

## Capítulo 3

# Derivación e integración numérica aproximada de funciones

En este capítulo nos enfrentamos a uno de los problemas fundamentales del cálculo (encontrar derivadas e integrales de funciones dadas) desde la nueva perspectiva de los métodos numéricos. Es habitual que en los cursos iniciales de cálculo uno aprenda a derivar básicamente cualquier función escrita mediante una fórmula, y en efecto utilizando las reglas de la suma, el producto, el cociente, la regla de la cadena y la regla de la derivada de la función inversa se obtienen prácticamente todas las derivadas que uno desee de una función dada. Sin embargo, hay situaciones en las que este procedimiento, tan habitual para nosotros, no es factible. Algunas de estas situaciones son:

- I) La función que deseamos derivar tiene una fórmula extremadamente complicada, por ejemplo deseamos calcular la segunda derivada en  $x = 0$  de una función que contiene varios productos y composiciones de funciones elementales y resulta muy trabajoso hacer todo el cálculo simbólico para luego hacer  $x = 0$  y obtener un simple número. Es natural preguntarse si no habrá un método menos trabajoso teniendo en cuenta que la información requerida es también menor (solo queremos la derivada en un punto, no una fórmula general).
- II) La función que deseamos derivar se calcula mediante un programa complejo, por ejemplo un programa que en input  $t$  devuelve el valor de un cierto trazador cúbico en el punto  $t$ . En este caso no tenemos una fórmula, lo único que podemos es generar, usando el programa, los valores de la función en distintos puntos. Otra situación más realista viene dada por el ejemplo III en la introducción del Capítulo 4
- III) La función existe pero, como ya nos hemos encontrado en el capítulo de interpolación, solo podemos conocerla en algunos puntos concretos con medidas experimentales. Por ejemplo, observamos en dos días consecutivos el planeta Marte a la misma hora de la noche, de forma que las estrellas fijas prácticamente no se han movido pero el planeta sí. A partir de estas observaciones, ¿cómo deducimos el valor de la velocidad angular del planeta? Solo tenemos dos datos, pero veremos que son suficientes si le hacemos algunas concesiones a la precisión.

El caso de los problemas de integración es más familiar para todos: ¿quién no se ha encontrado con la necesidad –académica o científica– de calcular una integral, siendo imposible resolverla mediante las técnicas habituales? En el corazón de este problema está el conocido resultado (escrito aquí en su forma más elemental):

**Teorema 3.0.1 (Teorema de Liouville)** *Existen funciones continuas que se expresan de forma sencilla en términos de funciones elementales, pero tales que su primitiva no puede expresarse de tal forma (si bien existe por el Teorema Fundamental del Cálculo). Entre estas funciones podemos encontrar algunas particularmente importantes como*

$$e^{-x^2}, \quad \frac{\sin x}{x}, \quad \frac{\cos x}{x}, \quad \frac{1}{\ln x}, \quad \sqrt{1+x^4}, \quad \frac{e^x}{x}.$$

Algunas de las funciones explícitamente mencionadas en el Teorema 3.0.1 son particularmente importantes en Física. Por ejemplo, la primera de ellas (la campana de Gauss) tiene importancia fundamental en numerosas áreas. Por mencionar una concreta, si tenemos un globo lleno de gas a una temperatura dada la teoría termodinámica nos dice que la densidad de probabilidad de encontrar una partícula a una velocidad  $v$  dada es de la forma  $ae^{-v^2/\sigma^2}$ , con  $a$  y  $\sigma$  constantes. Por lo tanto si me pregunto cuál es la probabilidad de que una partícula escogida al azar se mueva con una velocidad de entre  $100m/s$  y  $300m/s$ , tengo que calcular la integral de dicha función en  $[100, 300]$ , algo que no puedo hacer por los métodos tradicionales.

Obviamente en otras aplicaciones nos sucederá, como en el cálculo de derivadas, que ni siquiera tenemos una fórmula accesible. Por ejemplo, medimos la temperatura de un fluido en un depósito en 4 alturas concretas y nos preguntamos cuál es la temperatura media del fluido. Lo único que tenemos en este tipo de casos es una tabla, de la que en ocasiones ni siquiera podemos tener muchos valores.

### 3.1. Cálculo aproximado de derivadas

Sea  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  una función derivable. De  $f$  supondremos únicamente que sabemos calcularla en valores concretos. Esto es, dado  $x_0 \in [a, b]$ , podemos calcular  $f(x_0)$  (tal vez con un error más o menos conocido) pero no tenemos a nuestra disposición –o no queremos utilizar– una fórmula cerrada para  $f$ . Deseamos aproximar el valor de  $f'(x_0)$  en un punto  $x_0 \in [a, b]$ , entendiendo si  $x_0 \in \{a, b\}$  que tratamos de obtener la derivada lateral.

#### 3.1.1. Fórmulas para la primera derivada

El principal método para calcular la derivada de una función en un punto consiste en tomar el polinomio que interpola la función en una colección de puntos cercanos al nuestro, y aproximar la derivada de la función por la derivada del polinomio.

##### Derivada hacia adelante

La primera fórmula que proporcionamos es la llamada “derivada hacia adelante” o “derivada progresiva”, y se obtiene al interpolar la función en  $x_0$  y  $x_0 + h$  (si  $h < 0$  a veces se habla de derivada hacia atrás o derivada regresiva, pero nosotros utilizaremos la terminología inicial siempre). En efecto, el polinomio interpolante de  $f$  en  $x_0$  y  $x_0 + h$  es:

$$p(x) = f(x_0) \frac{x - x_0 - h}{-h} + f(x_0 + h) \frac{x - x_0}{h} = f(x_0) + \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} (x - x_0).$$

Por lo tanto, el método general descrito arriba nos proporciona:

$$f'(x) \approx p'(x) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

Para obtener una expresión del error utilizaremos el polinomio de Taylor (ver Teorema 1.3.1).

**Teorema 3.1.1 (Derivada hacia adelante)** Sea  $f \in C^1[a, b]$  tal que existe  $f''$  en  $(a, b)$ . Sean  $x_0, h \in \mathbb{R}$ ,  $h \neq 0$ , tales que  $x_0, x_0 + h \in [a, b]$ . Entonces,

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2} f''(\zeta),$$

para algún  $\zeta \in (a, b)$  entre  $x_0$  y  $x_0 + h$  (que depende de  $x_0$  y de  $h$ ). Nótese que puede ser  $h < 0$ .

DEMOSTRACIÓN. Por el Teorema 1.3.1 tenemos  $f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + h^2 f''(\zeta)/2$  para algún  $\zeta$  entre  $x_0$  y  $x_0 + h$ . Por lo tanto,

$$f'(x_0) - \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = -\frac{h}{2} f''(\zeta),$$

como queríamos. □

Nótese que el Teorema 3.1.1 solo nos permite acotar el error si la derivada la calculamos en un nodo del polinomio interpolante. Nada nos impide utilizar la fórmula en otro caso, si estamos dispuestos a renunciar a tener una cota para el error.

**Ejemplo 3.1.2** Consideremos la función  $f(x) = e^{(\log x)^2}$  definida para  $x > 0$ . Calculemos la derivada de  $f$  en  $x = 1$  utilizando el método de derivada hacia adelante con varios valores de  $h$ .

Con  $h = 0,1$ , tenemos

$$f'(1) \approx \frac{f(1,1) - f(1)}{0,1} = 0,0913,$$

y de acuerdo con el Teorema 3.1.1 el error cometido es de la forma  $-0,05 f''(\zeta)$  para algún  $\zeta \in (1, 1,1)$ . En situaciones reales no siempre podemos acotar la segunda derivada, pero en este caso lo hacemos por motivos de ilustración. Tenemos

$$f'(x) = 2 \frac{\log x}{x} e^{(\log x)^2}, \quad f''(x) = \left( \left( 2 \frac{\log x}{x} \right)^2 + 2 \frac{1 - \log x}{x^2} \right) e^{(\log x)^2}.$$

Vemos que  $f''$  es positiva en  $[1, 1,1]$  y podemos acotarla fácilmente en este intervalo: para  $x \in [1, 1,1]$  tenemos

$$0 \leq f(x) \leq \left( \left( 2 \frac{\log 1,1}{1,1} \right)^2 + 2 \right) e^{(\log 1,1)^2} \leq 2,0789.$$

Con ello, podemos asegurar que nuestro cálculo aproximado de  $f'(1)$  comete un error en el intervalo  $[-0,05 \cdot 2,0789, 0]$ , esto es el error cometido está entre  $-0,1039$  y  $0$ . Como en este ejemplo podemos calcular el valor exacto de la derivada  $f'(1) = 0$ , comprobamos que el error cometido (igual a  $-0,0913$ ) está en efecto en el intervalo de error que nos da el Teorema 3.1.1.

### Derivada de tres puntos y derivada central (o del punto medio)

El siguiente paso en nuestro método general consiste en tomar el polinomio interpolante de grado 2 en 3 nodos, y luego calcular la derivada de la función en uno de esos nodos. Tomemos pues  $x_0, x_1, x_2 \in [a, b]$  en los que el valor de la función es conocido. El polinomio interpolante del Teorema 2.1.2 es entonces

$$p(x) = f(x_0) \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + f(x_1) \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + f(x_2) \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}. \quad (3.1)$$

Por lo tanto, tenemos:

$$f'(x) \approx p'(x) = f(x_0) \frac{2x - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + f(x_1) \frac{2x - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + f(x_2) \frac{2x - x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)},$$

que es la llamada fórmula de tres puntos. Poniendo ahora  $x_1 = x_0 + h_1$ ,  $x_2 = x_0 + h_2$  tenemos:

$$f'(x_0) \approx -f(x_0) \frac{h_1 + h_2}{h_1 h_2} - f(x_0 + h_1) \frac{h_2}{h_1(h_1 - h_2)} - f(x_0 + h_2) \frac{h_1}{h_2(h_2 - h_1)}.$$

De nuevo mostramos una expresión para el error:

**Teorema 3.1.3** Sea  $f \in C^3[a, b]$ . Sean  $x_0, h_1, h_2 \in \mathbb{R}$ ,  $h_1, h_2 \neq 0$ ,  $h_1 \neq h_2$ , tales que  $x_0, x_0 + h_1, x_0 + h_2 \in [a, b]$ . Entonces,

$$f'(x_0) = -f(x_0) \frac{h_1 + h_2}{h_1 h_2} - f(x_0 + h_1) \frac{h_2}{h_1(h_1 - h_2)} - f(x_0 + h_2) \frac{h_1}{h_2(h_2 - h_1)} + \frac{h_1 h_2}{6} f'''(\zeta),$$

para algún  $\zeta \in (a, b)$  entre  $x_0, x_0 + h_1$  y  $x_0 + h_2$  (que depende de  $x_0, h_1, h_2$ ). Nótese que puede ser  $h_1 < 0$  y/o  $h_2 < 0$ .

DEMOSTRACIÓN. Por el Teorema 2.1.6, en las condiciones del teorema tenemos:

$$f(x) = p(x) + \frac{f'''(\zeta_x)}{6} (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2),$$

donde para cada  $x \in [a, b]$  el punto  $\zeta_x$  está en  $(a, b)$ . Despejando el término con la tercera derivada tenemos:

$$f'''(\zeta_x) = \frac{6(f(x) - p(x))}{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)} = \frac{6(f(x) - f(x_0))}{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)} + \frac{6(p(x_0) - p(x))}{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)},$$

que tiene límite cuando  $x \rightarrow x_0$  igual a

$$\frac{6}{(x - x_1)(x - x_2)} (f'(x_0) - p'(x_0)). \quad (3.2)$$

Por compacidad del intervalo  $[a, b]$ , existe un punto de acumulación  $\zeta$  del conjunto  $\{\zeta_x : x \in [a, b]\}$  tal que  $f'''(\zeta)$  alcanza exáctamente el valor (3.2). Despejando  $f'(x_0)$ , obtenemos:

$$f'(x_0) = p'(x_0) + \frac{f'''(\zeta)}{6} (x_0 - x_1)(x_0 - x_2).$$

El resultado se sigue notando que  $x_0 - x_1 = -h_1$ ,  $x_0 - x_2 = -h_2$ . □

La fórmula de la derivada de tres puntos adquiere una forma particularmente sencilla en tres casos:

- Si  $h_2 = h, h_1 = -h$  entonces el Teorema 3.1.3 dice:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\zeta), \quad \text{para algún } \zeta \in (x_0 - h, x_0 + h), \quad (3.3)$$

que se conoce como fórmula de la derivada central o del punto medio, y es tiene una buena precisión con solo dos evaluaciones de la función.

- Si  $h_1 = h, h_2 = 2h$  entonces el Teorema 3.1.3 dice:

$$f'(x_0) = \frac{4f(x_0 + h) - 3f(x_0) - f(x_0 + 2h)}{2h} + \frac{h^2}{3} f'''(\zeta), \quad \text{para algún } \zeta \in (x_0 - h, x_0 + h), \quad (3.4)$$

fórmula que es particularmente útil para estimar la derivada lateral en el extremo izquierdo del intervalo.

- Si  $h_1 = -h, h_2 = -2h$  entonces el Teorema 3.1.3 dice:

$$f'(x_0) = \frac{-4f(x_0 - h) + 3f(x_0) + f(x_0 - 2h)}{2h} + \frac{h^2}{3} f'''(\zeta), \quad \text{para algún } \zeta \in (x_0 - h, x_0 + h), \quad (3.5)$$

fórmula que es particularmente útil para estimar la derivada lateral en el extremo derecho del intervalo.

**Ejemplo 3.1.4** Calculemos de forma aproximada la derivada de la función  $f(x) = e^{(\log x)^2}$  del Ejemplo 3.1.2, utilizando la fórmula de la derivada central  $h = 0,1$ :

$$f'(1) \approx \frac{f(1,1) - f(0,9)}{0,2} = -0,0102,$$

que es una aproximación de  $f'(1) = 0$  mejor que la proporcionada por la derivada hacia delante.

**Ejemplo 3.1.5** Consideremos los datos de la Figura 2.3:

T [K]	2,3	2,7	2,9	3,2	3,5	3,7
P [kPa]	6,38512	13,6218	18,676	28,2599	40,4082	49,9945

Vamos a dar aproximaciones para la derivada  $dP/dT$  de la presión con respecto a la temperatura utilizando las fórmulas de esta sección. Por ejemplo en  $T = 2,3$  usamos la fórmula dada por el Teorema 3.1.3 con  $h_1 = 0,4, h_2 = 0,6$  con lo que:

$$P'(T = 2,3) \approx -P(2,3) \frac{1}{0,24} - P(2,7) \frac{0,6}{-0,08} - P(2,9) \frac{0,4}{0,12} = 13,3055 \text{ kPa/K.}$$

Calculemos ahora aproximadamente la derivada en  $T = 2,7$  usando el Teorema 3.1.3 con  $h_1 = -0,4, h_2 = 0,2$ :

$$P'(2,7) \approx -P(2,7) \frac{-0,2}{-0,08} - P(2,3) \frac{0,2}{0,24} - P(2,9) \frac{-0,4}{0,12} = 22,8779.$$

Ahora usando la Fórmula (3.3) con  $h = 0,3$  calculamos

$$P'(T = 3,2) \approx \frac{P(3,5) - P(2,9)}{0,6} = 36,2203 \text{ kPa/K.}$$

Podemos de forma similar calcular las derivadas en los otros puntos de forma aproximada utilizando la fórmula general del Teorema 3.1.3 con valores adecuados de  $h_1, h_2$ . Además el Teorema 3.1.3 nos permite obtener información cuantitativa sobre los errores que se cometen utilizando esta aproximación, siempre que podamos dar alguna cota sobre la tercera derivada.

### Derivada de cinco puntos

De igual manera que hemos hecho en la sección anterior con un polinomio cuadrático interpolado en 3 puntos, podemos hacerlo para orden superior. Obviamente los cálculos se complican, pero de entre todas las fórmulas que se pueden obtener hay una particularmente sencilla que escribimos sin demostración. Se obtiene interpolando la función en los 5 puntos dados por  $x_0, x_0 \pm h, x_0 \pm 2h$  y aproximando la derivada de la función por la derivada del polinomio interpolante. La fórmula obtenida, que presentamos a continuación, se conoce como fórmula de la derivada de cinco puntos, y es en general más precisa que la de la derivada central, aunque exige evaluar la función en 5 puntos en lugar de solo en 3.

**Teorema 3.1.6** Sea  $f \in C^5[a, b]$ , y sean  $x_0 \in [a, b]$ ,  $h > 0$  tales que  $x_0 \pm h, x_0 \pm 2h \in [a, b]$ . Entonces,

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{12h} + \frac{h^4}{30}f^{(5)}(\zeta),$$

para algún  $\zeta \in (x_0 - 2h, x_0 + 2h)$ .

**Ejemplo 3.1.7** Calculemos de forma aproximada la derivada de la función  $f(x) = e^{(\log x)^2}$  del Ejemplo 3.1.2, utilizando la fórmula de la derivada de 5 puntos con  $h = 0,1$ :

$$f'(1) \approx \frac{f(0,8) - 8f(0,9) + 8f(1,1) - f(1,2)}{1,2} = 0,000796,$$

que es una aproximación de  $f'(1) = 0$  mejor que la proporcionada por la derivada hacia delante y mejor también que la proporcionada por la fórmula de la derivada central.

### 3.1.2. Fórmulas para la segunda derivada

Al igual que en el caso de la primera derivada, para calcular la segunda derivada tomamos el polinomio interpolante de la función en una colección de nodos y aproximamos la segunda derivada de la función por la segunda derivada del polinomio. Tomando un polinomio cuadrático como en (3.1) tenemos la aproximación:

$$f''(x_0) \approx p''(x_0) = \frac{2f(x_0)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + \frac{2f(x_1)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + \frac{2f(x_2)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}, \quad (3.6)$$

donde debemos señalar que la aproximación de la segunda derivada no depende del punto, esto es, si elegimos por ejemplo  $x_0 = 1, x_1 = 1,1, x_2 = 0,9$  concretos y usamos la fórmula para aproximar  $f''(1)$  obtenemos el mismo número que si la usamos para aproximar por ejemplo  $f''(8)$ , lo que suena un poco absurdo. Sin embargo, no es absurdo: la precisión de nuestro cálculo sí que dependerá del punto. Llamando como antes  $x_1 = x_0 + h_1, x_2 = x_0 + h_2$  concluimos:

$$f''(x_0) \approx \frac{2f(x_0)}{h_1 h_2} + \frac{2f(x_0 + h_1)}{h_1(h_1 - h_2)} + \frac{2f(x_0 + h_2)}{h_2(h_2 - h_1)}.$$

De forma similar al caso de la primera derivada, tenemos una fórmula más sencilla suponiendo que  $x_1 = x_0 - h$  y  $x_2 = x_0 + h$

**Teorema 3.1.8** Sea  $f \in C^4[a, b]$ . Sean  $x_0, h \in \mathbb{R}$ ,  $h > 0$ , tales que  $x_0 \pm h \in [a, b]$ . Entonces,

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + h) + f(x_0 - h) - 2f(x_0)}{h^2} + \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\zeta),$$

para algún  $\zeta \in (x_0 - h, x_0 + h)$ .

DEMOSTRACIÓN. Por el Teorema 1.3.1 tenemos

$$\frac{f(x_0 + h) + f(x_0 - h) - 2f(x_0)}{h^2} = \frac{h^2 f''(x_0) + \frac{h^4}{24}(f^{(4)}(\zeta_1) + f^{(4)}(\zeta_2))}{h^2},$$

para algunas  $\zeta_1, \zeta_2 \in (x_0 - h, x_0 + h)$ . El resultado se sigue usando el Teorema 1.1.7.  $\square$

Para aproximar la segunda derivada de  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  en los extremos del intervalo, seguimos el mismo procedimiento obteniendo las fórmulas

$$f''(a) \approx \frac{f(a + 2h) + f(a) - 2f(a + h)}{h^2}, \quad f''(a) \approx \frac{f(a - 2h) + f(a) - 2f(a - h)}{h^2}$$

**Ejemplo 3.1.9** Utilizemos la fórmula del Teorema 3.1.8 para calcular la segunda derivada de  $f(x) = e^{(\log x)^2}$  en  $x = 1$  con  $h = 0,1$ :

$$f''(x) \approx \frac{f(1,1) + f(0,9) - 2f(1)}{0,01} = 2,0288,$$

mientras que el valor exacto es  $f''(1) = 2$ .

**Ejemplo 3.1.10** Consideremos de nuevo los datos de la Figura 2.3, y calculemos de forma aproximada la segunda derivada de la presión en función de la temperatura en  $T = 2,7$ . Para ello usaremos la fórmula (3.6) con  $h_1 = -0,4$ ,  $h_2 = 0,2$ , obteniendo:

$$\frac{d^2 P}{dT^2} \approx \frac{2P(2,7)}{-0,08} + \frac{2P(2,3)}{0,24} + \frac{2P(2,9)}{0,12} = 23,9310.$$

Vamos a utilizar esta información de la siguiente manera: en el Ejemplo 3.1.5 hemos calculado de manera aproximada la primera derivada  $P'(2,7) \approx 22,8779$ . Podemos por lo tanto ya aproximar el polinomio de Taylor de segundo orden de  $P$  cerca de  $T = 2,7$ :

$$q(T) = P(2,7) + P'(2,7)(x - 2,7) + \frac{P''(2,7)}{2}(x - 2,7)^2 \approx 13,6218 + 22,8779(x - 2,7) + 11,9655(x - 2,7)^2.$$

En la Figura 3.1 dibujamos dicho polinomio junto con la tabla de datos.

### 3.1.3. Adivinando el futuro sin saber casi nada

Con estos resultados para cálculo aproximado de derivadas y segundas derivadas, y armados del Teorema de Taylor podemos calcular aproximadamente el valor en el futuro inmediato de una función  $y : [-2h, h] \rightarrow \mathbb{R}$  a partir de su valor actual  $y(0)$ , y su valor en dos posiciones anteriores equiespaciadas  $y(-h), y(-2h)$ :

$$y(h) \approx y(0) + hy'(0) + \frac{h^2}{2}y''(0) \approx y(0) + h \frac{-4y(-h) + 3y(0) + y(-2h)}{2h} + \frac{h^2}{2} \frac{y(-2h) + y(0) - 2y(-h)}{h^2},$$

y simplificando:

$$y(h) \approx y(-2h) + 3(y(0) - y(-h)). \quad (3.7)$$

Dado que la derivada de una función vectorial se calcula componente a componente, esta misma aproximación vale si  $y : [-2h, h] \rightarrow \mathbb{R}^n$ . Esta observación resulta particularmente interesante si pensamos que la función define la trayectoria de un objeto,  $r : [-2h, h] \rightarrow \mathbb{R}^3$ . Supongamos que conocemos  $r(-2h)$ ,  $r(-h)$  y  $r(0)$ , esto es la

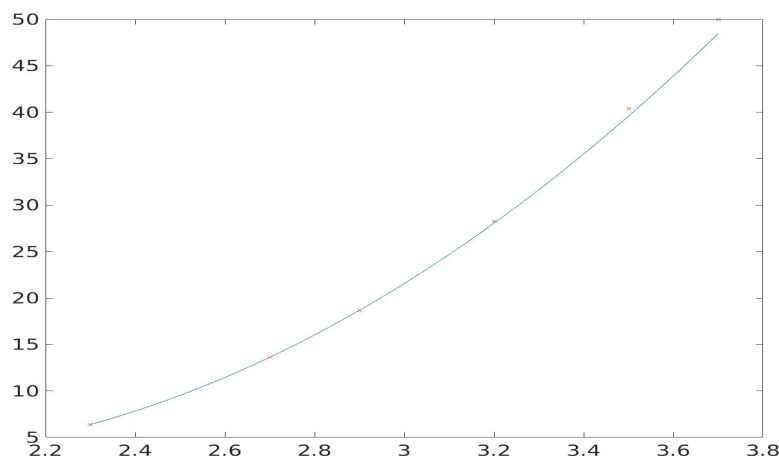


Figura 3.1: Datos de la tabla de la Figura 2.3 junto con el polinomio de Taylor (cerca de  $T = 2,7$ ) aproximado calculado con la primera y segunda derivadas de forma aproximada a partir de datos de la tabla. Se aprecia que el polinomio se ajusta bien a la tabla de valores sobre todo cuando nos encontramos cerca de  $T = 2,7$ , como es de esperar.

posición actual y las posiciones en dos momentos anteriores (hace  $h$  y  $2h$  segundos respectivamente). Entonces, podemos adivinar (o dar al menos una predicción justificada de) la posición en el momento futuro  $r(h)$ .

Otra manera de alcanzar la misma fórmula es aproximar el valor de  $y(h)$  por el de  $p(h)$ , siendo  $p$  el polinomio interpolante de  $y$  en nodos  $x = -2h, h, 0$ .

Obviamente podemos equivocarnos al hacer una predicción tan sencilla, puesto que las fórmulas que hemos escrito involucran signos de aproximación  $\approx$ , pero en muchas ocasiones este sencillo cálculo produce información útil e interesante.

**Ejemplo 3.1.11** *Entre las preocupaciones máximas de la humanidad se encuentran retos importantes como la explosión demográfica, el aumento de la desigualdad o el cambio climático. Armados con nuestra fórmula (3.7) podemos hacer predicciones de cómo evolucionarán en el futuro los indicadores de estos y otros problemas. Por ejemplo, según la Organización de las Naciones Unidas la población mundial total en los años 2000, 2005, 2010 y 2015 fue respectivamente de 6126,622, 6519,636, 6929,725 y 7349,472 millones de personas (fuente: <https://esa.un.org/unpd/wpp/>). Supongamos primero que estuviésemos a fecha de 2010, y que utilizásemos la fórmula de arriba para predecir la población en 2015. Nuestro cálculo daría:*

$$6126,622 - 3 \cdot 6519,636 + 3 \cdot 6929,725 = 7356,889 \text{ millones de personas,}$$

frente a los 7349,472 que resultó ser en realidad según las mediciones de la ONU. Animados por la precisión de nuestro cálculo, podemos utilizar el mismo método para predecir la población mundial en 2020, dato desconocido a fecha de hoy (junio de 2017):

$$6519,636 - 3 \cdot 6929,725 + 3 \cdot 7349,472 = 7778,877 \text{ millones de personas.}$$

La previsión realizada por la ONU es de 7758,157 millones de personas.



Señalamos que para utilizar este método de predicción no necesitamos conocer nada de los procesos que subyacen a la función de estudio, esto es, no necesitamos conocer las leyes físicas que rigen los procesos para predecirlos a corto plazo. Los niños pequeños, que por lo general no saben de Física, pueden predecir fácilmente dónde caerá una pelota que se les lanza, con suficiente precisión como para alcanzarla en muchas ocasiones. A corto plazo, no hace falta demasiada información, solo hace falta saber utilizarla! Veamos otro ejemplo de uso.

**Ejemplo 3.1.12** Hemos medido la altitud (altura sobre el horizonte) de Saturno en el cielo nocturno tres días consecutivos a las 23 : 00, a saber, los días 2, 3 y 4 de julio de 2017, que fueron tres días particularmente buenos para la observación astronómica en Cantabria. Los valores respectivos de la latitud fueron  $19^{\circ}05'$ ,  $19^{\circ}27'$ ,  $19^{\circ}49'$ . En grados:

$$19,08^{\circ}, 19,45^{\circ}, 19,82^{\circ}.$$

Utilizando la fórmula (3.7) podemos dar una aproximación de la altitud de Saturno a la misma hora del día 5 de julio (día en el que este ejemplo se ha escrito). La predicción es:

$$19,08 + 3 \cdot (19,82 - 19,45) = 20,19^{\circ} = 20^{\circ}11'.$$

La altitud real de Saturno a las 23:00 horas de la noche del 5 de julio fue de  $20^{\circ}10'$ , con lo que nuestra predicción se equivocó por un minuto de arco. Nótese que no hemos necesitado utilizar ningún conocimiento sobre las características orbitales de Saturno ni ninguna otra información para realizar nuestra predicción.

### 3.1.4. Cálculo de derivadas en presencia de errores de medición

Mirando a las fórmulas de los teoremas anteriores para el cálculo de derivadas, da la impresión de que lo que conviene es tomar un valor de  $h > 0$  extremadamente pequeño, por ejemplo  $h = 10^{-16}$  o incluso  $h = 10^{-1000}$ . Sin embargo, nuestra intuición nos dice que algo fallará si lo hacemos así: será muy difícil distinguir los valores de  $f(x_0 - h)$ ,  $f(x_0)$  y  $f(x_0 + h)$  con lo que seguramente nuestro cálculo no es muy preciso. De hecho, para calcular la derivada estaremos llevando a cabo dos de las operaciones poco recomendables según la Sección 1.4: restar dos números muy parecidos y dividir por un número muy pequeño.

En esta sección le damos un contexto teórico a esta observación, partiendo de la suposición de que las medidas que podemos hacer de la función  $f$  tienen un pequeño error  $\epsilon$ .

**Teorema 3.1.13** Supongamos que podemos calcular valores de  $f \in C^3[a, b]$  con precisión  $\epsilon$ . Entonces, utilizando la fórmula de la primera derivada central, en el mejor de los casos podemos calcular valores de  $f'$  con precisión del orden de  $\epsilon^{2/3}$ .

DEMOSTRACIÓN. Nuestro cálculo de la derivada en  $x_0$  será:

$$\frac{f(x_0 + h) + \epsilon_1 - f(x_0 - h) - \epsilon_2}{2h} = f'(x_0) + \frac{h^2}{6} f'''(\zeta) + \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{2h},$$

donde  $\zeta \in (x_0 - h, x_0 + h)$  y lo único que sabemos de  $\epsilon_1, \epsilon_2$  es que son reales de módulo a lo más  $\epsilon$ . El error en valor absoluto puede por lo tanto alcanzar (dado que los signos de los  $\epsilon$  pueden ser distintos) un valor de

$$\frac{\epsilon}{h} + \frac{h^2}{6} |f'''(\zeta)| \leq \frac{\epsilon}{h} + \frac{h^2}{6} M,$$

donde  $M$  es alguna cota para la tercera derivada en  $[a, b]$ . Si elegimos el mejor  $h$  posible, esto es, el que minimiza el error (derivando e igualando a 0 la expresión de arriba), tenemos:

$$h = \left( \frac{3\epsilon}{M} \right)^{1/3},$$

y por lo tanto la cota que podemos dar para el error es:

$$\left(\frac{9M}{8}\right)^{1/3} \epsilon^{2/3}.$$

□

En la demostración anterior no conocemos el valor de  $M$ , lo que complica las cosas en la práctica pues no podemos elegir el mejor valor de  $h$ , pero lo que dice el teorema es que sea cual sea el valor de  $M$  (salvo que sea 0 o extremadamente cercano a 0, esto es, salvo que la función que estamos derivando sea prácticamente igual a una parábola), el error que cometemos al calcular la derivada es mucho mayor que el que cometemos al calcular la función. Por ejemplo si calculamos la función con precisión de una millonésima es  $\epsilon = 10^{-6}$  pero la derivada la calcularemos únicamente con precisión del orden de  $\epsilon^{2/3} = 10^{-4}$ , esto es del orden de una diezmilésima.

En la práctica tratamos de elegir valores de  $h$  que no sean ni demasiado grandes ni demasiado pequeños, y solo una cierta familiaridad con el problema nos permite elegirlos de esa manera. Nótese que dependiendo del problema que estemos tratando un mismo número puede considerarse “grande” o “pequeño” (por ejemplo, 10 segundos en el movimiento de la Tierra al rededor del Sol es un tiempo extremadamente pequeño, pero 10 segundos para un objeto en caída libre en la superficie de la Luna es un tiempo bastante grande).

Usando la fórmula de cinco puntos la situación mejora pero solo un poco. Para órdenes superiores la situación es lógicamente peor. Queda como tarea para el alumno el calcular el orden de precisión de las derivadas obtenidas mediante estos métodos, esto es, resultados análogos al Teorema 3.1.13 para la fórmula de cinco puntos, para la fórmula de la segunda derivada simétrica, etc.

**Ejemplo 3.1.14** Para ilustrar cómo el uso de un  $h$  dado influye en la aproximación de la derivada, calculamos la derivada de  $f(x) = e^x$  en  $x = 0$  (cuyo valor exacto es  $f'(0) = 1$ ) de forma aproximada con distintos valores de  $h$ , mostrando el resultado en la Figura 3.2.

### 3.1.5. Derivadas de orden superior

Si en algún momento necesitamos calcular por ejemplo la tercera o la cuarta derivada de una función, podemos utilizar el siguiente método:

$$f'''(x) \approx \frac{f''(x+h) - f''(x-h)}{2h},$$

y a continuación la fórmula del Teorema 3.1.8 para aproximar  $f''(x \pm h)$ . Obviamente tenemos más alternativas, por ejemplo utilizar

$$f'''(x) \approx \frac{f'(x+h) + f'(x-h) - 2f'(x)}{h^2},$$

y entonces usar la fórmula del Teorema 3.1.3 para aproximar  $f'(x \pm h)$ . No damos detalles sobre las fórmulas de error, pero sí que indicamos que tal como se ha explicado en la Sección 3.1.4 el cálculo será menos preciso para órdenes de derivación superior, y solo lo acometeremos cuando no tengamos otro remedio.

### 3.1.6. Cálculo de matrices Jacobianas, gradientes, divergencias y Laplacianos

Es frecuente también tener que calcular matrices Jacobianas y gradientes de funciones. Recordemos que si  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  entonces la matriz Jacobiana de  $f$  en  $v \in \mathbb{R}^m$  se define por

$$Jf(v) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} = \left( \frac{\partial f}{\partial x_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial f}{\partial x_n} \right),$$

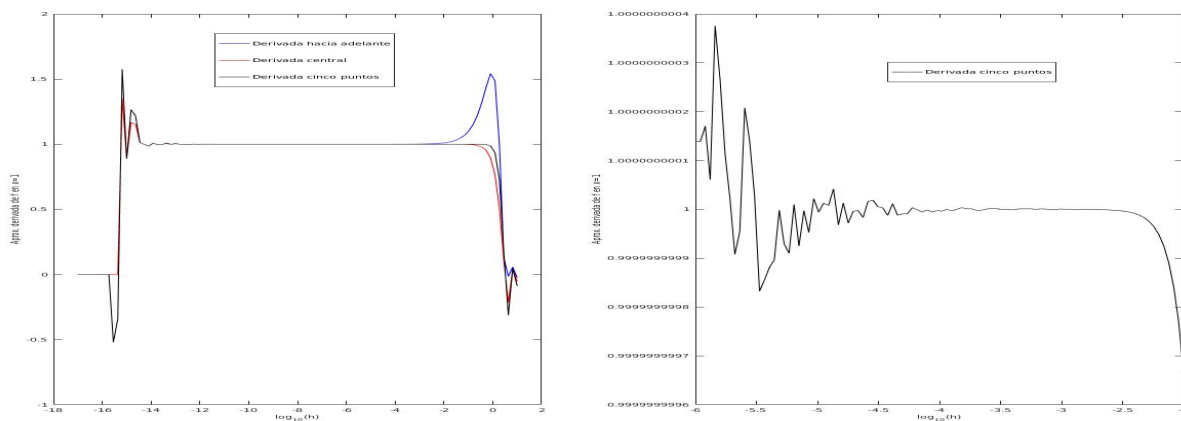


Figura 3.2: Cálculo aproximado de la derivada de la función  $f(x) = \sin x + \sin^2 x$  en el punto  $x = 2\pi$ , cuyo valor exacto es  $f'(2\pi) = 1$ . En el gráfico de la izquierda se aprecia cómo todas las fórmulas cometen errores muy significativos cuando  $h < 10^{-13}$ . En el gráfico de la derecha, detalle de la derivada de cinco puntos para los valores centrales  $h \in [10^{-6}, 10^{-2}]$ , viéndose que el mejor valor es de  $h \approx 10^{-3}$ . Nótese la escala logarítmica en el eje de abscisas.

y es la única matriz que, multiplicada por  $\dot{v} \in \mathbb{R}^n$ , proporciona la derivada direccional de  $f$  en el punto  $v$  la dirección de  $\dot{v}$ . Similarmente, el gradiente de  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  en  $v$  es el vector columna  $\nabla f(v) \in \mathbb{R}^n$  cuyas entradas son las derivadas parciales de  $f$  con respecto a las coordenadas de  $v$ . Se tiene  $\nabla f(v) = Jf(v)^T$  (nótese que en ese caso,  $Jf(v)$  es un vector fila). Para calcular la matriz Jacobiana de una función sin requerir el uso de las fórmulas de las funciones coordenadas, recordamos simplemente que

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = g'(0), \quad \text{donde } g(t) = f(v + te_j),$$

y la última fórmula se puede aproximar mediante los métodos vistos anteriormente (¡incluso aunque  $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$  tenga valores vectoriales! esto se debe a que la derivada de una función vectorial es el vector de las derivadas de sus componentes). En la fórmula de arriba,  $e_j$  es el  $j$ -ésimo vector de la base canónica. Con ello, podemos tomar (usando la derivada central, por ejemplo):

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} \approx \frac{f(v + he_j) - f(v - he_j)}{2h}, \quad (3.8)$$

para un  $h$  pequeño. El siguiente programa muestra una implementación en Matlab de este procedimiento:

```
function J=matrizjacobiana(f,v,h)
% Calcula la matriz jacobiana de f en v, usando la formula central.
% Se supone que f va de R^n a R^m, todos los vectores son columnas.
% h es el parametro para calcular la derivada
n=length(v); % dimension de la salida.
m=length(f(v)); % dimension de la llegada.
J=zeros(m,n); % Fijamos el tamaño de la matriz.
```

```

for k=1:n
% k-esima columna de J:
e=zeros(n,1);
e(k)=1; % k-esimo vector de la base canonica.
J(:,k)=(f(v+h*e)-f(v-h*e))/2/h;
end

```

Si deseamos calcular el gradiente de  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  ya sabemos que basta tomar  $Jf(x)^T$ . En cuanto a la divergencia de una función vectorial  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ , definida por

$$\operatorname{div}f(v) = \frac{\partial f_1}{\partial x_1} + \cdots + \frac{\partial f_n}{\partial x_n},$$

podemos utilizar un procedimiento similar (calculando cada derivada parcial con el método dado en (3.8) o directamente tomando la traza de la matriz Jacobiana, un procedimiento más costoso en tiempo de ejecución pero el que usamos a continuación):

```

function div=divergencia(f,v,h)
% Calcula la divergencia de f en v, usando la formula central.
% Se supone que f va de R^n a R^n, todos los vectores son columnas.
% h es el parametro para calcular la derivada
J=matrizjacobiana(f,v,h);
div=trace(J);

```

**Ejemplo 3.1.15** Calcula de forma aproximada el gradiente de la función  $f(x, y, z) = xy \cos(z) + e^{xz}$  en el punto  $(x, y, z) = (1, 1, \pi)$ , utilizando la fórmula de la derivada central con paso  $h = 10^{-1}$ . Escribe una estimación en error absoluto del error que cometes en cada coordenada del gradiente. *Respuesta: tenemos  $\nabla f(1, 1, \pi) \approx (a, b, c)$  con:*

$$a = \frac{f(1,1,1,\pi) - f(0,9,1,\pi)}{0,2} = 72,9004,$$

$$b = \frac{f(1,1,1,\pi) - f(1,0,9,1,\pi)}{0,2} = -1,$$

$$c = \frac{f(1,1,3,241592) - f(1,1,3,041592)}{0,2} = 23,179.$$

*Estimamos los errores: dado que  $a = g'(0)$  con  $g(t) = f(1+t, 1, \pi)$ , la fórmula para el valor absoluto del error cometido es (para algún  $\zeta \in (-0,1, 0,1)$ ):*

$$\frac{h^2}{6} |g'''(\zeta)| = \frac{\pi^3 e^{(1+\zeta)\pi}}{600} \leq 1,6372.$$

*De forma similar, para  $b$  y  $c$  los errores son respectivamente a lo sumo:*

$$\frac{0}{600} = 0, \quad \frac{\sin 0,1 + e^{\pi+0,1}}{600}.$$

Finalmente, damos también un método para calcular el Laplaciano de  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ :

$$\Delta f(v) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} + \cdots + \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2},$$

aproximando luego cada derivada segunda por la fórmula

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j^2} \approx \frac{f(v + he_j) + f(v - he_j) - 2f(v)}{h^2},$$

que consiste en aplicar el método del Teorema 3.1.8. Con ello, un programa de Matlab para calcular el Laplaciano es:

```
function lap=laplaciano(f,v,h)
% Calcula el Laplaciano de f en v, usando la formula simetrica central.
% Se supone que f va de R^n a R, todos los vectores son columnas.
% h es el parametro para calcular la derivada
lap=0;
n=length(v);
for k=1:n
    e=zeros(n,1);
    e(k)=1; % k-esimo vector de la base canonica.
    lap=lap+(f(v+h*e)+f(v-h*e)-2*f(v))/h^2;
end
```

**Ejemplo 3.1.16** Escribe una fórmula para calcular el rotacional de una función  $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  en el punto  $(0, 0, 0)$  calculando únicamente la función en 6 puntos. *Respuesta: El rotacional de  $f$  viene dado por:*

$$\nabla \times f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_z}{\partial y} - \frac{\partial f_y}{\partial z} \\ \frac{\partial f_x}{\partial z} - \frac{\partial f_z}{\partial x} \\ \frac{\partial f_y}{\partial x} - \frac{\partial f_x}{\partial y} \end{pmatrix}$$

Calculamos cada una de esas cantidades en  $(0, 0, 0)$  con la fórmula de la derivada central para derivadas parciales y para un  $h$  pequeño de nuestra elección:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_x}{\partial y} &\approx \frac{f_x(0, h, 0) - f_x(0, -h, 0)}{2h}, & \frac{\partial f_x}{\partial z} &\approx \frac{f_x(0, 0, h) - f_x(0, 0, -h)}{2h} \\ \frac{\partial f_y}{\partial x} &\approx \frac{f_y(h, 0, 0) - f_y(-h, 0, 0)}{2h}, & \frac{\partial f_y}{\partial z} &\approx \frac{f_y(0, 0, h) - f_y(0, 0, -h)}{2h} \\ \frac{\partial f_z}{\partial x} &\approx \frac{f_z(h, 0, 0) - f_z(-h, 0, 0)}{2h}, & \frac{\partial f_z}{\partial y} &\approx \frac{f_z(0, h, 0) - f_z(0, -h, 0)}{2h} \end{aligned}$$

Con ello, una fórmula aproximada para el rotacional es:

$$\nabla \times f \approx \frac{1}{2h} \begin{pmatrix} f_z(0, h, 0) - f_z(0, -h, 0) - (f_y(0, 0, h) - f_y(0, 0, -h)) \\ f_x(0, 0, h) - f_x(0, 0, -h) - (f_z(h, 0, 0) - f_z(-h, 0, 0)) \\ f_y(h, 0, 0) - f_y(-h, 0, 0) - (f_x(0, h, 0) - f_x(0, -h, 0)) \end{pmatrix}.$$

Nótese que solo tenemos que evaluar la función en 6 puntos para obtener toda esta información.

## 3.2. Exercises. Numerical differentiation

### Exercise 3.1

Compute up to precision  $O(h^5)$  the error of the different formulas for the first and second derivative.

### Exercise 3.2

Estimate the worst case error obtained by computing with the five point formula the derivative of  $\sin(x)$ . Same for the second derivative.

### Exercise 3.3

Obtain a new formula for the second derivative by differentiating by each of the three given methods the first derivative, computed with each of the three methods.

### Exercise 3.4

Attempt to compute the first and second derivative of  $f(x) = |x|$  at  $x = 0$  using all the formulas you have. What happens?

### Exercise 3.5

Assume that you are given a function  $f(x)$  whose  $k$  derivatives satisfy (for all  $k$ ) that  $|f^{(k)}(x)| \leq 20$ . Assume moreover that you can compute  $f(x)$  with precision  $10^{-3}$ . Which value of  $s$  is the optimal for the central difference formula for computing the derivative of  $f$ ? And for the 5 points formula?

### Exercise 3.6

Derive a formula for computing approximately the third derivative of a function at  $x_0$  by evaluating it at  $x_0, x_0 \pm h, x_0 \pm 2h$ . Give also an expression for the error. Hint: start by writing down the Taylor expansion up to order 4.

### Exercise 3.7

Approximate the first and second derivative at  $x = -2, -1, 0, 1, 2$  using forward, central and five point differentiation with  $h = 0,001$  for the following functions, and compare the obtained value to the analytical result. Write down a table with the four approximations, the analytical results and the corresponding errors.

$$f(x) = 2x, \quad f(x) = 3x - x^2, \quad f(x) = \sin(x), \quad f(x) = \cos(x), \quad f(x) = e^{\cos(x)}, \quad f(x) = |x|, \quad f(x) = \frac{x}{1+x^2}.$$

Same question for  $f(x) = \log(2+x)$  but this time at  $x = -1, 9, -1, 0, 1, 2$ .

### Exercise 3.8

Write a program `numericalderivative.m` that computes the derivative of a function at a vector of points. Input:  $f, x_{data}, method$ . Output vector:  $f'(x_{data})$ . The methods should be one of the following strings: `forward`, `central` or `fivepoints`.

### Exercise 3.9

For all the functions in 3.7) plot their numerically computed versus analytical first and second derivatives with the different methods in the interval  $[-5, 5]$  (for the last function,  $[-7/4, 10]$ ).

**Exercise 3.10**

Write a program `jacobianmatrix.m` that on input  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  and  $x_0 \in \mathbb{R}^n$  produces an approximation to the Jacobian matrix  $Jf(x_0)$  of  $f$  at  $x_0$  using the five point formula for each direction. Use this program to compute the Jacobian matrix and the Jacobian determinant for the following functions.

$$f_1 \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} xy - \frac{e^x}{1+y^2} \\ x \end{pmatrix}, \quad f_2 \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^2 + \sin(yz) \\ y - z^2 \\ z \end{pmatrix},$$

$$f_3 \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(x+y-z) \\ \sin(x^2 - y^2 + z^2) \\ \frac{1}{1+x^2+z^3} \end{pmatrix}, \quad f_4 \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y+x \\ z+y+x \\ z^2 - y^2 + xe^{zy} \end{pmatrix}$$

**Exercise 3.11**

Recall the chain rule for the Jacobian matrix of a composite function: if  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  and  $g : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^l$  then the Jacobian matrices satisfy:

$$J(g \circ f)(x_0) = Jg(f(x_0))Jf(x_0). \quad (3.9)$$

Let  $f_1, f_2, f_3, f_4$  be as in 3.10. Compute the Jacobian matrix of  $f_1 \circ f_1$  using the left-hand term in (3.9) and your program of exercise 3.10. Now, compute it again but using the right-hand term of (3.10). Is the result exactly equal? The same question for  $f_1 \circ f_2$ ,  $f_2 \circ f_3$  and  $f_4 \circ f_3$ .

**Exercise 3.12**

Using the data in exercise 2.14, approximate the value of the acceleration suffered by a person in free fall at different moments.

**Exercise 3.13**

In exercise 5.8 you learnt how to produce realistic trajectories of cannon balls near to earth surface. Let us fix the parameters of the ball and air resistance in such a way that the mass of the ball is 10Kg and the modulus of the resistance force is  $0,01\|v\| + 0,001\|v\|^2$  being  $v$  the speed. Produce a table which for a fixed angle of 45 degrees and different initial speeds from 100 to 500 meters per second describes:

- The total distance (in the horizontal axis).
- The final velocity of the ball in the moment of impact.

Then, compute the derivative of both quantities with respect to the speed of launch. Compute also the second derivative of the same function.

**3.3. Cálculo aproximado de integrales definidas**

Sea  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  una función continua. De  $f$  supondremos únicamente que sabemos calcularla en valores concretos. Esto es, dado  $x_0 \in [a, b]$ , podemos calcular  $f(x_0)$  (tal vez con un error dado) pero no tenemos a nuestra disposición una fórmula cerrada para  $f$ . Deseamos aproximar el valor de  $\int_a^b f(x) dx$ .

Alternativamente, puede sepamos la existencia de una función pero ni siquiera podemos calcularla en los valores que deseamos, sino que disponemos únicamente de una tabla de valores. Nuestros métodos deben cubrir ambas necesidades.

### 3.3.1. Métodos basados en la interpolación

Partimos de que conocemos una tabla de datos  $y_1 = f(x_1), \dots, y_k = f(x_k)$  de la función, sea porque esa es la única información de la función, sea porque podemos calcular la función en cualquier punto que deseemos. Una familia de métodos para calcular integrales definidas se inspira en la siguiente idea.

- Interpolamos la función en los valores dados, llamemos  $p(x)$  a la función obtenida.
- Calcular simbólicamente la integral definida de  $p(x)$  entre  $a$  y  $b$ , siendo el valor calculado una aproximación de la integral definida de  $f(x)$  entre  $a$  y  $b$ .

Afortunadamente, en muchos casos no es necesario hacer este proceso desde cero, sino que desarrollando las fórmulas de antemano podemos obtener sencillas reglas de integración y tener alguna información sobre los errores cometidos, sobre todo en el caso de que los  $x_1, \dots, x_k$  sigan algún patrón determinado. En las siguientes secciones desarrollamos algunas de estas reglas concretas en detalle.

**Ejemplo 3.3.1** Usando los datos de la Figura 2.3 queremos aproximar el valor medio de la presión para temperaturas en el intervalo  $[2,3, 3,7]$ :

$$E(P(T)) = \frac{1}{3,7 - 2,3} \int_{2,3}^{3,7} P(T) dT.$$

Para ello, aproximamos la integral de  $P(T)$  (una función desconocida) por la integral del polinomio  $p(x)$  que interpola a  $P(T)$  en la tabla de datos que tenemos. Dicho polinomio fue calculado en el Ejemplo 2.1.3, y podemos calcular su integral de forma exacta obteniendo el valor:

$$\int_{2,3}^{3,7} p(x) dx = 33,3889,$$

con lo que concluimos:

$$E(P(T)) \approx \frac{33,3889}{1,4} = 23,8492 \text{ kPa}.$$

#### Regla del punto medio (interpolación polinomial)

Aplicamos el paradigma de esta sección con  $k = 1$ ,  $x_1 = m$  el punto medio entre  $a$  y  $b$ . Consideramos por ello el polinomio interpolante en un punto:

$$p(x) = f(m) = f\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

Podemos entonces aproximar:

**Teorema 3.3.2 (Regla del punto medio)** Supongamos que  $f \in C^2[a, b]$  y sea  $m = (a+b)/2$  el punto medio entre  $a$  y  $b$ . Entonces,

$$\int_a^b f(x) dx = (b-a)f(m) + \frac{(b-a)^3}{24} f''(\zeta),$$

para algún  $\zeta \in (a, b)$ .



DEMOSTRACIÓN. Según el paradigma explicado al comienzo de la sección:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p(x) dx = (b-a)f(m).$$

Pero utilizando el desarrollo de Taylor podemos decir más, dado que sabemos que

$$f(x) = f(m) + f'(m)(x-m) + \frac{f''(\zeta_x)}{2}(x-m)^2,$$

donde  $\zeta_x \in (a, b)$  depende de  $x$ . Integrando a ambos lados:

$$\int_a^b f(x) dx = f(m)(b-a) + f'(m) \int_a^b (x-m) dx + \int_a^b \frac{f''(\zeta_x)}{2}(x-m)^2 dx.$$

La integral en el centro de la expresión de la derecha vale exactamente cero, y la segunda integral del término de la derecha, utilizando el Teorema 1.2.2, vale (para algún  $\zeta \in (a, b)$ ):

$$\frac{f''(\zeta)}{2} \int_a^b (x-m)^2 dx = \frac{f''(\zeta)}{2} \frac{(b-a)^3}{12},$$

demostrando el resultado. □

Vemos una ilustración gráfica de este método en la Figura 3.3.

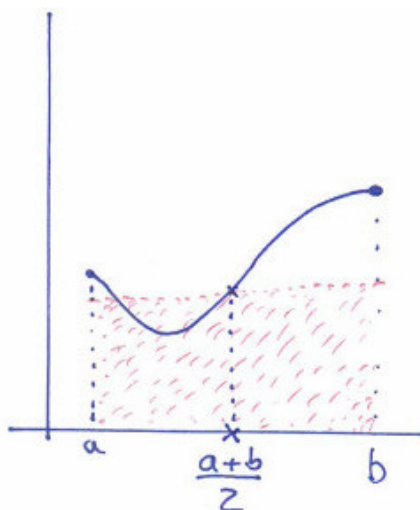


Figura 3.3: Ilustración de la fórmula del punto medio para aproximar integrales definidas. El área bajo la función (esto es, la integral) se aproxima por el área del rectángulo de la figura.

**Ejemplo 3.3.3** Consideremos la integral de  $\cos x$  entre 0 y  $\pi/4$ , cuyo valor exacto es

$$\int_0^{\pi/4} \cos x dx = [\sin x]_0^{\pi/4} = \sin \frac{\pi}{4} = \frac{\sqrt{2}}{2} = 0,7071.$$

El valor proporcionado por la regla del punto medio es

$$\int_0^{\pi/4} \cos x \, dx \approx \frac{\pi}{4} \cos \frac{\pi}{8} = 0,7256,$$

un error de 2 décimas. Es un error considerable pero el trabajo que nos ha llevado es muy poco! Con métodos más avanzados conseguiremos mejores resultados.

**Ejemplo 3.3.4** Aproximamos el valor de la integral de  $f(x) = \frac{e^x}{x}$  en el intervalo  $[1, 1,5]$  usando la regla del punto medio:

$$\int_1^{1,5} \frac{e^x}{x} \, dx \approx (1,5 - 1) \frac{e^{1,25}}{1,25}$$

El valor que da el software Matlab para la integral es de 1,4062, con lo que nuestro error ronda las 3 décimas.

**Nota 3.3.5** Una demostración independiente del Teorema 3.3.2 es como sigue: consideremos el polinomio interpolante  $p_\epsilon(x)$  de  $f(x)$  en  $m \pm \epsilon$ :

$$p_\epsilon(x) = \frac{x - m - \epsilon}{-2\epsilon} f(m - \epsilon) + \frac{x - m + \epsilon}{2\epsilon} f(m + \epsilon).$$

Es fácil ver que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} p_\epsilon(x) = f(m) + f'(m)(x - m).$$

Se tiene por tanto usando el error de la interpolación dado en el Teorema 2.1.6:

$$\int_a^b f(x) \, dx = \int_a^b p_\epsilon(x) \, dx + \int_a^b \frac{(x - m + \epsilon)(x - m - \epsilon)}{2} f''(\zeta_{\epsilon,x}) \, dx.$$

La primera de las dos integrales en el término de la derecha tiende, en el límite cuando  $\epsilon \rightarrow 0$ , al valor  $(b - a)f(m)$ . La segunda, en el mismo límite, vale

$$\int_a^b \frac{(x - m)^2}{2} f''(\zeta_x) \, dx = \frac{f''(\zeta_\epsilon)}{2} \frac{(b - a)^3}{12}$$

para algún  $\zeta \in (a, b)$  usando el Teorema 1.2.2. El alumno avanzado puede notar aquí el uso de un argumento de compacidad.

### Regla del trapecio

Aplicamos el paradigma de esta sección con  $k = 2$ ,  $x_1 = a$ ,  $x_2 = b$ . El polinomio interpolante es en este caso:

$$p(x) = \frac{x - b}{a - b} f(a) + \frac{x - a}{b - a} f(b).$$

**Teorema 3.3.6 (Regla del trapecio)** Supongamos que  $f \in C^2[a, b]$ . Entonces,

$$\int_a^b f(x) \, dx = (b - a) \frac{f(a) + f(b)}{2} - \frac{(b - a)^3}{12} f''(\zeta),$$

para algún  $\zeta \in (a, b)$ .

DEMOSTRACIÓN. Escribimos el polinomio interpolante con término de error:

$$f(x) = p(x) + \frac{(x-a)(x-b)}{2} f''(\zeta_x),$$

donde  $\zeta_x \in (a, b)$  depende de  $x$ . Integrando a ambos lados y utilizando el Teorema 1.2.2,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= (b-a) \frac{f(a) + f(b)}{2} + \int_a^b \frac{(x-a)(x-b)}{2} f''(\zeta_x) dx \\ &= (b-a) \frac{f(a) + f(b)}{2} + f''(\zeta) \int_a^b \frac{(x-a)(x-b)}{2} dx, \end{aligned}$$

para algún  $\zeta \in (a, b)$ . Calculando exactamente la última integral obtenemos el resultado deseado. □

Vemos una ilustración gráfica de este método en la Figura 3.4.

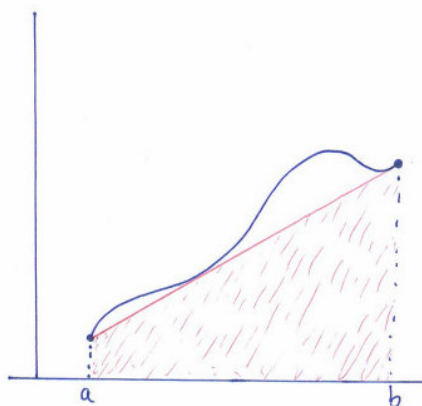


Figura 3.4: Ilustración de la fórmula del trapecio para aproximar integrales definidas. El área bajo la función (esto es, la integral) se aproxima por el área del trapecio de la figura.

**Ejemplo 3.3.7** Como en el Ejemplo 3.3.3, consideremos la integral de  $\cos x$  entre 0 y  $\pi/4$ , cuyo valor exacto es 0,7071. El valor proporcionado por la regla del trapecio es

$$\int_0^{\pi/4} \cos x dx \approx \frac{\pi \cos \frac{\pi}{4} + \cos 0}{4} = 0,6704,$$

un error de 2 décimas.

**Ejemplo 3.3.8** Como en el Ejemplo 3.3.4, intentamos aproximar el valor de la integral de  $f(x) = \frac{e^x}{x}$  en el intervalo  $[1, 1,5]$ . Ya hemos visto que el valor que da el software Matlab para la integral es de 1,4062. Usando la regla del trapecio:

$$\int_1^{1,5} \frac{e^x}{x} dx \approx (1,5 - 1) \frac{e + \frac{e^{1,5}}{1,5}}{2} = 1,4265,$$

con lo que nuestro error ronda las 2 centésimas.

### Regla de Simpson

Aplicamos el paradigma de esta sección con  $k = 3$ ,  $x_1 = a$ ,  $x_2 = m$ ,  $x_3 = b$ , donde  $m$  es el punto medio entre  $a$  y  $b$ . El polinomio interpolante es entonces:

$$p(x) = \frac{(x-m)(x-b)}{2h^2}f(a) - \frac{(x-a)(x-b)}{h^2}f(m) + \frac{(x-a)(x-m)}{2h^2}f(b),$$

donde  $h = m - a = b - m = (b - a)/2$  es la mitad de la longitud del intervalo.

**Teorema 3.3.9 (Regla de Simpson)** *Supongamos que  $f \in C^4[a, b]$ . Entonces,*

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{6} \left( f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) - \frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\zeta).$$

**DEMOSTRACIÓN.** La fórmula que obtenemos si directamente integramos como antes con el error de la interpolación no es tan satisfactoria como la del teorema. Para obtener la fórmula del teorema utilizamos un método alternativo, mencionado ya en la demostración alternativa de la prueba de la regla del punto medio: tomamos  $\epsilon > 0$  que luego dejaremos tender a 0. Entonces, consideramos  $p_\epsilon(x)$  el polinomio interpolante de  $f$  en  $a, b, m \pm \epsilon$ . El límite de la integral de ese polinomio precisamente la fórmula dada en la regla de Simpson. El error es a su vez:

$$\int_a^b \frac{(x-a)(x-m+\epsilon)(x-m-\epsilon)(x-b)}{4!} f^{(4)}(\zeta_{\epsilon,x}) dx,$$

que utilizando de nuevo el Teorema 1.2.2 es precisamente

$$f^{(4)}(\zeta_\epsilon) \int_a^b \frac{(x-a)(x-m+\epsilon)(x-m-\epsilon)(x-b)}{4!} dx = -f^{(4)}(\zeta_\epsilon) \frac{(b-a)^3((b-a)^2 - 20\epsilon^2)}{2880}.$$

Un argumento de compacidad que utiliza la continuidad de  $f^{(4)}$  muestra entonces que el error es el que se enuncia en el teorema. □

**Ejemplo 3.3.10** *Como en el Ejemplo 3.3.3, consideremos la integral de  $\cos x$  entre 0 y  $\pi/4$ , cuyo valor exacto es 0,7071. El valor proporcionado por la regla de Simpson es:*

$$\int_0^{\pi/4} \cos x dx \approx \frac{\pi}{24} \left( \cos 0 + \cos \frac{\pi}{8} + \cos \frac{\pi}{4} \right) = 0,7072,$$

*un error del orden de una diezmilésima.*

**Ejemplo 3.3.11** *Como en el Ejemplo 3.3.4, intentamos aproximar el valor de la integral de  $f(x) = \frac{e^x}{x}$  en el intervalo  $[1, 1,5]$ . Ya hemos visto que el valor que da el software Matlab para la integral es de 1,4062. Usando la regla de Simpson:*

$$\int_1^{1,5} \frac{e^x}{x} dx \approx \frac{0,5}{6} \left( e + 4 * \frac{e^{1,25}}{1,25} + \frac{e^{1,5}}{1,5} \right) = 1,4063,$$

*con lo que nuestro error es del orden de una diezmilésima.*

Los dos ejemplos de esta sección muestran cómo la Regla de Simpson, con muy poco trabajo más que la regla del trapecio y que la regla del punto medio, proporciona dos aproximaciones muy buenas. Por este motivo, es la más usada de las tres.

### Reglas compuestas y adaptativas

Cada uno de estos métodos puede ser considerado en su versión compuesta, consistente simplemente en dividir el intervalo original en  $k$  subintervalos, usualmente iguales en longitud, y aplicar la regla de integración en cada uno de ellos, sumando el resultado. Los errores en el caso de subintervalos iguales son fácilmente calculables a partir de lo anterior. Para punto medio, trapecio y Simpson respectivamente:

$$\begin{aligned} & \frac{(b-a)^3}{24k^2} f''(\zeta), \\ & -\frac{(b-a)^3}{12k^2} f''(\zeta), \\ & -\frac{(b-a)^5}{2880k^4} f^{(4)}(\zeta), \end{aligned}$$

siendo en cada caso  $\zeta$  algún punto de  $(a, b)$ , y requiriendo en los dos primeros casos  $f$  de tipo  $C^2$  y en el último  $f$  de clase  $C^4$ .

Finalmente, mencionamos que en muchos programas de uso habitual hay funciones que calculan integrales definidas mediante este tipo de reglas compuestas, utilizando un método adaptativo que consiste en comparar el valor obtenido con la regla simple, con el valor obtenido con la regla compuesta de dos intervalos. Si ambos valores difieren en menos de una cierta cantidad elegida por el usuario o predeterminada por el programa consideramos que el cálculo es lo bastante exacto; en otro caso repetimos en cada subintervalo. Programar esta regla adaptativa es un poco complicado, mencionamos que la función `quad` (`integral` en las versiones más nuevas) de Matlab lleva a cabo este proceso.

### 3.3.2. Métodos de cuadratura Gaussiana

Otra familia de métodos muy usados en la práctica son los llamados métodos de cuadratura Gaussiana, que consisten en elegir, dado un intervalo  $[a, b]$ , un conjunto de nodos  $x_1, \dots, x_n$  y un conjunto de “pesos”  $c_1, \dots, c_n$  con la propiedad de que para todo polinomio  $p(x)$  de grado menor o igual que  $2n - 1$  se tenga

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{i=1}^n c_i p(x_i).$$

La novedad principal respecto a la anterior forma de actuar es la introducción de unos “pesos” que le dan distinto valor a los distintos puntos. En realidad en la Regla de Simpson ya hemos hecho algo así, pero ahora nos enfrentamos al problema desde un punto de vista general.

Al igual que hicimos con la interpolación y los nodos de Chebyshev, primero consideramos el problema en el intervalo  $[-1, 1]$ . En este caso se obtiene la llamada cuadratura de Gauss-Legendre.

#### Breve introducción a los polinomios de Legendre

Los polinomios de Legendre son polinomios que resuelven la ecuación diferencial de Legendre

$$\frac{d}{dx} \left( (1-x^2) P_n'(x) \right) + n(n+1) P_n(x) = 0.$$

Se pueden escribir como

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left( (x^2 - 1)^n \right).$$

También se pueden calcular recursivamente:

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1}xP_n(x) - \frac{n}{n+1}P_{n-1}(x).$$

Resulta que  $P_n(x)$  tiene grado  $n$ , y además se tiene la siguiente propiedad:

$$\int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x) dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{mn},$$

esto es son polinomios ortogonales con respecto al producto escalar dado por

$$\langle p, q \rangle = \int_{-1}^1 p(x)q(x) dx$$

Recordemos que el conjunto de polinomios de grado menor o igual que  $n$  es un espacio vectorial de dimensión  $n+1$ , del que ya hemos estudiado dos bases:

- La base canónica  $1, x, x^2, \dots, x^n$ ,
- La base de Newton utilizada en el método de diferencias divididas, dada por  $1, (x - a_0), (x - a_0)(x - a_1), \dots, (x - a_0) \cdots (x - a_n)$ , que depende de una colección de nodos  $a_0, \dots, a_n$ . En realidad, más que una base, esto es una familia de bases.

Los polinomios de Legendre forman una tercera base, distinta de las anteriores, del mismo espacio de polinomios de grado acotado. Que los polinomios son linealmente independientes está claro por ser ortogonales, y como tienen el cardinal apropiado han de ser base del espacio de polinomios.

En particular, dado un polinomio  $p(x)$  de grado  $2n-1$  cualquiera, lo puedo escribir como

$$p(x) = \sum_{k=0}^{2n-1} a_k P_k(x), \quad \text{para algunos } a_k \in \mathbb{R}. \quad (3.10)$$

### Cuadratura de Gauss–Legendre

Los polinomios de Legendre se utilizan para integrar funciones en el intervalo  $[-1, 1]$  de la siguiente manera.

**Teorema 3.3.12** Sean  $x_1, \dots, x_n$  las raíces del  $n$ -ésimo polinomio de Legendre. Definamos:

$$c_i = \int_{-1}^1 \prod_{j=1, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx.$$

Entonces, para todo polinomio de grado menor o igual que  $2n-1$  se tiene

$$\int_{-1}^1 p(x) dx = \sum_{i=1}^n c_i p(x_i).$$

Esto es, se cumplen las condiciones que demandamos en la introducción de esta sección

DEMOSTRACIÓN.

Veamos que los pesos y nodos elegidos dan la integral exacta para todos los polinomios de Legendre  $P_k$ ,  $0 \leq k \leq 2n - 1$ . Primero, si  $k < n$ , tenemos que el polinomio de Lagrange asociado a  $P_k$  con nodos  $x_1, \dots, x_n$  es exactamente igual a  $P_k$ , esto es

$$P_k(x) = \sum_{i=1}^n \prod_{j=1, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} P_k(x_i),$$

con lo que

$$\int_{-1}^1 P_k(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{-1}^1 \prod_{j=1, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx P_k(x_i) = \sum_{i=1}^n c_i P_k(x_i),$$

como queríamos. Ahora, si  $n \leq k < 2n - 1$ , la división polinomial de  $P_k$  por  $P_n$  da

$$P_k(x) = q(x)P_n(x) + r(x),$$

donde  $q(x), r(x)$  tienen grado menor que  $n$ . Por lo tanto,

$$\int_{-1}^1 P_k(x) dx = \int_{-1}^1 q(x)P_n(x) dx + \int_{-1}^1 r(x) dx.$$

Debido a la ortogonalidad, la primera integral del término de la derecha es igual a cero y nos queda la segunda que por lo dicho antes y por definición de los  $x_i$  nos da:

$$\int_{-1}^1 P_k(x) dx = \int_{-1}^1 r(x) dx = \sum_{i=1}^n c_i r(x_i) = \sum_{i=1}^n c_i P_k(x_i).$$

Sea ahora un polinomio  $p(x)$  cualquiera de grado menor o igual que  $2n - 1$ . Como podemos escribir el polinomio como combinación lineal de  $P_0, \dots, P_{2n-1}$  (véase (3.10)) y la integral de la suma es la suma de las integrales tenemos

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 p(x) dx &= \int_{-1}^1 \sum_{k=0}^{2n-1} a_k P_k(x) dx = \sum_{k=0}^{2n-1} a_k \int_{-1}^1 P_k(x) dx = \\ &= \sum_{k=0}^{2n-1} a_k \sum_{i=1}^n c_i P_k(x_i) = \sum_{i=1}^n c_i \sum_{k=0}^{2n-1} a_k P_k(x_i) = \sum_{i=1}^n c_i p(x_i), \end{aligned}$$

luego la regla de cuadratura es exacta para polinomios de grado menor que  $2n - 1$ . □

### Uso y estimación de errores en la regla de cuadratura de Gauss–Legendre

Los pesos  $c_i$  y los ceros  $x_i$  de la regla de cuadratura de Gauss–Legendre están en tablas, no es necesario recalcularlos cada vez. Las colecciones correspondientes a  $1 \leq n \leq 5$  pueden encontrarse aquí:

Para usarlos en Matlab:

```

%% %% Tabla para integracion de Gauss--Legendre %% %%
function [nodos, pesos]=nodosypesosgl(n, a, b)

```

$n$	$x_i$	$w_i$
2	$\pm 0,57735$	1
3	0	0,888889
	$\pm 0,774597$	0,555556
4	$\pm 0,339981$	0,652145
	$\pm 0,861136$	0,347855
5	0	0,568889
	$\pm 0,538469$	0,478629
	$\pm 0,90618$	0,236927

Cuadro 3.1: Valores de los nodos y pesos para la cuadratura de Gauss–Legendre hasta  $n = 5$ .

```

if n==1
  nodos=0;
  pesos=2;
elseif n==2
  nodos=[-0.5773502692,0.5773502692];
  pesos=[1 1];
elseif n==3
  nodos=[-0.7745966692,0,0.7745966692];
  pesos=[ 0.5555555556,0.8888888889,0.5555555556];
elseif n==4
  nodos=[-0.8611363116,-0.3399810436,0.3399810436,0.8611363116];
  pesos=[0.3478548451,0.6521451549,0.6521451549,0.3478548451];
elseif n==5
  nodos=[-0.9061798459,-0.5384693101,0,0.5384693101,0.9061798459];
  pesos=[0.2369268850,0.4786286705,0.5688888889,0.4786286705,0.2369268850];
else
  error('No tengo esos numeros tabulados');
end
nodos=nodos*(b-a)/2+(b+a)/2;
pesos=pesos*(b-a)/2;

```

**Ejemplo 3.3.13** Aplicamos la regla de Gauss–Legendre para calcular aproximadamente la integral de  $\frac{1}{1+x^2}$  entre  $-1$  y  $1$ , cuyo valor exacto es

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{1+x^2} dx = [\arctan x]_{-1}^1 = \frac{\pi}{2} = 1,5708.$$

El valor dado por la regla de Gauss–Legendre con varios nodos se calcula a continuación:

$$\text{con 2 nodos: } \frac{1}{1+0,57735^2} + \frac{1}{1+(-0,57735)^2} = 1,5$$

con 3 nodos: 1,583

con 4 nodos: 1,5686

con 5 nodos: 1,571

La Regla de Simpson da 1,6667 que es peor aproximación que todas las anteriores. En efecto, Gauss–Legendre proporciona en general mejores estimaciones de la integral que Simpson. El motivo por el que frecuentemente



se utiliza Simpson es que es habitual conocer una función en los extremos y en el centro de manera automática, sin necesidad de calcularlos, lo que nos ahorra un cierto trabajo.

Para una integral en  $[a, b]$ , se usa el cambio de variable  $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}$  (hicimos lo mismo con los nodos de Chebyshev para interpolar), y tenemos la cuadratura de Gauss–Legendre en  $[a, b]$ . Podemos hacer esto de manera muy sencilla en Matlab:

```
function I=gausslegendre(f,a,b,n)
% Estima la integral de f entre a y b con n nodos
% utilizando la regla de Gauss Legendre
[nodos,pesos]=nodosypesosgl(n,a,b);
I=0;
g=@(t) f((b-a)/2*t+(a+b)/2); % Cambio de variable
for j=1:n
    I=I+pesos(j)*g(nodos(j));
end
I=I*(b-a)/2; % Por el cambio de variable
```

**Ejemplo 3.3.14** Calculamos los nodos y pesos de Gauss–Legendre en el intervalo  $[-0,5, 3]$  para  $n = 4$ , partiendo de los nodos y pesos en  $[-1, 1]$  dados en la Tabla 3.1. Los nodos son por un lado:

$$\pm 0,339981 \cdot \frac{3 - (-0,5)}{2} + \frac{3 + (-0,5)}{2} = \{0,65503325, 1,84496675\},$$

y por otro lado:

$$\pm 0,861136 \cdot \frac{3 - (-0,5)}{2} + \frac{3 + (-0,5)}{2} = \{-0,256988, 2,756988\},$$

Los pesos son los pesos de la tabla multiplicados por la longitud del intervalo dividida por 2, esto es, multiplicados por  $3,5/2 = 1,75$ . Para los nodos  $\{0,65503325, 1,84496675\}$  el peso es por tanto

$$0,652145 \cdot 1,75 = 1,14125375,$$

mientras que para los nodos  $\{-0,256988, 2,756988\}$  el peso es

$$0,347855 \cdot 1,75 = 0,60874625$$

El error cometido por la aproximación de la integral con Gauss–Legendre en un intervalo cualquier  $[a, b]$  es:

$$\frac{(b-a)^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)((2n)!)^3} f^{(2n)}(\zeta),$$

para algún  $\zeta \in (a, b)$ , suponiendo que  $f \in C^{2n}[a, b]$ . Damos esta fórmula sin demostración. Mostramos los primeros valores de la constante para  $n = 1, \dots, 5$ :

**Ejemplo 3.3.15** Como en el Ejemplo 3.3.3, consideremos la integral de  $\cos x$  entre 0 y  $\pi/4$ , cuyo valor exacto es 0,7071. El valor proporcionado por la regla Gauss–Legendre con 3 nodos es:

$$\int_0^{\pi/4} \cos x \, dx \approx 0,707107,$$

un error del orden de una diezmillonésima (si miramos más cifras decimales de las aquí expuestas), de nuevo superando la eficacia de la regla de Simpson.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$n = 5$
$\frac{(n!)^4}{(2n+1)((2n)!)^3}$	0,041667	0,00023148	$< 5 \cdot 10^{-7}$	$< 5 \cdot 10^{-10}$	$< 4 \cdot 10^{-13}$

Cuadro 3.2: Valor de la constante en la fórmula del error de la cuadratura de Gauss–Legendre para los primeros valores de  $n$ . Se ve que el error disminuye muy rápidamente con  $n$ .

**Ejemplo 3.3.16** Como en el Ejemplo 3.3.4, intentamos aproximar el valor de la integral de  $f(x) = \frac{e^x}{x}$  en el intervalo  $[1, 1,5]$ . Ya hemos visto que el valor que da el software Matlab para la integral es de 1,4062. Usando la regla Gauss–Legendre con 4 nodos:

$$\int_1^{1,5} \frac{e^x}{x} dx \approx 1,4061676,$$

con un error del orden de una cienmillonésima.

Finalmente, mencionamos que el paradigma de las reglas compuestas y adaptativas también se puede usar con estas reglas de cuadratura, para obtener aproximaciones más precisas si los intervalos de integración son grandes o si la función presenta fluctuaciones intensas.

### Otras reglas de cuadratura Gaussiana

La regla de cuadratura de Gauss–Legendre es ideal si la función que estamos tratando de integrar no es demasiado diferente de un polinomio (pongamos, si no tiene puntos con pendiente vertical o casi vertical, etc.) y están definidas en un intervalo cerrado y acotado. Sin entrar en detalles, diremos que para otro tipo de funciones hay otras reglas de cuadratura apropiadas, dando simplemente una referencia para que el lector pueda buscarlo en caso de necesidad.

- I) Si resulta que queremos calcular una integral en  $[0, \infty]$  de la forma  $\int_0^\infty e^{-x} f(x) dx$  con  $f(x)$  razonablemente parecida a un polinomio, podemos utilizar polinomios de Laguerre (o.g. con respecto a  $\int_0^\infty f(x)g(x)e^{-x} dx$  en lugar de polinomios de Legendre, con sus pesos asociados.
- II) Y si resulta que queremos calcular integrales de la forma  $\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2/2} f(x) dx$  con  $f(x)$  razonablemente parecida a un polinomio, podemos usar los polinomios de Hermite.
- III) Y si resulta que queremos calcular integrales de la forma  $\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx$  con  $f(x)$  razonablemente parecida a un polinomio, podemos usar los polinomios de Chebyshev, que hemos estudiado en el Capítulo 2.

### 3.3.3. Integrales múltiples

Es también frecuente el tener que calcular integrales definidas de varias variables. Tratamos únicamente el caso más sencillo, el de dos variables, sin términos de error.

Sea pues  $f : [a, b] \times [c, d] \rightarrow \mathbb{R}$  una función de la que podemos suponer que es continua (imprescindible) o que tiene una o varias derivadas (cuantas más y de menor valor absoluto, mejor pues menores serán los errores que comentamos con nuestras fórmulas). Utilizando el Teorema de Fubini tenemos

$$\int_{[a,b] \times [c,d]} f(x, y) d(x, y) = \int_a^b \int_c^d f(x, y) dy dx.$$

Para cada valor de  $x$  que deseemos, podemos aproximar la integral interior

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

con cualquiera de los métodos estudiados para el caso de una variable. En otras palabras, tenemos que calcular

$$\int_a^b g(x) dx,$$

donde  $g(x)$  viene proporcionado (aproximadamente) por el resultado de un cálculo o por un programa. Por lo tanto, de nuevo podemos aplicar los métodos anteriores para calcular esta integral. Por ejemplo, utilizando la regla de Simpson simple para la integral exterior tenemos:

$$\int_{[a,b] \times [c,d]} f(x, y) d(x, y) \approx \frac{b-a}{6} \left( \int_c^d f(a, y) dy + 4 \int_c^d f((a+b)/2, y) + \int_c^d f(b, y) dy \right),$$

y aproximando cada una de esas integrales por la misma regla concluimos que

$$\int_{[a,b] \times [c,d]} f(x, y) d(x, y) \approx \frac{(b-a)(d-c)}{36} (f(a, c) + f(a, d) + f(b, c) + f(b, d) + 4(f(a, (c+d)/2) + f(b, (c+d)/2) + f((a+b)/2, c) + f((a+b)/2, d)) + 16f((a+b)/2, (c+d)/2).$$

Programar esta “regla de Simpson simple bi-dimensional” queda para el lector; a continuación presentamos un programa que utiliza la cuadratura de Gauss–Legendre con la misma idea de fondo.

```
function I=gausslegendre2d(f, a, b, c, d, n, m)
% Estima la integral de f en[a,b]x[c,d] con n nodos
% en la direccion del eje x y m nodos en la del eje y
% utilizando Fubini y la regla de Gauss Legendre
I=gausslegendre(@(x) gausslegendre(@(y) f(x,y), c, d, m), a, b, n);
```

### 3.4. Exercises. Numerical integration

#### Exercise 3.14

Approximate the values of the following integrals using the Trapezoid, midpoint and Simpson’s simple rules.

$$\int_{-1}^1 e^x dx, \quad \int_0^\pi \sin(x) dx, \quad \int_0^1 e^{-x^2} dx, \quad \int_1^2 \frac{\sin x}{x} dx.$$

Give estimates for the errors using the theoretical results.

#### Exercise 3.15

Consider the function  $f(x) = e^{-x^2}$ . Approximate its integral using Simpson’s composite rule with 2 equal-length subintervals between 0 and 10. Then, approximate its integral but now with the 2 subintervals given by  $[0, 2]$ ,  $[2, 10]$ . Compare the value you obtain to 0,88623 given by Matlab’s function `integral`. Which of the two approximations is sharper? Can you explain that? Write down the theoretical error for each of the two approximations.

**Exercise 3.16**

Use Fubini's Theorem to get an expression for the approximate value of an integral of a two variable function in  $[0, 1] \times [0, 1]$  by using Simpson's simple rule in both directions. Write down a formula for the error. Compute then  $\int_0^1 xy \, dx \, dy$  and  $\int_0^1 \sin(xy) \, dx \, dy$  with your method, write down the bound for the theoretical error, and compare the result to the exact value.

**Exercise 3.17**

Compute all the integrals of 3.14) using Gauss-Legendre integration with 2 nodes, and compare the error to the error obtained using Simpson's simple rule.

**Exercise 3.18**

Write down a program `Compositesimpson.m` that computes the definite integral of  $f(x)$  between  $a$  and  $b$  using Simpson's composite rule with  $k$  subintervals. Input:  $f, a, b, k$ . Output:  $\int_a^b f(x) \, dx$ .

**Exercise 3.19**

Write down a program `Compositesimpson2D.m` that computes the definite integral of  $f(x, y)$  in  $[a, b] \times [c, d]$  using Simpson's composite rule with  $k$  subintervals in each direction. Input:  $f, a, b, c, d, k$ . Output:  $\int_{[a,b] \times [c,d]} f(x, y) \, dx \, dy$ .

**Exercise 3.20**

Use your new programs to compute good approximations of all the integrals in 3.14), 3.15) and 3.16), and also for the following integrals:

$$\int_1^{1.5} x^2 \log(x) \, dx, \quad \int_0^1 x^2 e^{-x} \, dx, \quad \int_0^{0.35} \frac{2}{x^2 - 4} \, dx, \quad \int_0^{\pi/2} \cos^2(x) \, dx,$$

$$\int_3^{3.5} \frac{x}{\sqrt{x^2 - 4}} \, dx, \quad \int_0^{\pi/4} e^{3x} \sin(2x) \, dx.$$

Write down a table with the results you get, the results given by `quad` and the error for each method.

**Exercise 3.21**

Write down a program `GaussLegendrequadrature.m` that computes the definite integral of  $f(x)$  between  $a$  and  $b$  using Gauss-Legendre quadrature up to 5 nodes. Table 3.1 contains all the information you need. Use your program to compute all the integrals in 3.20).

**Exercise 3.22**

In the same setting of Problem 3.13, compute the expected value and the variance of the total distance and the final speed when the initial speed is uniformly distributed in  $[100, 500]$ . Same question when the angle is uniformly distributed in  $[30, 60]$ . Same question with both variables (initial speed in  $[100, 500]$  and angle in  $[30, 60]$ ).

**Exercise 3.23**

In the setting of Problem 5.10, how does the average of the portion of the sphere that falls below the water over a long time depend on the initial conditions?

**Exercise 3.24**

In a swimmingpool with the shape of a rectangular prism with sides of length 5, 4, 3 meters, where would you place 9 termometers in order to measure the water temperature with the greatest accuracy? How would you then compute the average of the temperature?

**Exercise 3.25**

The Boltzmann one-dimensional distribution for the value of the speed of particles in a (one-dimensional) gass is given by

$$f(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}},$$

where  $k$  is Boltzmann's constant,  $m$  is the mass of one particle in the gass, and  $T$  is the temperature. Can you give an approximate value for the probability that  $|f(v)|$  is between 10 and 100 meters per second? You can assume that  $m = 10^{-20}$  for a heavy molecule and  $T = 10$  or any other value of the temperature that you wish.

