sqrt{1+x^4} dx,$

(b) $\int_0^\pi \frac{\operatorname{sen} x}{x} dx,$

(c) $\int_0^1 \cos(x^2) dx.$