

CAPÍTULO 3

INTEGRACIÓN NUMÉRICA

Bruno Julia Diaz, última revisión Oct 2016

3.1 Fórmulas de integración

Uno de los problemas numéricos más recurrentes en física y otras ciencias es el del cálculo de integrales definidas. Aparecen en todos los campos de la física, p. ej. cálculo de momentos de inercia, centros de masa, cálculo del trabajo, del campo electromagnético generado por una distribución de carga, y un largo etcétera. Los métodos de integración numérica se basan en aproximar la integral definida por un sumatorio que incluye los valores de la función en un conjunto discreto de puntos dentro del intervalo de integración pesados apropiadamente,

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \sum_{k=0}^N f(x_k) \omega_k. \quad (3.1)$$

Los métodos que consideraremos difieren en los valores del conjunto de pesos, ω_i .

Para obtener estos métodos y sus errores asociados es conveniente recordar el polinomio interpolador, Eq. (2.4), y la fórmula del error cometido en función de la derivada $N+1$ -ésima, Eq. (2.5), que reproducimos aquí,

$$f(x) = P_N(x) + R_N(x) \quad \text{con} \quad R_N(x) = \frac{f^{(N+1)}(\xi) \pi_N(x)}{(n+1)!} \quad \xi \in (x_0, x_N). \quad (3.2)$$

Las distintas fórmulas devienen de considerar aproximaciones a base de polinomios de orden superior. Empezaremos discutiendo fórmulas obtenidas para el caso en que los puntos en los que conocemos la función están equiespaciados, $x_k = x_0 + k h$, con $k = 0, \dots, N$, $f_k \equiv f(x_k)$, $x_0 = a$, $x_N = b$ y $h = (b - a)/N$.

3.1.1 Regla trapezoidal

Veamos, por ejemplo, si consideramos una aproximación lineal entre dos puntos consecutivos (x_0, f_0) y (x_1, f_1) con la notación, $f_k \equiv f(x_k)$ tendremos el polinomio interpolador,

$$P_1(x) = f_0 + \frac{x - x_0}{h}(f_1 - f_0) \quad h = x_1 - x_0 \quad (3.3)$$

que si lo integramos tendremos,

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx &\simeq \int_{x_0}^{x_1} P_1(x) dx = f_0 h + \frac{x_1^2 - x_0^2}{2h}(f_1 - f_0) - x_0(f_1 - f_0) \\ &= \frac{h}{2}(f_0 + f_1). \end{aligned} \quad (3.4)$$

El error cometido puede estimarse utilizando el resto de (3.2), al integrarlo en el intervalo $[x_0, x_1]$ obtenemos,

$$\text{Error} = \int_{x_0}^{x_1} \frac{f^{(2)}(\xi)(x - x_0)(x - x_1)}{2!} dx = -\frac{h^3}{12} f''(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_1). \quad (3.5)$$

3.1.2 Regla de Simpson

La fórmula a dos puntos, (3.4) se conoce como regla trapezoidal y el error cometido al integrar en un subintervalo, h , crece como h^3 .

La fórmula de Simpson se obtiene utilizando 3 puntos en lugar de dos. El polinomio interpolador será en este caso una parábola,

$$P_2(x) = f_0 + \frac{x - x_0}{2h}(4f_1 - 3f_0 - f_2) + \frac{(x - x_0)^2}{2h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2). \quad (3.6)$$

Procediendo como en el caso lineal, obtenemos la fórmula de Simpson,

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \simeq \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) \quad (3.7)$$

con un error,

$$\text{Error} \simeq -\frac{h^5}{90} f^{(iv)}(\xi), \quad \xi \in [x_0, x_2]. \quad (3.8)$$

3.1.3 Regla de Simpson-3/8

Curiosamente, si utilizamos 4 puntos en lugar de tres, el error cometido no se hace más pequeño, dando lugar a la fórmula de Simpson-3/8,

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x) dx \simeq \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) \quad (3.9)$$

con un error,

$$\text{Error} \simeq -\frac{3h^5}{80} f^{(iv)}(\xi), \quad \xi \in [x_0, x_3]. \quad (3.10)$$

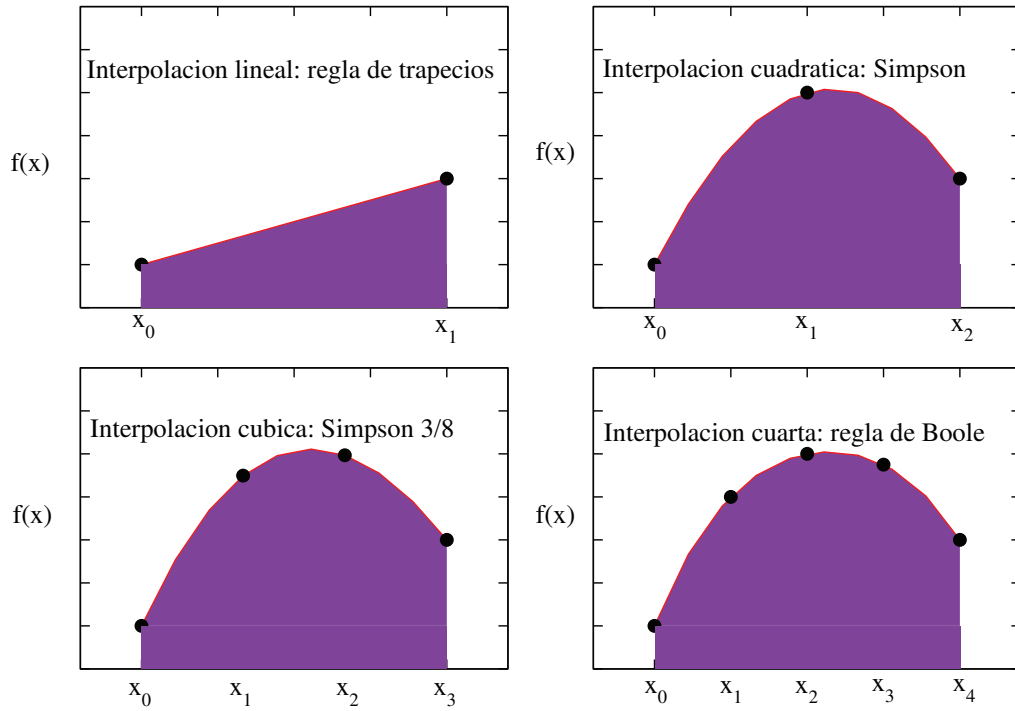


Figura 3.1: Ejemplos de las reglas de 2,3,4 y 5 puntos que dan lugar a la regla de trapecios, Simpson, Simpson-3/8 y Boole, respectivamente.

3.1.4 Regla de Boole

El caso de cinco puntos produce la regla de Boole ,

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x) dx \simeq \frac{2h}{45}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4) \quad (3.11)$$

con un error,

$$\text{Error} \simeq \frac{-8h^7}{945} f^{(vi)}(\xi) , \quad \xi \in [x_0, x_4] . \quad (3.12)$$

De la forma en que hemos obtenido estas reglas se tiene que la regla trapezoidal, Simpson, Simpson 3/8 y Boole producen un resultado exacto si la función a integrar es un polinomio de grado uno, dos, tres o cuatro, respectivamente.

3.2 Reglas de integración repetidas

Las reglas presentadas pueden concatenarse para integrar intervalos con un número mayor de puntos.

3.2.1 Regla de los trapecios repetida

Por ejemplo, si tenemos la función $f(x)$ definida en un conjunto de $N + 1$ puntos $x_k = x_0 + kh$, con $x_0 \equiv a$ y $x_N \equiv b$ podemos calcular la integral,

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=0}^{N-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) dx \quad (3.13)$$

donde para evaluar las integrales utilizamos la regla de los trapecios, (3.4) con lo que tenemos,

$$\begin{aligned}
 \int_a^b f(x)dx &= \sum_{k=0}^{N-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \\
 &\simeq h \sum_{k=0}^{N-1} \frac{f_k + f_{k+1}}{2} = h \frac{f_0 + f_N}{2} + h \sum_{k=1}^{N-1} f_k \\
 &= h \left[\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + \dots + f_{N-1} + \frac{f_N}{2} \right]. \tag{3.14}
 \end{aligned}$$

Es importante notar la diferente contribución entre los extremos, f_0 y f_N y el interior del intervalo. Observemos que el error total de la regla trapezoidal escala del siguiente modo,

$$\text{Error} \propto N \times h^3 = (b-a)h^2 \tag{3.15}$$

ya que cada intervalo tiene un error que va como h^2 y sumamos $N \simeq (b-a)/h$ intervalos. En la figura 3.2 tenemos un ejemplo de la convergencia del método para una integral sencilla a medida que aumentamos el número de subintervalos. La regla de trapecios aun teniendo una precisión relativamente baja es también muy popular ya que se programa *directamente*, de hecho si la función se anula en los extremos¹, cosa habitual en, por ejemplo, mecánica cuántica, tenemos,

$$\int_a^b f(x)dx \simeq h \sum_k f_k. \tag{3.16}$$

Regla de suma de Euler-McLaurin

Utilizando diversas técnicas se puede obtener la expresión del error cometido al utilizar la regla trapezoidal. El caso general se conoce como la regla de suma de Euler-McLaurin, que se puede encontrar por ejemplo en la página 133 del libro Guardiola *et al* (2003). Para ilustrar dicha regla podemos seguir la presentación del libro de DeVries (A First Course in Computational physics, pag. 153) para obtener las primeras correcciones al error cometido al utilizar la regla trapezoidal. Veamos, consideremos de nuevo la integral y utilicemos el desarrollo de Taylor alrededor de x_0 para aproximarla,

$$\begin{aligned}
 \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx &= \int_{x_0}^{x_1} \left[f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{f''(x_0)(x-x_0)^2}{2!} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{f'''(x_0)(x-x_0)^3}{3!} + \frac{f^{(iv)}(x_0)(x-x_0)^4}{4!} + \dots \right] \\
 &= hf(x_0) + \frac{h^2}{2}f'(x_0) + \frac{h^3}{3!}f''(x_0) + \frac{h^4}{4!}f'''(x_0) + \frac{h^5}{5!}f^{(iv)}(x_0) + \dots \tag{3.17}
 \end{aligned}$$

Curiosamente, podemos hacer lo mismo pero desarrollando alrededor de x_1 ,

$$\begin{aligned}
 \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx &= \int_{x_0}^{x_1} \left[f(x_1) + f'(x_1)(x-x_1) + \frac{f''(x_1)(x-x_1)^2}{2!} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{f'''(x_1)(x-x_1)^3}{3!} + \frac{f^{(iv)}(x_1)(x-x_1)^4}{4!} + \dots \right] \\
 &= hf(x_1) - \frac{h^2}{2}f'(x_1) + \frac{h^3}{3!}f''(x_1) - \frac{h^4}{4!}f'''(x_1) + \frac{h^5}{5!}f^{(iv)}(x_1) + \dots \tag{3.18}
 \end{aligned}$$

¹Obsérvese que si la función no se anula en los extremos si olvidamos el peso 1/2 que lleva el valor en los extremos cometeremos un error de orden h , con lo que perderemos el orden h^2 de la regla.

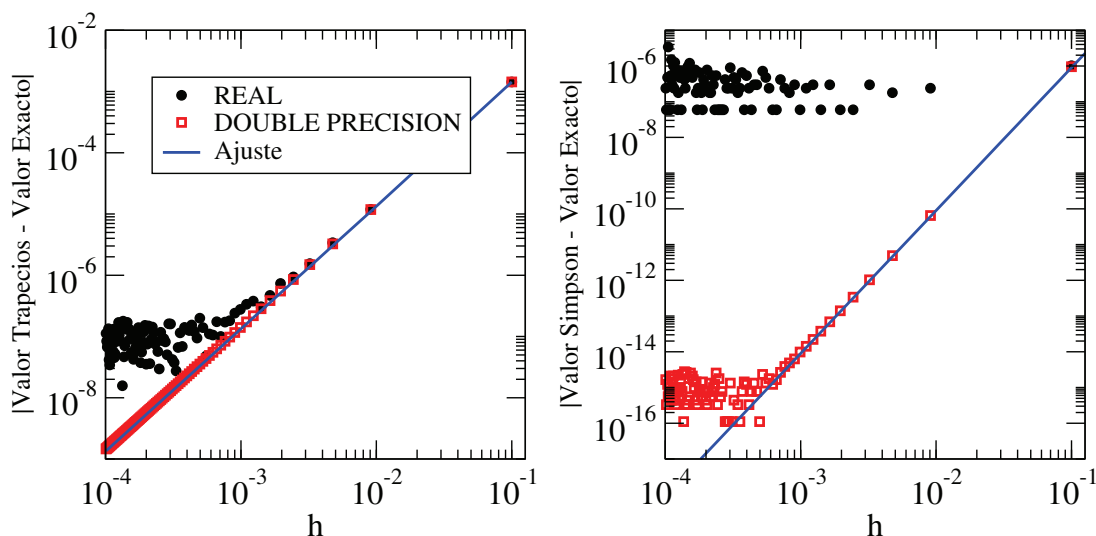


Figura 3.2: Error cometido al utilizar la regla trapezoidal (izquierda) y de Simpson (derecha) repetidas para calcular la integral, $\int_0^1 (e^x - 1) dx$ en función del tamaño de subintervalo utilizando REAL y DOUBLEPRECISION. Comprobamos numéricamente que el error es proporcional a h^2 para el caso trapezoidal y a h^4 en el caso de Simpson. Obsérvese como los errores de redondeo aparecen incluso al utilizar double precisión al calcular con el método de Simpson, que es extraordinariamente preciso.

donde hemos usado que $x_1 - x_0 = h$. Si promediamos ambas expresiones obtenemos,

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx &= \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] + \frac{h^2}{4} [f'(x_0) - f'(x_1)] \\ &+ \frac{h^3}{12} [f''(x_0) + f''(x_1)] + \frac{h^4}{48} [f'''(x_0) - f'''(x_1)] + \frac{h^5}{240} [f^{(iv)}(x_0) + f^{(iv)}(x_1)] + \dots \end{aligned} \quad (3.19)$$

Primero observamos que el primer sumando no es más que la regla trapezoidal aplicada a un intervalo, (3.4), con el añadido de que ahora tenemos explícitamente calculadas las correcciones en potencias del tamaño del discretizado, h . Lo más interesante de esta expresión es que ya se ve que si la utilizamos repetida en un discretizado uniforme los términos en derivadas impares de todos los puntos interiores se cancelarán. Con los términos en derivadas pares podemos hacer lo siguiente.

Primero trabajemos con las primeras derivadas a ver si conseguimos simplificar la expresión global, por ejemplo desarrollando en Taylor alrededor de x_0 y evaluando en x_1 y viceversa, tenemos

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= f'(x_1) - hf''(x_1) + \frac{h^2}{2} f'''(x_1) - \frac{h^3}{6} f^{(iv)}(x_1) + \dots \\ f'(x_1) &= f'(x_0) + hf''(x_0) + \frac{h^2}{2} f'''(x_0) + \frac{h^3}{6} f^{(iv)}(x_0) + \dots \end{aligned} \quad (3.20)$$

de donde,

$$\begin{aligned} f''(x_1) + f''(x_0) &= \frac{2}{h} [f'(x_1) - f'(x_0)] + \frac{h}{2} [f'''(x_1) - f'''(x_0)] - \frac{h^2}{6} [f^{(iv)}(x_0) + f^{(iv)}(x_1)] \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (3.21)$$

Con un procedimiento similar para la derivada tercera tenemos,

$$f^{(iv)}(x_0) + f^{(iv)}(x_1) = \frac{2}{h} [f'''(x_1) - f'''(x_0)] + \dots \quad (3.22)$$

Después de este procedimiento algo tedioso, podemos volver a escribir la Eq. (3.24) como,

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] + \frac{h^2}{4} [f'(x_0) - f'(x_1)] \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{h^3}{12} \left[\frac{2}{h} [f'(x_1) - f'(x_0)] + \frac{h}{2} [f'''(x_1) - f'''(x_0)] - \frac{h^2}{6} \left[\frac{2}{h} [f'''(x_1) - f'''(x_0)] + \dots \right] + \dots \right] \\ &+ \frac{h^4}{48} [f'''(x_0) - f'''(x_1)] + \frac{h^5}{240} \left[\frac{2}{h} [f'''(x_1) - f'''(x_0)] + \dots \right] + \dots \\ &= \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] - \frac{h^2}{12} [f'(x_0) - f'(x_1)] + \frac{h^4}{720} [f'''(x_1) - f'''(x_0)] + \dots \end{aligned} \quad (3.24)$$

Donde, espectacularmente, solo aparecen potencias pares de h en el error. Nótese que la primera corrección al error ya la sabíamos, ya que por el teorema de Rolle tenemos, que existe un $\xi \in [x_0, x_1]$ tal que $f'(x_1) - f'(x_0) = hf''(\xi)$, de donde reobtenemos el resultado de Eq. (3.5).

El resultado más potente aparece ahora cuando utilizamos esta fórmula repetida. Al aparecer todas las derivadas impares con signo negativo se van cancelando entre subintervalos adyacentes, lo que hace que para la fórmula repetida tengamos,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= h \left[\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + \dots + f_{N-1} + \frac{f_N}{2} \right] \\ &- \frac{h^2}{12} [f'(b) - f'(a)] + \frac{h^4}{720} [f'''(b) - f'''(a)] + \dots \end{aligned} \quad (3.25)$$

Esta fórmula contiene los primeros términos de la regla de Euler McLaurin. Es una fórmula potente. De nuevo, reobtenemos el comportamiento cuadrático del error para el cálculo repetido.

3.2.2 Regla de Simpson repetida

Para aplicar la fórmula a 3 puntos, regla de Simpson, a un conjunto finito de $N + 1$ puntos, necesitaremos que el número de intervalos sea par, lo que implica que N sea impar. En este caso podemos escribir,

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{N/2-1} \int_{x_{2k}}^{x_{2k+2}} f(x)dx. \quad (3.26)$$

Cada integral contiene ahora 3 puntos, por lo que podemos escribir,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \sum_{k=0}^{N/2-1} \int_{x_{2k}}^{x_{2k+2}} f(x)dx \\ &\simeq \frac{h}{3} \sum_{k=0}^{N/2-1} (f_{2k} + 4f_{2k+1} + f_{2k+2}) = \frac{h}{3} [f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \dots + 4f_{N-1} + f_N]. \end{aligned} \quad (3.27)$$

En este caso el error acumulado crece como,

$$\text{Error} \propto N \times h^5 = h^4 \quad (3.28)$$

considerablemente menor que el que se obtiene con la regla trapezoidal.

La regla de Simpson, que sólo usa tres puntos por intervalo, produce una precisión muy buena y es utilizada profusamente. En la figura 3.2 mostramos la convergencia de la regla de Simpson.

Observemos un aspecto siempre curioso de estas reglas, si hacemos un discretizado de por ejemplo 100 puntos y calculamos con la regla de Simpson hemos visto que obtendremos un error mucho menor que si utilizamos la regla Trapezoidal. Curiosamente la información utilizada por dichas fórmulas sobre la función original es exactamente la misma! La única diferencia estriba en que en una regla estamos aproximando mejor el comportamiento suave (probable) de nuestra función.

3.2.3 Método de Romberg

En los años 50 del siglo pasado Romberg presentó un método para mejorar la precisión del método de trapecios basándose esencialmente en la estructura del resto de la fórmula de Euler McLaurin (3.25). Teniendo en cuenta que la contribución cuadrática de dicho resto sólo depende del valor de la derivada de la función en los extremos, Romberg pensó una estrategia para intentar cancelar término a término el error.

Veamos, consideremos primero la fórmula trapezoidal con N intervalos con su resto correspondiente,

$$\int_a^b f(x)dx = T_N + \frac{h^2}{12}(f'(a) - f'(b)) + \dots \quad (3.29)$$

A la vista de la expresión del término cuadrático del resto podemos ver que si calculamos con el doble de intervalos, tendremos,

$$\int_a^b f(x)dx = T_{2N} + \frac{h^2}{4 \times 12}(f'(a) - f'(b)) + \dots \quad (3.30)$$

de donde podemos ver que si hacemos una combinación lineal adecuada cancelamos el término cuadrático,

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{4T_{2N} - T_N}{3} + \mathcal{O}(h^4). \quad (3.31)$$

Este truco, denominado extrapolación de Richardson para obtener el límite cuando $h \rightarrow 0$, puede extenderse y utilizarse para ir quitando los sucesivos términos de orden h^4 , etc. en el resto. El método más habitual es el siguiente, organizado en una estructura triangular como se muestra en la tabla 3.1. Definimos $T_{m,0} = T(2^m)$, o sea, trapecios con 2^m intervalos. Obsérvese que para calcular $T_{m+1,0}$ sólo es necesario calcular la función en los puntos intermedios de los intervalos del caso m .

- Calculamos el $m = 0$, un intervalo, tenemos $T_{0,0} = h/2(f(a) + f(b))$.
- A continuación calculamos el $T_{1,0}$ que sólo necesita evaluar la función en $x = (a + b)/2$, $T_{1,0} = T_{0,0} + h f((a + b)/2)$.
- A partir del $T_{0,0}$ y el $T_{1,0}$ podemos calcular el $T_{1,1}$,

$$T_{1,1} = \frac{4T_{1,0} - T_{0,0}}{3} \quad (3.32)$$

con un error que crece como h^2 .

- Calculamos la diferencia entre $T_{1,1}$ y $T_{0,0}$. Si es menor que el precisión que buscamos, paramos y nos quedamos con $T_{1,1}$. Si no, vamos a $m = 2$. Vamos calculando la columna $T_{2,0}$, $T_{2,1}$, y $T_{2,2}$ utilizando la fórmula general,

$$T_{m+k,k} = \frac{4^k T_{m+k,k-1} - T_{m+k-1,k-1}}{4^k - 1}. \quad (3.33)$$

Número de intervalos	$2^0 = 1$	$2^1 = 2$	$2^2 = 4$	$2^3 = 8$	$2^4 = 16$	Orden en h	
	$T_{0,0}$	$T_{1,0}$	$T_{2,0}$	$T_{3,0}$	$T_{4,0}$	$T_{5,0}$	$\mathcal{O}(h^2)$
		$T_{1,1}$	$T_{2,1}$	$T_{3,1}$	$T_{4,1}$	$T_{5,1}$	$\mathcal{O}(h^4)$
			$T_{2,2}$	$T_{3,2}$	$T_{4,2}$	$T_{5,2}$	$\mathcal{O}(h^6)$
				$T_{3,3}$	$T_{4,3}$	$T_{5,3}$	$\mathcal{O}(h^8)$
					$T_{4,4}$	$T_{5,4}$	$\mathcal{O}(h^{10})$
						$T_{5,5}$	$\mathcal{O}(h^{10})$

Tabla 3.1: Ilustración del método de Romberg. Para un número determinado de intervalos la mejor precisión la del $T_{m,m}$. Para calcular este valor, hemos tenido que calcular previamente todos los valores de su columna y todos los que quedan a la izquierda.

- Miramos si ahora $|T_{2,2} - T_{1,1}| < \epsilon$, si no, subimos la fila, pasamos a $T_{3,0}$, y así sucesivamente.
- Si queremos mejorar la eficiencia y gastar pocos recursos lo apropiado es almacenar solamente los $T_{m,m}$ y la última columna.

Aquí copiamos un ejemplo de programación relativamente sencillo del método de Romberg, que guarda dos columnas en memoria,

```

c
c Metodo de Romberg
c Guarda dos columnas, la ultima columna calculada, lastcol y la columna actual, ccol
c bjd Oct 2015
    implicit none
    integer i,nmax,j,k,maxp,k2
    parameter (maxp=10)
    doubleprecision a,b,val,exa,h,funci,x,sum,temp
    doubleprecision rom(0:maxp)
c columna anterior
    doubleprecision lastcol(0:maxp)
c columna actual
    doubleprecision ccol(0:maxp)
    doubleprecision eps
c valor exacto de la integral estudiada
    exa=exp(1.)-2.0

c limites de intergracion
    a=0.d0
    b=1.d0
c precision y tamaño de intervalo inicial
    eps=1.d-8
    h=b-a

c  Calculamos el primer romberg, de un solo intervalo
    rom(0)=1.d0/2.d0*(funci(a)+funci(b))*h
c  Ya tenemos la primera columna
    lastcol(0)=rom(0)

c  Comenzamos con las columnas de la 1 a la maxp
    do k=1,maxp

```



```

c calculamos el metodo de trapezios para k=1, utilizando
c el resultado anterior
    h=h/2.d0
    sum=0.d0
c solo calcula los nuevos puntos
    do i=1,2*(k-1)
        x=h+(i-1)*h*2
        sum=sum+ funci(x)*h
    enddo
c calcula el Tm,0 y lo almacena en el primer elemeno de la columna actual
    ccol(0) = lastcol(0)/2. +sum

c calculamos Tm,k
    do k2=1,k
        ccol(k2)=(4**k2 *ccol(k2-1)-lastcol(k2-1))/(4**k2-1.d0)
    enddo
c guardamos el Tm,m
    rom(k)=ccol(k)
c comprueba convergencia, comparando los mejores de las dos columnas
    if (abs(rom(k)-rom(k-1)).le.eps) then
        print*,"El valor de la integral es: ",rom(k)," error:"
1      ,rom(k)-exa
        print*,"Alcanzado con un k=",k
        stop
    endif
c pasa la columna actual a "columna anterior"
    do i=0,k
        lastcol(i)=ccol(i)
    enddo

    enddo
end

c funcion a integrar
function funci(x)
implicit none
doubleprecision funci,x
funci=exp(x)-1.d0
end

```

3.2.4 Cuadratura de Gauss-Legendre

Hasta ahora los métodos que hemos visto tienen todos varias cosas en común, la primera es que los hemos obtenido para un conjunto de puntos equiespaciados, la segunda es que todos ellos utilizan los valores en los extremos del intervalo, se denominan por este motivo métodos **cerrados**.

Hay toda una clase adicional de fórmulas de integración que se denominan **abiertas** y que no dependen del valor de la función en los extremos del intervalo. La más habitual es la cuadratura de Gauss-Legendre, que se define habitualmente para el intervalo $(a, b) = (-1, 1)$ pero que puede

utilizarse para cualquier otro intervalo mediante un cambio de variable, por ejemplo,

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 g(u)du \quad (3.34)$$

con $u = -1 + 2\frac{x-a}{b-a}$, que sería un cambio de variables lineal. Así pues trabajamos sin perder generalidad con el intervalo $(-1, 1)$.

La cuadratura busca encontrar unos puntos x_k y unos pesos correspondientes ω_k de tal modo que nos aseguremos que integramos de manera exacta polinomios hasta un grado determinado $2n - 1$, $x^0, x^1, \dots, x^{2n-1}$. Ya que como veremos para obtener la fórmula con un número n de puntos necesitamos $2n$ ecuaciones, por lo que necesitamos polinomios hasta grado $2n - 1$.

Veamos por ejemplo el caso $n = 2$, queremos aproximar,

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \simeq f(x_1)\omega_1 + f(x_2)\omega_2, \quad (3.35)$$

de manera que integre de forma exacta x^0, x^1, x^2 y x^3 . Primero observamos que los polinomios impares dan integral cero por simetría, así pues imponiendo que sea exacta para estos cuatro polinomios obtenemos un conjunto de ecuaciones,

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 1dx &= 2 = \omega_1 + \omega_2 \\ \int_{-1}^1 xdx &= 0 = x_1\omega_1 + x_2\omega_2 \\ \int_{-1}^1 x^2dx &= \frac{2}{3} = x_1^2\omega_1 + x_2^2\omega_2 \\ \int_{-1}^1 x^3dx &= 0 = x_1^3\omega_1 + x_2^3\omega_2. \end{aligned} \quad (3.36)$$

En este caso estas ecuaciones se pueden resolver y dan,

$$x_1 = \frac{-1}{\sqrt{3}}, x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}, \omega_1 = \omega_2 = 1. \quad (3.37)$$

Este resultado ya es bastante potente, cualquier función que uno pueda aproximar bien por un polinomio de hasta grado 3 en el intervalo $(-1, 1)$ cumple,

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \simeq f(-1/\sqrt{3}) + f(1/\sqrt{3}). \quad (3.38)$$

Veamos algunos ejemplos, comparando el valor exacto con el resultado aproximado,

funcion	exacto	aproximado : GL2
$\cos x$	1.68294	1.67582
$\exp x$	2.3504	2.3427
$\arccos x$	3.14159	3.14159
$e^{\sin(x)}$	2.28319	2.30537

(3.39)

Para trabajar con el caso general de la fórmula de n puntos que integra correctamente hasta polinomios de grado $2n - 1$ tenemos que recurrir a una base de los polinomios conveniente que

son los polinomios de Legendre. Estos son un conjunto de polinomios $P_k(x)$ que pueden definirse recursivamente,

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= x \\ (n+1)P_{n+1}(x) &= (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x) \end{aligned} \quad (3.40)$$

que si los definimos sobre el intervalo $[-1, 1]$ cumplen unas ciertas propiedades de ortonormalidad,

$$\int_{-1}^1 P_k(x)P_{k'}(x)dx = \delta_{k,k'} \frac{2}{2k+1}. \quad (3.41)$$

Ejemplo 3.1: Construye una función que calcule el valor de $P_n(x)$ a partir de la definición por recurrencia de la Eq. (3.40). Utilizando los métodos de integración vistos anteriormente, comprueba la relación de ortonormalidad, Eq. (3.41) para $n = 0, \dots, 20$.

Trabajando con ellos se puede demostrar que los n puntos x_k no son más que los n ceros de $P_n(x)$. Una vez sabido esto, los pesos se pueden calcular por ejemplo integrando los polinomios interpoladores de Lagrange, $\ell_i(x)$ definidos en el capítulo anterior,

$$\int_{-1}^1 \ell_i(x) = \sum_{k=1}^n \ell_i(x_k) \omega_k = \omega_i. \quad (3.42)$$

En la práctica tanto los ceros de los polinomios como sus correspondientes pesos suelen estar tabulados o existen rutinas que los calculan de forma muy eficiente. Es importante notar lo siguiente:

- Los puntos x_k no están equiespaciados.
- A medida que sube el grado del polinomio la densidad de puntos es mayor en los extremos del intervalo que en el centro.
- Normalmente $n = 24$ o $n = 48$ son más que suficientes para obtener una gran precisión, por ejemplo, $\int_{-1}^1 \cos(x)dx = 2 \sin(1.) = 1.68294196961579$ (Mathematica), 1.68294196961577 (n=24).
- Permite integrar funciones con singularidades integrables en los extremos (por ejemplo, $\sin(x-1)/(x-1)$).
- Mediante un cambio de variables apropiado permiten que la cuadratura tenga más densidad de puntos en la zona de interés o donde más varía la función a integrar.

3.2.5 Integrales impropias

Los métodos que hemos estudiado pueden adaptarse también a casos en los que la integral que estemos evaluando sea impropia, pero que exista. Veamos algunos casos.

Integrales con intervalos de integración infinitos

Por ejemplo una integral del tipo,

$$\int_a^\infty f(x)dx. \quad (3.43)$$

En este caso, utilizando reglas cerradas se puede escoger un punto máximo de integración x_M a partir del cual se sospeche que la función no contribuye a la integral. Habría que realizar en cualquier caso un análisis de la estabilidad del resultado respecto a la posición del punto x_M .

Otra alternativa es realizar un cambio de variable de integración que transforme el intervalo original en un intervalo finito, por ejemplo, hay algunos mapas utilizando la función tangente, $t = (2/\pi) \arctan(x)$, que transforman el intervalo $x \in [0, \infty)$ en el intervalo $t \in [0, 1)$, otro mapa similar es, $x \rightarrow (1+y)/(1-y)$ que transforma el intervalo $[0, \infty)$ en el $(-1, 1)$.

Integrales con singularidades de medida nula

Por ejemplo, la integral

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx = 2, \quad (3.44)$$

tiene un integrando con un problema de definición en $x = 0$, aunque el resultado de la misma está bien definido y no presenta ninguna dificultad. Numéricamente podemos evitarla haciendo previamente un cambio de variables, por ejemplo ², para el caso de un integrando que diverja como, $(x-a)^\gamma$ con $-1 < \gamma \leq$,

$$x \rightarrow a + t^{1/(1+\gamma)} \quad (3.45)$$

que transforma la integral,

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{1+\gamma} \int_0^{(b-a)^{1+\gamma}} f(a + t^{1/(1+\gamma)}) t^{-\gamma/(1+\gamma)} dt \quad (3.46)$$

donde el cambio de variable hay que realizarlo analíticamente, antes de programar.

Un método algo más pedestre sería evitar la singularidad integrando entre $(a+h, b-h)$. Por ejemplo en el caso del cálculo del perímetro de media circunferencia de radio 1, tenemos la integral,

$$\int_{-1}^1 g(x) dx \quad \text{con } g(x) = \sqrt{\frac{1}{1-x^2}}. \quad (3.47)$$

Si estudiamos la divergencia del integrando cerca de $|x| = 1$ tenemos,

$$g(-1+h) = \frac{1}{\sqrt{2h}} + \dots \quad (3.48)$$

La contribución de este punto a la regla trapezoidal será pues del orden, $g(-1+h)h$, que se hace cero como \sqrt{h} . Así la regla trapezoidal, o la regla de Simpson, convergerá pero mucho más lentamente, \sqrt{h} , que lo estudiado más arriba, h^2 .

Integrales con derivadas singulares

Estas integrales no presentan ningún problema de definición y por tanto se pueden utilizar todos los métodos tal y como están definidos. Lo que si observaremos es que la convergencia de los métodos no será la esperada del estudio presentado más arriba, ya que para estudiar el error cometido por los diferentes métodos hemos supuesto siempre que la función era continua y derivable varias veces en todo el intervalo de integración.

Un caso típico sería el cálculo del área de un círculo, que en los bordes tiene derivada infinita, lo que hace que los métodos converjan más lentamente. Otra forma de mejorar la convergencia es realizar un cambio de variable que haga que la nueva función a integrar no tenga problemas en la derivada.

²Siguiendo el ejemplo de Guardiola, et al.

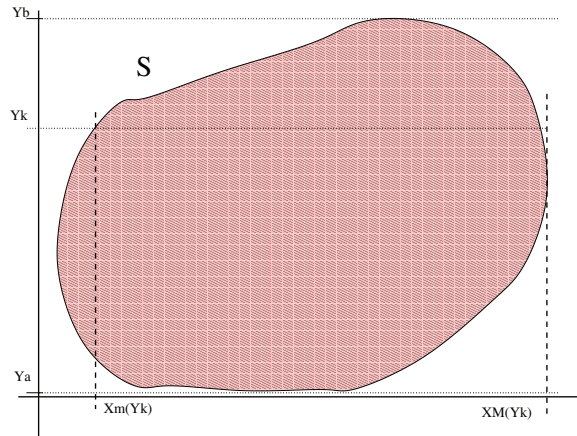


Figura 3.3: Ejemplo de dominio de integración bidimensional. Para cada punto y_k , necesitamos saber los límites de integración en la variable x , $x_m(y_k)$, y $x_M(y_k)$.

3.2.6 Métodos adaptativos

Una estrategia habitual al realizar integrales numéricas con los métodos presentados es construir algoritmos que se vayan adaptando al integrando, de forma que evaluemos la función más veces en la zona donde tiene más estructura. Esto se puede hacer por ejemplo a partir de un algoritmo un método de integración con un número de puntos fijo, por ejemplo, trapezoidal de 20 puntos o Gauss Legendre de 20 puntos. Una forma de proceder sería calcular la integral en todo el intervalo usando el método que sea, obteniendo un valor $I_{0,0}$, después dividir el intervalo en dos partes iguales y aplicar el algoritmo integrador a cada mitad, $I_{1,1}$ y $I_{1,2}$, si $|I_{0,0} - (I_{1,1} + I_{1,2})|$ es menor que la tolerancia buscada, hemos acabado. Si no es así, volvemos a repetir el proceso para cada subintervalo hasta lograr convergencia. El método irá convergiendo los intervalos con menos estructura, más fáciles de integrar, y poco a poco irá concentrando el esfuerzo en los subintervalos en los que la función es más compleja.

3.2.7 Integrales multidimensionales

Adaptar los métodos anteriores al caso multidimensional es sencillo formalmente, aunque puede ser muy complicado dependiendo de la dimensionalidad y del dominio a integrar. La idea es básicamente, realizar las integrales de modo secuencial, primero integrar en una variable, después en otra, etc.

$$\int_S f(x, y) dx dy = \int dy F(x; y) \quad (3.49)$$

donde

$$F(x; y) = \int_{x_m(y)}^{x_M(y)} f(x, y) dx. \quad (3.50)$$

Lo que hemos hecho es, para cada valor de y de la tabla de valores realizamos la integral en x . Por eso nos queda una función paramétrica en y , $F(x, y)$, que la que después integramos.

Este procedimiento implica dos bucles, uno sobre y y otro sobre x , más o menos así, para el método de trapecios con el mismo paso h en las dos variables,

```
C INTEGRA EN Y, DESPUES DE HABER INTEGRADO EN X
SUMTOT=0.
```

```

      DO IY=0,NY
        Y=DOMINIOY(IY)

C INTEGRA EN X, PARA CADA VALOR DE Y
        SUMX=0.
        DO IX=0,NX
C EL CONJUNTO DE VALORES DE X DEPENDE DE Y
          X=DOMINIOX(IX,IY)

          IF (MOD(IX,NX).EQ.0) THEN
            SUMX=SUMX+ F(X,Y)*H/2.
          ELSE
            SUMX=SUMX+ F(X,Y)*H
          ENDIF
        ENDDO

C ACUMULA LA INTEGRAL EN Y
        IF (MOD(IY,NY).EQ.0) THEN
          SUMTOT=SUMTOT+ SUMX*H/2.
        ELSE
          SUMTOT=SUMTOT+ SUMX*H
        ENDIF
      ENDDO

```

Donde hemos utilizado dos **function** que definen el intervalo de integración, para la variable y es un intervalo fijo, mientras que para la variable x lo hemos escrito en función del punto y .

Este procedimiento no es posible extenderlo a integrales con dimensión D mucho mayor que tres, ya que el número de operaciones crece como N^D , lo que por ejemplo para $N = 40$ intervalos y dimensión 4 nos da 2560000 repeticiones, haciendo muy difícil cualquier estudio de convergencia del método con h .

Ejemplo 3.2: Estudia la convergencia de la integral bidimensional sencilla utilizando la regla trapezoidal compuesta,

$$\int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 dy \cos(xy) e^{-x^2-y^2}. \quad (3.51)$$

# intervalos	valor
# en cada	
# direccion	
4	2.0701276990230100
8	2.1380854195762797
16	2.1551448885721634
32	2.1594135361630435
64	2.1604809262149764
128	2.1607477878648789
256	2.1608145041590103
512	2.1608311832876148
1024	2.1608353530732116
2048	2.1608363955198286
4096	2.1608366561314920
8192	2.1608367212844075
16384	2.1608367375726401

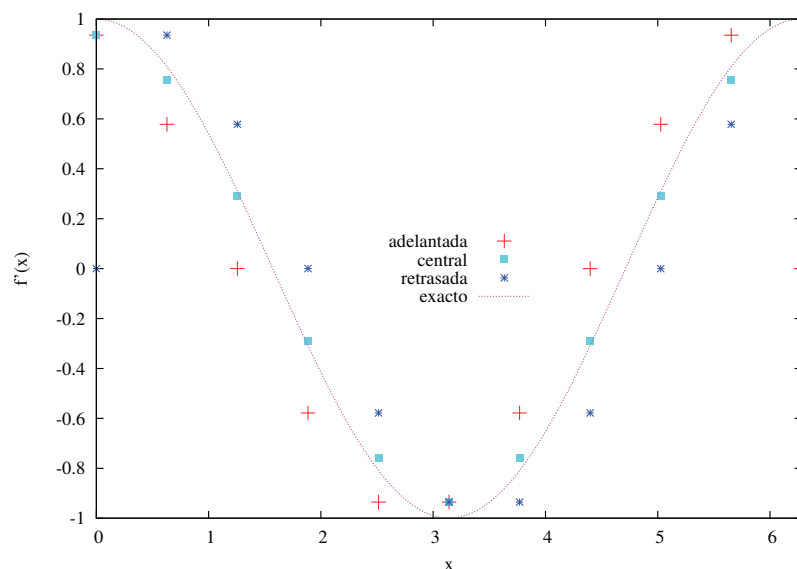


Figura 3.4: Ejemplo aproximación de la derivada de la función $f(x) = \sin(x)$ utilizando la fórmula adelantada, central y retrasada, en el intervalo $[0, 2\pi]$ con $N = 10$.

3.3 Fórmulas para calcular la derivada y la segunda derivada

3.3.1 Derivada

Consideremos una función $f(x)$ definida en un intervalo $x \in [a, b]$ de la que queremos obtener numéricamente su función derivada $f'(x)$, en el mismo intervalo. Una forma sencilla de obtener una aproximación a la derivada es primero discretizar la variable x con paso h , obteniendo un conjunto de $N + 1$ valores $\{x_k\}$, $k = 0, \dots, N$, tales que $x_0 = a$ y $x_N = b$. Después construimos un vector de los valores correspondientes de la función evaluada en dichos puntos, $f(x_k)$.

La primera manera de aproximar la derivada en $x \in (a, b)$ sería, probablemente, utilizar la definición de derivada como base del algoritmo de cálculo, y escribir,

$$f'(x_k) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h} + \mathcal{O}(h). \quad (3.52)$$

Esta fórmula, denominada de diferencia adelantada (*forward difference* en inglés) comete un error que es fácilmente cuantificable sin más que considerar los desarrollos de Taylor de la función f alrededor de x_k ,

$$\frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h} = f'(x_k) + \frac{1}{2}f''(x_k)h + \dots \quad (3.53)$$

Esta fórmula es correcta y aproxima la derivada de la función en x_k . Existe una fórmula análoga retrasada, que involucra los valores en x_{k-1} y x_k . Lo curioso es que es relativamente fácil obtener otra fórmula que con más o menos el mismo esfuerzo obtiene una precisión mucho mayor,

$$f'(x_k) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_{k-1}))}{2h} + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.54)$$

donde ahora el error es cuadrático con h en lugar de lineal como en la fórmula Eq. (3.52). En este caso se denomina de diferencia central y utiliza el valor de la función en el punto anterior y

siguiente. Es fácil ver que el error es cuadrático estudiando el desarrollo de Taylor, $f(x_k \pm h) = f(x_k) \pm f'(x_k)h + f''(x_k)h^2/2 + \dots$.

Esta fórmula de diferencia central es la más utilizada y sirve para calcular la derivada en todos los puntos x_k con $k = 1, N-1$, para los extremos del intervalo se utiliza la de diferencia adelantada, si $x = a$ o retrasada, si $x = b$. En la figura 3.4 comparamos las tres fórmulas para un caso con N pequeño que enfatiza la mejora de la fórmula central respecto de las otras dos. En la comparación el algoritmo de diferencia central está construido utilizando en los extremos la diferencia adelantada y retrasada. Así pues, esperaremos más error en los extremos que en el interior del intervalo.

Hasta ahora, las tres fórmulas utilizan sólo información en dos puntos para evaluar la derivada. Se puede derivar una expresión aun más precisa pero que utiliza 5 puntos,

$$f'(x_k) = \frac{-f(x_{k+2}) + 8f(x_{k+1}) - 8f(x_{k-1}) + f(x_{k-2}))}{12h} + \mathcal{O}(h^4). \quad (3.55)$$

Esta expresión es muy sencilla de obtener, basta con escribir las expresiones explícitas,

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + \frac{1}{6}h^3f^{(iii)}(x) + \frac{1}{24}h^4f^{(iv)}(x) + \frac{1}{120}h^5f^{(v)}(x) \dots \\ f(x-h) &= f(x) - hf'(x) + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{6}h^3f^{(iii)}(x) + \frac{1}{24}h^4f^{(iv)}(x) - \frac{1}{120}h^5f^{(v)}(x) \dots \\ f(x+2h) &= f(x) + 2hf'(x) + 2f''(x)h^2 + \frac{4}{3}h^3f^{(iii)}(x) + \frac{2}{3}h^4f^{(iv)}(x) + \frac{4}{15}h^5f^{(v)}(x) \dots \\ f(x-2h) &= f(x) - 2hf'(x) + 2f''(x)h^2 - \frac{4}{3}h^3f^{(iii)}(x) + \frac{2}{3}h^4f^{(iv)}(x) - \frac{4}{15}h^5f^{(v)}(x) \dots \end{aligned} \quad (3.56)$$

que al combinarlas apropiadamente, permiten obtener la Ec. (3.55).

Ejemplo 3.3: Crea una subrutina que calcule la derivada numérica de una tabla de N valores. Un ejemplo sería algo como,

```
C
C Xk SE SUPONEN EQUIESPACIADOS
C
      SUBROUTINE DERIVAT(N,X,F,DF)
      IMPLICIT NONE
      INTEGER N
      REAL X(N),F(N),DF(N),H
      INTEGER I
      H=X(2)-X(1)
C DIFERENCIA ADELANTADA PARA EL PRIMER PUNTO
      DF(1)=(F(2)-F(1))/H
C DIFERENCIA CENTRAL PARA PUNTOS INTERIORES
      DO I=2,N-1
        DF(I)=( F(I+1)-F(I-1))/(2*H)
      ENDDO
C DIFERENCIA RETRASADA PARA EL ULTIMO PUNTO
      DF(N)=(F(N)-F(N-1))/H
      END
```

3.3.2 Segunda derivada

Para calcular la segunda derivada podemos aplicar dos veces los algoritmos presentados en el caso de la derivada. En particular, es sencilla de derivar la fórmula para la segunda derivada utilizando

la diferencia central,

$$\begin{aligned} f''(x_k) &= \frac{f'(x_{k+1}) - f'(x_{k-1}))}{2h} + \mathcal{O}(h^2) = \frac{f(x_{k+2}) - f(x_k)}{4h^2} - \frac{f(x_k) - f(x_{k-2}))}{4h^2} + \mathcal{O}(h^2) \\ &= \frac{f(x_{k+2}) - 2f(x_k) + f(x_{k-2}))}{4h^2} + \mathcal{O}(h^2). \end{aligned} \quad (3.57)$$

Que podemos también escribir como, utilizando h en lugar de $2h$,

$$f''(x_k) = \frac{f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1}))}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.58)$$

Esta fórmula utiliza el valor de la función en tres puntos para aproximar la segunda derivada.