

Capítulo 6

Derivación e integración numérica

6.1. Introducción

El problema que abordaremos en este capítulo es el siguiente:

Dada una función $f(x)$ y dos números a y b de forma que $f(x)$ está definida en el intervalo $[a, b]$, calcular la derivada $\frac{d^k f}{dx^k}$ en un punto del intervalo o la integral $\int_a^b f(x)dx$ numéricamente, estableciendo una cota del error cometido.

Extenderemos el problema a integrales multidimensionales. En general la función $f(x)$ es conocida sólo en un conjunto discreto de puntos $x_1, x_2, \dots, x_n \in [a, b]$, por lo que será necesario en primer lugar encontrar una aproximación a la función $f(x)$ a partir de dicho conjunto discreto de puntos. Las aproximaciones empleadas serán en general polinomios interpoladores sobre el conjunto de puntos datos. En general encontraremos más práctico aproximar la función a tramos mediante una serie de polinomios interpoladores de orden bajo, digamos de orden 1 o 2, que utilizar un polinomio interpolador del orden n elevado. Como vimos en el capítulo 5, los polinomios interpoladores de orden elevado pueden oscilar salvajemente entre los puntos en los que se interpola, con comportamientos ajenos a la función original. Esto es mucho más acentuado si los valores $f(x_i)$ se conocen empíricamente y vienen afectados de un error de medida.

6.2. Reglas de derivación basadas en el polinomio interpolador

Podemos aproximar la función $f(x)$ en un punto arbitrario $x = x_0 + sh$ por su polinomio interpolador de grado n

$$P_n(x) = P_n(x_0 + sh) = \sum_{j=0}^n \binom{s}{j} \Delta^j f_0$$

y teniendo en cuenta el término de error podemos escribir

$$f(x) = P_n(x) + \binom{s}{n+1} h^{n+1} f_0^{(n+1)}(\xi)$$

Podemos estimar la derivada primera como

$$f'(x) \simeq P'_n(x) = \frac{ds}{dx} \frac{d}{ds} P_n(x_0 + sh) = \frac{1}{h} \frac{d}{ds} P_n(x_0 + sh) = \frac{1}{h} \sum_{j=0}^n \frac{d}{ds} \binom{s}{j} \Delta^j f_0$$

Tenemos para las derivadas de los primeros números combinatorios

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \binom{s}{1} &= \frac{d}{ds} s = 1 \\ \frac{d}{ds} \binom{s}{2} &= \frac{d}{ds} \frac{s(s-1)}{2} = \frac{2s-1}{2} \\ \frac{d}{ds} \binom{s}{3} &= \frac{d}{ds} \frac{s(s-1)(s-2)}{6} = \frac{3s^2-6s+2}{6} \\ \frac{d}{ds} \binom{s}{4} &= \frac{d}{ds} \frac{s(s-1)(s-2)(s-3)}{24} = \frac{4s^3-18s^2+24s-6}{24} \end{aligned}$$

con lo que podemos escribir

$$P'_n(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta f_0 + \frac{2s-1}{2} \Delta^2 f_0 + \frac{3s^2-6s+2}{6} \Delta^3 f_0 + \frac{4s^3-18s^2+24s-6}{24} \Delta^4 f_0 + \dots + \frac{d}{ds} \binom{s}{n} \Delta^n f_0 \right]$$

Análogamente, tenemos para la derivada segunda

$$P''_n(x) = \left(\frac{ds}{dx} \right)^2 \frac{d^2}{ds^2} P_n(x_0 + sh) = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 f_0 + (s-1) \Delta^3 f_0 + \frac{12s^2-36s+24}{24} \Delta^4 f_0 + \dots + \frac{d^2}{ds^2} \binom{s}{n} \Delta^n f_0 \right]$$

La máxima derivada que podremos calcular es la n -ésima ya que

$$\frac{d^n}{ds^n} [s(s-1) \dots (s-n+1)] = n!$$

y por lo tanto tenemos

$$f^{(n)}(x) \simeq P_n^{(n)}(x) = \frac{1}{h^n} \Delta^n f_0$$

6.2.1. Derivadas primeras

Vamos a estudiar las derivadas obtenidas para diversos valores del grado del polinomio n y del punto s . Si tomamos el orden del polinomio interpolador $n = 1$, tenemos

$$f'(x) \simeq P'_1(x) = \frac{1}{h} \Delta f_0 = \frac{f_1 - f_0}{h}$$

para cualquier punto s entre x_0 y x_1 . Si tomamos $n = 2$, obtenemos las llamadas fórmulas de tres puntos, que dependen del valor de s . Si consideramos el punto $s = 1$, es decir calculamos la derivada en el punto medio $x = x_1$, obtenemos la fórmula

$$f'(x_1) \simeq P'_2(x_1) = \frac{1}{h} [\Delta f_0 + \frac{1}{2} \Delta^2 f_0] = \frac{1}{h} [f_1 - f_0 + \frac{1}{2} (f_2 - 2f_1 + f_0)] = \frac{f_2 - f_0}{2h}$$

mientras que en los extremos ($s = 0$ y $s = 2$)

$$f'(x_0) \simeq P'_2(x_0) = \frac{1}{h}[\Delta f_0 - \frac{1}{2}\Delta^2 f_0] = \frac{1}{h}[f_1 - f_0 - \frac{1}{2}(f_2 - 2f_1 + f_0)] = \frac{-f_2 + 4f_1 - 3f_0}{2h}$$

$$f'(x_2) \simeq P'_2(x_2) = \frac{1}{h}[\Delta f_0 + \frac{3}{2}\Delta^2 f_0] = \frac{1}{h}[f_1 - f_0 + \frac{3}{2}(f_2 - 2f_1 + f_0)] = \frac{f_0 - 4f_1 + 3f_2}{2h}$$

Estas fórmulas tienen errores diferentes. Utilizando el término de error de la derivada (la derivada del término de error del polinomio) obtenemos

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{f_1 - f_0}{h} + \frac{2s-1}{2}h f^{(2)}(\xi) \\ f'(x) &= \frac{f_2 - f_0}{2h} - \frac{3s^2 - 6s + 2}{6}h^2 f^{(3)}(\xi) \end{aligned}$$

Tenemos que para $n = 1$ y $s = 1$

$$f'(x) = \frac{f_1 - f_0}{h} + \frac{1}{2}h f^{(2)}(\xi)$$

mientras que para $n = 2$ y $s = 1$

$$f'(x) = \frac{f_2 - f_0}{2h} - \frac{1}{6}h^2 f^{(3)}(\xi)$$

Vemos que con un polinomio de segundo orden el error varía con h^2 mientras que con uno de primer orden varía con h . El término de error para $n = 2$ en los extremos ($s = 0$ y $s = 2$) vale

$$-\frac{1}{3}h^2 f^{(3)}(\xi)$$

que es el doble que el error en $s = 1$. Es inmediato comprobar que el error es mínimo en $s = 1$. Esto responde a lo que esperamos intuitivamente: que el polinomio interpolador permite calcular la derivada en el centro del intervalo de interpolación más precisamente que en los extremos. Cuando se trabaja con puntos igualmente espaciados, se suele desear calcular las derivadas en los puntos de interpolación o puntos de la malla. En este caso, si deseamos minimizar el error de la derivada, el punto en el que calculamos la derivada es un punto de interpolación y además el punto medio del intervalo. Esto sólo es posible si el polinomio interpolador está calculado en un número impar de $2m + 1$ puntos $x_0, \dots, x_{2m}$ con x_m el punto intermedio en el cual calculamos la derivada. El grado del polinomio interpolador en $2m + 1$ puntos es $2m$ con lo que podemos escribir

$$\begin{aligned} f'(x_0 + mh) \simeq P'_{2m}(x_0 + mh) &= \frac{1}{h} \left[\Delta f_0 + \frac{2m-1}{2}\Delta^2 f_0 + \frac{3m^2-6m+2}{6}\Delta^3 f_0 + \right. \\ &\quad \left. \frac{4m^3-18m^2+24m-6}{12}\Delta^4 f_0 + \dots + \frac{d}{ds} \left(\begin{matrix} s \\ 2m \end{matrix} \right)_{s=m} \Delta^{2m} f_0 \right] \end{aligned}$$

La fórmula de cinco puntos ($m = 2$) en el punto central ($s = m = 2$) vale

$$f'(x_2) \simeq \frac{1}{h} \left[\Delta f_0 + \frac{3}{2}\Delta^2 f_0 + \frac{1}{3}\Delta^3 f_0 - \frac{1}{12}\Delta^4 f_0 \right] + \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi) = \frac{-f_4 + 8f_3 - 8f_1 + f_0}{12h} + \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi)$$

mientras que en el extremo $s = 0$

$$f'(x_0) \simeq \frac{1}{h} \left[\Delta f_0 - \frac{1}{2} \Delta^2 f_0 + \frac{1}{3} \Delta^3 f_0 - \frac{1}{4} \Delta^4 f_0 \right] = \frac{-3f_4 + 16f_3 - 36f_2 + 48f_1 - 25f_0}{12h}$$

En las fórmulas anteriores hemos utilizado las expresiones de $\Delta^3 f_0$ y $\Delta^4 f_0$ dadas en el apartado siguiente. Las fórmulas en los extremos de tres y cinco puntos son útiles para obtener las derivadas numéricas en los extremos en la interpolación por splines sujetos.

Ejercicio: Calcular la fórmula de 5 puntos para $f'(x_4)$.

6.2.2. Derivadas de orden superior

Derivando dos veces el polinomio interpolador tenemos

$$f''(x_0 + sh) \simeq P_n''(x_0 + sh) = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 f_0 + (s-1) \Delta^3 f_0 + \cdots + \frac{d^2}{ds^2} \binom{s}{n} \Delta^n f_0 \right]$$

Si $n = 2$, tenemos que sólo existe el primer término y la derivada calculada en el punto medio del intervalo de interpolación $[x_0, x_2]$ ($s = 1$) vale

$$f'(x_1) \simeq P_n''(x_1) = \frac{1}{h^2} \Delta^2 f_0 = \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{h^2}$$

Esta es la fórmula de orden más bajo para la derivada segunda. Vemos que si queremos calcular la derivada en el centro del intervalo hay que utilizar un polinomio de segundo orden para las derivadas primera y segunda (hacen falta al menos tres puntos). Análogamente, tendremos que utilizar un polinomio de cuarto orden para la derivadas tercera ya que con un polinomio de tercer orden el centro del intervalo no es un punto de interpolación. Para la derivada cuarta utilizaremos este mismo polinomio de cuarto orden. Tenemos

$$f^{(3)}(x_0 + sh) \simeq P_4^{(3)}(x_0 + sh) = \frac{1}{h^3} \left[\Delta^3 f_0 + \frac{2s-3}{2} \Delta^4 f_0 \right]$$

$$f^{(4)}(x_0 + sh) \simeq P_4^{(4)}(x_0 + sh) = \frac{1}{h^4} \Delta^4 f_0$$

Con $s = m = 2$ obtenemos para la derivada tercera y cuarta

$$f^{(3)}(x_2) \simeq \frac{1}{h^3} \left[\Delta^3 f_0 + \frac{1}{2} \Delta^4 f_0 \right] = \frac{f_4 - 2f_3 + 2f_1 - f_0}{2h^3}$$

$$f^{(4)}(x_2) \simeq \frac{1}{h^4} \Delta^4 f_0 = \frac{f_4 - 4f_3 + 6f_2 - 4f_1 + f_0}{h^4}$$

donde hemos utilizado

$$\Delta^3 f_0 = f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0$$

$$\Delta^4 f_0 = f_4 - 4f_3 + 6f_2 - 4f_1 + f_0$$

En general, para las derivadas de orden $2m-1$ y $2m$ utilizamos un polinomio de orden $2m$ ($2m+1$ puntos de interpolación” para calcular dichas derivadas en el punto central $s = m$.

$$\begin{aligned} f^{(2m-1)}(x_0 + mh) &\simeq P_{2m}^{(2m-1)}(x_0 + mh) = \\ &\frac{1}{h^{2m-1}} \left[\frac{d^{2m-1}}{ds^{2m-1}} \left(\frac{s}{2m-1} \right) \Delta^{2m-1} f_0 + \frac{d^{2m-1}}{ds^{2m-1}} \left(\frac{s}{2m} \right) \Delta^{2m} f_0 \right] = \\ &\frac{1}{h^{2m-1}} \left[\Delta^{2m-1} f_0 + \frac{1}{2} \Delta^{2m} f_0 \right] \\ f^{(2m)}(x_0 + mh) &\simeq P_{2m}^{(2m)}(x_0 + mh) = \frac{1}{h^{2m}} \Delta^{2m} f_0 \end{aligned}$$

donde hemos utilizado las expresiones

$$\begin{aligned} \frac{d^{2m-1}}{ds^{2m-1}} \left(\frac{s}{2m} \right) &= \frac{d^{2m-1}}{ds^{2m-1}} \frac{s^{2m} - (1+2+\dots+2m-1)s^{2m-1} + \dots}{(2m)!} = \\ &= \frac{(2m)!s - \frac{(2m)(2m-1)}{2}(2m-1)!}{(2m)!} = s - \frac{2m-1}{2} = s - m + \frac{1}{2} \end{aligned}$$

y

$$\frac{d^{2m}}{ds^{2m}} \left(\frac{s}{2m} \right) = \frac{d^{2m}}{ds^{2m}} \frac{s^{2m} - (1+2+\dots+2m-1)s^{2m-1} + \dots}{(2m)!} = \frac{(2m)!}{(2m)!} = 1$$

6.2.3. Términos de error

Las fórmulas que dan la derivada calculada en el punto medio del intervalo tienen una propiedad altamente interesante como veremos más adelante y es que el error se puede expresar en potencias pares de h . Para verlo consideremos un intervalo con tres puntos de interpolación, el punto medio y los extremos. Si consideramos los desarrollos de Taylor de la función en los extremos obtenemos

$$\begin{aligned} f_0 &= f_1 - hf_1' + \frac{h^2}{2}f_1'' - \frac{h^3}{3!}f_1^{(3)} + \frac{h^4}{4!}f_1^{(4)} - \frac{h^5}{5!}f_1^{(5)} + \dots \\ f_2 &= f_1 + hf_1' + \frac{h^2}{2}f_1'' + \frac{h^3}{3!}f_1^{(3)} + \frac{h^4}{4!}f_1^{(4)} + \frac{h^5}{5!}f_1^{(5)} + \dots \end{aligned}$$

Sumando las anteriores ecuaciones obtenemos

$$f_2 + f_0 = 2f_1 + h^2 f_1'' + \frac{h^4}{12} f_1^{(4)} + \dots$$

que nos permite despejar

$$f_1'' = \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{h^2} - \frac{h^2}{12} f_1^{(4)} + O(h^6)$$

Análogamente, restando los dos desarrollos de Taylor queda

$$f_2 - f_0 = 2hf'_1 + \frac{h^3}{3}f_1^{(3)} + \frac{h^5}{60}f_1^{(5)} + O(h^7)$$

de donde obtenemos

$$f'_1 = \frac{f_2 - f_0}{h} - \frac{h^2}{6}f_1^{(3)} - \frac{h^4}{120}f_1^{(5)} + O(h^6)$$

Vemos que la simetría de las fórmulas que dan derivadas en el centro del intervalo de interpolación, en las que puntos a la misma distancia del centro aparecen con los mismos coeficientes, hace que el error sea en potencias pares de h . Siempre que tenemos términos de error que son una suma de potencias pares de h podemos utilizar un procedimiento general que nos permite reducir el error numérico de manera sorprendente. Este procedimiento se conoce como extrapolación al límite o de Richardson y se utiliza ampliamente en el cálculo numérico de derivadas, integrales y ecuaciones diferenciales.

6.3. Extrapolación al límite

El método de extrapolación al límite, también conocido como extrapolación de Richardson, es un método general, que permite reducir el error en reglas cuyo término de error se puede expresar como una serie de potencias de un parámetro pequeño, en general el espaciado de una serie de puntos, h . Se aplica ampliamente en derivación e integración numéricas y en la resolución numérica de ecuaciones diferenciales. Sea un algoritmo $\mathcal{L}$ que aplicado a una función f produce una regla numérica $\mathbb{R}$ que depende de h y un término de error $\mathcal{E}$ que podemos expresar en serie de potencias de h , con coeficientes que no dependen de h . Supondremos que la serie solo contiene potencias pares de h , aunque esto no es indispensable. Podemos escribir

$$\mathcal{L}(f) = \mathbb{R}(h) + \mathcal{E}$$

$$\mathcal{E} = A_2h^2 + A_4h^4 + A_6h^6 + \dots$$

En este caso podemos calcular las reglas $\mathbb{R}(h)$ y $\mathbb{R}(h/2)$ y eliminar el término A_2h^2 . Vamos a verlo explícitamente.

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(f) &= \mathbb{R}(h) + A_2h^2 + A_4h^4 + A_6h^6 + \dots \\ \mathcal{L}(f) &= \mathbb{R}(h/2) + A_2(h/2)^2 + A_4(h/2)^4 + A_6(h/2)^6 + \dots\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(f) &= \frac{4\mathbb{R}(h/2) - \mathbb{R}(h)}{3} + A_2\frac{4(h/2)^2 - h^2}{3} + A_4\frac{4(h/2)^4 - h^4}{3} + \dots = \\ &\mathbb{R}^{(1)}(h) + A_4^{(1)}h^4 + A_6^{(1)}h^6 + \dots\end{aligned}\tag{6.1}$$

donde

$$A_4^{(1)} = A_4\frac{4(h/2)^4 - h^4}{3}, A_6^{(1)} = A_6\frac{4(h/2)^6 - h^6}{3}, \dots$$

Este procedimiento se puede continuar para eliminar potencias superiores de h . Calculamos

$$\mathfrak{L}(f) = \mathbb{R}(h/4) + A_2(h/4)^2 + A_4(h/4)^4 + A_6(h/4)^6 + \dots$$

y eliminamos el término cuadrático en h entre $\mathbb{R}(h/2)$ y $\mathbb{R}(h/4)$ obteniendo

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}(f) &= \frac{4\mathbb{R}(h/4) - \mathbb{R}(h/2)}{3} + A_2 \frac{4(h/4)^2 - (h/2)^2}{3} + A_4 \frac{4(h/4)^4 - (h/2)^4}{3} + \dots = \\ &\mathbb{R}^{(1)}(h/2) + A_4^{(1)}(h/2)^4 + A_6^{(1)}(h/2)^6 + \dots \end{aligned} \quad (6.2)$$

Podemos ahora eliminar el término en h^4 entre las ecuaciones 6.1 y 6.2:

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}(f) &= \frac{16\mathbb{R}^{(1)}(h/2) - \mathbb{R}^{(1)}(h)}{15} + A_4^{(1)} \frac{16(h/2)^4 - h^4}{15} + A_6^{(1)} \frac{16(h/2)^6 - h^6}{16} + \dots = \\ &\mathbb{R}^{(2)}(h) + A_6^{(2)}h^6 + A_8^{(2)}h^8 + \dots \end{aligned}$$

Este procedimiento se puede repetir indefinidamente mediante la relación de recurrencia

$$\begin{aligned} \mathbb{R}^{(k)}(h) &= \frac{4^k \mathbb{R}^{(k-1)}(h/2) - \mathbb{R}^{(k-1)}(h)}{4^k - 1} \\ \mathbb{R}^{(0)}(h) &= \mathbb{R}(h) \end{aligned}$$

Como criterio de convergencia se toman las diferencias $\mathbb{R}^{(k)}(h) - \mathbb{R}^{(k-1)}(h/2)$. Si estas diferencias son suficientemente pequeñas el procedimiento de extrapolación al límite ha convergido. Es conveniente ordenar en proceso de extrapolación al límite en forma de tabla

$$\begin{array}{cccc} \mathbb{R}(h) & & & \\ & \mathbb{R}^{(1)}(h) & & \\ \mathbb{R}(h/2) & & \mathbb{R}^{(2)}(h) & \\ & \mathbb{R}^{(1)}(h/2) & & \mathbb{R}^{(3)}(h) \\ \mathbb{R}(h/4) & & \mathbb{R}^{(2)}(h/2) & \\ & \mathbb{R}^{(1)}(h/4) & & \\ \mathbb{R}(h/8) & & & \\ \vdots & & & \end{array}$$

Los elementos inferiores de cada columna de la tabla dan una indicación del grado de convergencia alcanzado. El criterio de convergencia lo tomamos como $|\mathbb{R}^{(k)}(h) - \mathbb{R}^{(k-1)}(h/2)| < \varepsilon$. Si no se alcanza en una etapa k calculamos un elemento más en la primera columna y calculamos la nueva diagonal inferior, hasta que se alcance la convergencia.

Veamos como ejemplo el cálculo de la derivada de $\sqrt{x}$ en $x = 1$ mediante la fórmula de tres puntos

$$f'_1 \simeq D(h) = \frac{f_2 - f_0}{2h}$$

Consideramos $h = 0,8$, $0,4$ y $h = 0,2$ y construimos la tabla de extrapolación al límite

h	$D(h)$	$D^{(1)}(h)$	$D^{(2)}(h)$
0,8	0,559017		
		0,494693	
0,4	0,5107741		0,500142
		0,4998017	
0,2	0,5025448		

Vemos que el procedimiento de extrapolación al límite ha mejorado el valor en $h = 0,2$ en más de dos órdenes de magnitud. Este procedimiento nos permite el utilizar cálculos de tanteo con un error demasiado grande para mejorar el error del cálculo con valor de h más pequeño.

6.4. Reglas de integración basadas en el polinomio interpolador

Sean n puntos igualmente espaciados x_k , de forma que $x_k = x_0 + kh$, donde h es el espaciado. El intervalo de integración lo tomaremos como $[x_0, x_n]$. Consideraremos el intervalo descompuesto en subintervalos de longitud mh (m entero) y expresaremos la integral como la suma de las integrales en los subintervalos considerados.

Vimos en el Capítulo 5 que podíamos expresar $f(x)$ en $x = x_0 + sh$ como la suma del polinomio interpolador y su término de error (llamamos p al orden del polinomio interpolador para que no se confunda con el número n de subintervalos),

$$f(x_0 + sh) = f_0 + \binom{s}{1} \Delta f_0 + \binom{s}{2} \Delta^2 f_0 + \cdots + \binom{s}{p} \Delta^p f_0 + h^{p+1} \binom{s}{p+1} f^{(p+1)}(\eta)$$

donde s varía continuamente entre 0 y n , y η es un número perteneciente al intervalo $[x_0, x_n]$. Construiremos diferentes reglas de integración utilizando la anterior expresión con diferentes valores de p y longitudes de los subintervalos.

La regla más sencilla posible es cuando tomamos subintervalos de longitud h , ($m = 1$), y el orden del polinomio interpolador $p = 0$. En este caso tenemos,

$$f(x_0 + sh) = f_0 + h \binom{s}{1} f'(\eta)$$

con lo que resulta para el primer subintervalo

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = hf_0 + h^2 \int_0^1 sf'(\eta) ds = hf_0 + \frac{1}{2}h^2 f'(\eta_0)$$

Como η es desconocido, el término hf_0 es lo que se toma como regla de integración, mientras que $\frac{1}{2}h^2 f'(\eta)$ lo utilizaremos para estimar el error cometido. Cuando esta regla la extendemos a

los n subintervalos, obtenemos la regla de integración compuesta

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = h \sum_{i=0}^{n-1} f_i + \frac{1}{2}h^2 \sum_{i=0}^{n-1} f'(\eta_i)$$

que no es otra cosa que la suma de Riemann (inferior o superior dependiendo de que f sea creciente o decreciente) con su término de error. Podemos escribir por el teorema del valor medio

$$\frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f'(\eta_i) = f'(\eta)$$

donde η es un número perteneciente al intervalo $[x_0, x_n]$, con lo que podemos expresar el error como

$$\frac{1}{2}h^2 \sum_{i=0}^{n-1} f'(\eta_i) = \frac{1}{2}h^2 n f'(\eta) = \frac{1}{2}(x_n - x_0)h f'(\eta)$$

donde hemos utilizado $nh = x_n - x_0$. Encontramos por lo tanto que el error de la suma de Riemann es proporcional a h .

6.4.1. Regla Trapezoidal

Una regla de integración más precisa la obtenemos utilizando $p = 1$. En este caso obtenemos

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx &= hf_0 + h \int_0^1 \begin{pmatrix} s \\ 1 \end{pmatrix} \Delta f_0 ds + h^2 \int_0^1 \begin{pmatrix} s \\ 2 \end{pmatrix} f''(\eta_0) ds = \\ &hf_0 + \frac{1}{2}h\Delta f_0 - \frac{1}{12}h^3 f''(\eta_0) = h \frac{f_0 + f_1}{2} - \frac{1}{12}h^3 f''(\eta_0) \end{aligned}$$

donde hemos utilizado

$$\int_0^1 \begin{pmatrix} s \\ 2 \end{pmatrix} ds = \int_0^1 \frac{s(s-1)}{2} ds = \frac{s^3}{6} - \frac{s^2}{4} \Big|_0^1 = -\frac{1}{12}$$

Esta regla se conoce con el nombre de regla trapezoidal debido a que $h \frac{f_0 + f_1}{2}$ es el área del trapecio formado por los puntos $(x_0, 0), (x_1, 0), (x_0, f_0), (x_1, f_1)$. La regla compuesta extendida a los n subintervalos, transformando el término de error de forma análoga al caso anterior, es

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = h \left[\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + \cdots + f_{n-1} + \frac{f_n}{2} \right] - \frac{1}{12}h^2(x_n - x_0)f''(\eta)$$

El primer término del segundo miembro es la denominada regla trapezoidal compuesta

$$T_n = h \left[\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + \cdots + f_{n-1} + \frac{f_n}{2} \right]$$

mientras que el segundo término es la estimación del error, que vemos que es proporcional a h^2 . Si se desea construir un algoritmo para calcular la integral de una función basado en la regla trapezoidal de forma que si la precisión es inferior a la requerida divida el paso de integración a la mitad, no es necesario recalcular los valores de la función en los puntos ya calculados. Si con un determinado paso de integración h la precisión es inferior a la requerida, calculamos la regla correspondiente a $h/2$, T_{2n} , mediante la ecuación,

$$T_{2n} = \frac{1}{2} \left[T_n + h \sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) \right] \quad (6.3)$$

con lo cual sólo hay que calcular los n nuevos valores de la función. Esta propiedad es la clave de la eficiencia del algoritmo de Romberg que veremos más adelante.

6.4.2. Regla del punto medio

Cuando tomamos intervalos de longitud $2h$ ($m = 2$) y $p = 1$ obtenemos la siguiente regla:

$$f(x) = f_0 + \left(\frac{s}{1} \right) \Delta f_0 + h^2 \left(\frac{s}{2} \right) f''(\eta_0)$$

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx &= 2hf_0 + h \int_0^2 s \Delta f_0 ds + h^3 \int_0^2 \left(\frac{s}{2} \right) f''(\eta_0) ds = \\ &= 2hf_0 + 2h\Delta f_0 + \frac{1}{3}h^3 f''(\eta_0) = 2hf_1 + \frac{1}{3}h^3 f''(\eta_0) \end{aligned}$$

donde hemos utilizado

$$\int_0^2 \left(\frac{s}{2} \right) ds = \frac{s^3}{6} - \frac{s^2}{4} \Big|_0^2 = \frac{1}{3}$$

Esta regla la podemos escribir para un solo subintervalo como

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = hf\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) + \frac{1}{24}h^3 f''(\eta_0)$$

conocida como *regla del punto medio*. Conduce a la siguiente regla compuesta para n subintervalos

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = M_n = h \sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) + \frac{1}{24}h^3 \sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i) = h \sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) + \frac{1}{24}h^2(x_n - x_0)f''(\eta)$$

Notemos que el término de error en la regla trapezoidal y en la del punto medio tienen signos opuestos y son del mismo orden, por lo que el valor exacto de la integral se debe encontrar entre las estimas proporcionadas por ambas reglas. Volveremos más adelante sobre este punto. Podemos además escribir la relación 6.3 de la sección anterior como

$$T_{2n} = \frac{1}{2} [T_n + M_n] \quad (6.4)$$

donde es evidente que la cancelación de los términos de error hace que T_{2n} sea más precisa que T_n . Esta fórmula indica que para programar un algoritmo de integración basado en T_n , que duplique en cada paso el valor de n hasta que el error sea suficientemente pequeño, hay que calcular en cada paso sólo M_n . De esta forma sólo se calculan los valores de la función en los nuevos puntos intermedios, aprovechando los ya calculados al obtener T_n . El criterio de convergencia se tomaría como $|T_{2n} - T_n| < \varepsilon$. La reducción del paso de integración hasta que el error sea suficientemente pequeño es la base de los métodos adaptativos, en los que es esencial que no se desperdicien evaluaciones de la función.

6.4.3. Regla de Simpson

La regla de orden superior obtenida con $p = 3$ y $m = 2$ es ampliamente utilizada y se conoce como regla de Simpson. Tenemos

$$f(x) = f_0 + \binom{s}{1} \Delta f_0 + \binom{s}{2} \Delta^2 f_0 + \binom{s}{3} \Delta^3 f_0 + h^4 \binom{s}{4} f^{(4)}(\eta)$$

que integrada en un intervalo de longitud $2h$ da

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx &= 2hf_0 + h \int_0^2 s \Delta f_0 ds + h \int_0^2 \binom{s}{2} \Delta^2 f_0 ds + \\ &\quad h \int_0^2 \binom{s}{3} \Delta^3 f_0 ds + h^4 \int_0^2 \binom{s}{4} f^{(4)}(\eta) ds \\ &= 2hf_0 + 2h\Delta f_0 + \frac{1}{3}h\Delta^2 f_0 - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta) \end{aligned}$$

donde hemos utilizado las relaciones

$$\int_0^2 \binom{s}{3} ds = \left[\frac{1}{6} \left(\frac{s^4}{4} - \frac{3s^3}{3} + \frac{2s^2}{2} \right) \right]_0^2 = 0$$

$$\begin{aligned} \int_0^2 \binom{s}{4} ds &= \int_0^2 \frac{1}{24} (s(s-1)(s-2)(s-3)) ds = \left[\frac{1}{24} \left(\frac{s^5}{5} - \frac{6s^4}{4} + \frac{11s^3}{3} - \frac{6s^2}{2} \right) \right]_0^2 = \\ &= \frac{1}{24} \left(\frac{2^5 \times 12}{60} - \frac{6 \times 2^4 \times 15}{60} + \frac{11 \times 2^3 \times 20}{60} - \frac{6 \times 2^2 \times 30}{60} \right) = -\frac{16}{1440} = -\frac{1}{90} \end{aligned}$$

Notemos que la cancelación accidental del cuarto término hace que no aparezcan las diferencias terceras en la regla, lo que produce la desaparición de f_3 . Utilizando las expresiones de las diferencias obtenemos finalmente,

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = h \left(2f_0 + 2(f_1 - f_0) + \frac{1}{3}(f_2 - 2f_1 + f_0) \right) - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta) = \frac{h}{3}(f_2 + 4f_1 + f_0) - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta)$$

Cuando la extendemos a $2n$ subintervalos, utilizando el teorema del valor medio para el término de error y $2nh = x_{2n} - x_0$, obtenemos

$$\int_{x_0}^{x_{2n}} f(x)dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \cdots + 4f_{2n-2} + 2f_{2n-1} + f_{2n}) - (x_{2n} - x_0) \frac{h^4}{180} f^{(4)}(\eta)$$

La regla

$$S_{2n} = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \cdots + 2f_{2n-2} + 4f_{2n-1} + f_{2n})$$

se denomina regla de Simpson compuesta. Es inmediato demostrar la relación

$$S_{2n} = \frac{2M_n + T_n}{3}$$

Vemos que la regla de Simpson es un promediado de la regla trapezoidal y la regla del punto medio de forma que los términos de error cuadráticos en h se anulen. La regla de Simpson de hecho es un primer paso de un proceso de extrapolación al límite. El procedimiento de extrapolación al límite se puede explotar para mejorar el error mediante el método de Romberg que exponemos a continuación. Es interesante notar que aunque el número de evaluaciones de la función aumenta con el orden del polinomio para las reglas elementales, en las reglas compuestas el número de evaluaciones es esencialmente igual al número de subintervalos, independientemente del orden del polinomio. Sin embargo el término de error disminuye como h^{p+1} o lo que es lo mismo como $1/n^{p+1}$. Notemos para finalizar esta sección que podemos expresar la regla de Simpson, poniendo $M_n = 2T_{2n} - T_n$ con ayuda de la ecuación 6.3, como

$$S_{2n} = \frac{2M_n + T_n}{3} = \frac{2(2T_{2n} - T_n) + T_n}{3} = \frac{4T_{2n} - T_n}{3}$$

que nos dice que la regla de Simpson es el primer paso de extrapolación al límite de la regla trapezoidal. Esta fórmula también nos da la regla a seguir para construir un algoritmo para doblar el número de pasos de Simpson hasta que el error sea suficientemente pequeño: Calcular T_{4n} como

$$T_{4n} = \frac{M_{2n} + T_{2n}}{3}$$

y a partir de aquí

$$S_{4n} = \frac{4T_{4n} - T_{2n}}{3}$$

Vemos que el esfuerzo adicional para calcular S_{4n} a partir de S_{2n} es el cálculo de M_{2n} . Esto permite construir un algoritmo adaptativo en el que el paso de integración se va disminuyendo hasta que la diferencia entre dos pasos consecutivos es menor que una tolerancia ε , es decir, paramos la iteración cuando $|S_{4n} - S_{2n}| < \varepsilon$.

6.5. Método de Romberg

La regla trapezoidal tiene un término de error que se puede expresar en potencias pares de h . Por lo tanto se le puede aplicar el método de extrapolación al límite. Construimos la tabla

$$\begin{array}{ccccccc}
& & T_2 & & & & \\
& & & R_2^{(1)} & & & \\
& T_4 & & & R_2^{(2)} & & \\
& & R_4^{(1)} & & & R_2^{(3)} & \\
T_8 & & & R_4^{(2)} & & \dots & R_2^{(n-1)} \\
& & & & R_4^{(3)} & & \\
& \vdots & R_{2n-2}^{(1)} & & & & \\
& T_{2^n} & & & & &
\end{array}$$

donde

$$R_m^{(k)} = \frac{4^k R_{2m}^{(k-1)} - R_m^{(k-1)}}{4^k - 1}$$

La diagonal inferior de la tabla da una idea directa del error de la aproximación. Si en un paso dado de construcción de la tabla el error $|R_2^{(n-1)} - R_4^{(n-2)}|$ no es suficientemente pequeño, y el término más elevado en la primera columna es T_{2n} , calculamos un valor adicional T_{4n} mediante

$$T_{4n} = \frac{T_{2n} + M_{2n}}{2}$$

y calculamos la nueva diagonal inferior correspondiente a este nuevo valor. Paramos la iteración cuando la estima del error

$$E = |R_2^{(n-1)} - R_4^{(n-2)}|$$

es más pequeña que la tolerancia especificada (es del orden h^{2n}). El método de Romberg necesita un número relativamente bajo de evaluaciones de la función para una precisión determinada, y es junto con los métodos gaussianos, la opción más adecuada en muchos casos.

Veamos como ejemplo el resultado del método de Romberg para $\int_0^1 \frac{dx}{1+x}$.

N	T_{2N}	$R_{2N}^{(1)}$	$R_{2N}^{(2)}$	$R_{2N}^{(3)}$
1	0,750000			
		0,694444		
2	0,708333		0,693175	
		0,693254		0,693148
4	0,697024		0,693148	
		0,693155		
8	0,694122			

Vemos que las aproximaciones originales T_{2n} tienen un error de 10^{-3} mientras que al final del proceso de extrapolación el error es de 10^{-6} . El Resultado exacto es $\ln 2 = 0.693147$. En total se han necesitado 9 evaluaciones de la función para alcanzar esta precisión (17 para verificar que se ha alcanzado).

6.6. Reglas de integración gaussianas

Si consideramos la forma de Lagrange del polinomio interpolador

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x)f(x_i)$$

podemos aproximar la integral de $f(x)$ en $[a, b]$ como

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b L_i(x)dx f(x_i) = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$$

donde

$$w_i = \int_a^b L_i(x)dx$$

Esta regla de integración es exacta si $f(x)$ es un polinomio de grado n . Las reglas de integración gaussianas consisten en elegir los puntos de interpolación de forma que las reglas anteriores sean exactas para un polinomio de orden $2n + 1$. El término de error del polinomio interpolador lo podemos expresar en la forma de diferencias divididas

$$f(x) = P_n(x) + (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)f[x, x_0, x_1, \dots, x_n]$$

Si $f(x)$ es un polinomio de grado $2n + 1$ entonces $f[x, x_0, x_1, \dots, x_n]$ debe de ser un polinomio de grado n a lo sumo ya que $(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$ es un polinomio de grado $n + 1$. Supongamos ahora que elegimos una familia de polinomios ortogonales en $[a, b]$ $p_k(x)$

$$\int_a^b p_k(x)p_j(x)dx = \delta_{ij}$$

y que tomamos $x_0, x_1, \dots, x_n$ como los ceros de $p_{n+1}(x)$. Entonces $(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$ debe de ser proporcional a p_{n+1}

$$(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n) = \alpha p_{n+1}(x)$$

Por otro lado como $f[x, x_0, x_1, \dots, x_n]$ es un polinomio de grado n entonces se podrá expresar como combinación lineal de $p_0(x), p_1(x), \dots, p_n(x)$

$$f[x, x_0, x_1, \dots, x_n] = \sum_{i=0}^n \beta_i p_i(x)$$

Por las relaciones de ortogonalidad tenemos que el término de error se anula si $f(x)$ es un polinomio de grado a lo sumo $2n + 1$:

$$\int_a^b (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n) f[x, x_0, x_1, \dots, x_n] dx = \int_a^b \alpha p_{n+1}(x) \sum_{i=0}^n \beta_i p_i(x) dx = 0$$

Las reglas gaussianas usuales consiste en tomar $[a, b]$ como $[-1, 1]$. Cualquier otro intervalo se puede reducir a este mediante el cambio de variables

$$t = \frac{2x - (a + b)}{b - a}$$

Los polinomios ortogonales sobre $[-1, 1]$ son los polinomios de Legendre. Los puntos x_i los tomamos como los ceros de los polinomios de Legendre. Los pesos w_i se pueden calcular requiriendo que la integral de los monomios x^k sea exacta

$$\int_{-1}^1 x^k dx = \frac{1 - 1^{k+1}}{k + 1} = \sum_{i=1}^n w_i x_i^k \quad (6.5)$$

para $k = 0, \dots, n$. lo que proporciona $n + 1$ ecuaciones con $n + 1$ incógnitas. También se pueden calcular exactamente a partir de su definición. Para ello tenemos en cuenta que

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} = \frac{p_n(x)}{(x - x_i)p'_n(x_i)}$$

ya que $\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x - x_j) = \frac{\alpha p_n(x)}{(x - x_i)}$ y en $p'_n(x_i)$ solo sobrevive el término sin el monomio $(x - x_i)$.

Por lo tanto

$$w_i = \int_{-1}^1 \frac{p_n(x)}{(x - x_i)p'_n(x_i)} dx$$

fórmula que se puede aún simplificar utilizando propiedades de los $p_k(x)$ a

$$w_i = \frac{2}{(1 - x_i^2)[p'_n(x_i)]^2}$$

Consideremos el caso de tres puntos. Entonces los puntos serán los ceros de $p_3(x)$ que viene dado por

$$p_3(x) = \frac{5x^3 - 3x}{2}$$

Por lo tanto $x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}$, $x_1 = 0$ y $x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}$. Los pesos los obtenemos del sistema 6.5

$$\begin{aligned} w_0 + w_1 + w_2 &= 2 \\ -\sqrt{\frac{3}{5}}w_0 + \sqrt{\frac{3}{5}}w_2 &= 0 \\ \frac{3}{5}w_0 + \frac{3}{5}w_2 &= \frac{2}{3} \end{aligned}$$

que da como soluciones $w_0 = w_2 = \frac{5}{9}$, $w_1 = \frac{8}{9}$. La regla

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \frac{5f(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + 8f(0) + 5f(\sqrt{\frac{3}{5}})}{9}$$

es exacta hasta polinomios de grado 5. Por ejemplo para x^4 tenemos

$$\int_{-1}^1 x^4 dx = \frac{5(-\sqrt{\frac{3}{5}})^4 + 5(\sqrt{\frac{3}{5}})^4}{9} = \frac{1}{5}$$

Si consideramos por ejemplo

$$\int_{-1}^1 \exp(x) dx = \frac{5\exp(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + 8\exp(0) + 5\exp(\sqrt{\frac{3}{5}})}{9} = 2,24$$

a comparar con el valor exacto 2,3504023 con sólo tres evaluaciones de la función. Si utilizamos la regla compuesta a 6 puntos, y descomponemos el intervalo $[-1,1]$ en $[-1,0]$ y $[0,1]$, tenemos, realizando los correspondientes cambios de variable:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \exp(x) dx &= \int_{-1}^0 \exp(x) dx + \int_0^1 \exp(x) dx = \int_{-1}^1 \exp\left(\frac{t-1}{2}\right) d\left(\frac{t}{2}\right) + \int_{-1}^1 \exp\left(\frac{t+1}{2}\right) d\left(\frac{t}{2}\right) \\ &= \left(\exp\left(\frac{-1}{2}\right) + \exp\left(\frac{1}{2}\right)\right) \int_{-1}^1 \exp\left(\frac{t}{2}\right) dt \end{aligned}$$

$$\int_{-1}^1 \exp(x) dx = \frac{\exp(-\frac{1}{2}) + \exp(\frac{1}{2})}{18} \left[5\exp(-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{5}}) + 8\exp(0) + 5\exp(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{5}}) \right] = 2,3504012$$

con lo que hemos obtenido un error de 10^{-6} con sólo tres evaluaciones efectivas de la función (normalmente serían 6).

Las reglas gaussianas se pueden aplicar también en forma compuesta y se caracterizan por el bajo número de evaluaciones de la función necesarios para obtener una precisión dada, que las hace competitivas método de Romberg. Su principal inconveniente es que hay que almacenar los pesos en el ordenador con la precisión requerida y que obliga a conocer la función en los ceros de los polinomios de Legendre. Se aplican frecuentemente en Física en problemas en los que la realización un bajo número de evaluaciones de la función es un punto crítico. Las reglas de integración gaussianas se pueden extender de forma inmediata a los ceros de polinomios ortogonales con un peso $\omega(x)$

$$\int_a^b \omega(x) p_k(x) p_j(x) dx = \delta_{ij}$$

mediante la igualdad

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \frac{f(x)}{\omega(x)} \omega(x)dx$$

aplicando la regla de integración a

$$g(x) = \frac{f(x)}{\omega(x)}$$

Los más conocidos son los polinomios de Chebychev, ortogonales en $[-1, 1]$ con peso $\omega(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$ que permiten obtener los pesos de forma directa. Los pesos son iguales para todos los puntos y valen

$$w_i = \frac{\pi}{n+1}$$

lo que proporciona la regla de integración para $n+1$ evaluaciones de la función

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \frac{\pi}{n+1} \sum_{i=0}^n f(x_i)(1-x_i^2)^{1/2}$$

donde $x_i = \cos\left(\frac{(2i+1)\pi}{2n}\right)$ son los ceros de los polinomios de Chebychev. En el caso de e^x el resultado no es muy bueno puesto que la función es más importante en un extremo donde el peso es menor. Pero por ejemplo para la función $\cos\frac{\pi x}{2}$ obtenemos con 6 valuaciones de la función

$$\frac{\pi}{6} \sum_{i=0}^5 \cos\left(\frac{\pi x_i}{2}\right) (1-x_i^2)^{1/2} = 1,2723$$

a comparar con el valor exacto $2/\pi = 1,2732$. Utilizar polinomios con pesos solo está justificado si los pesos forman parte del integrando como por ejemplo

$$\int_{-1}^1 \frac{\exp(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx$$

En este caso

$$\frac{\pi}{6} \sum_{i=0}^5 \exp(x_i) = 3,977463260503158$$

a comparar con el resultado exacto 3,977463260506422. Vemos que con 6 evaluaciones el error es $3 \cdot 10^{-12}$.

6.7. Integrales múltiples

Las integrales múltiples aparecen frecuentemente en diversos campos. Consideremos una integral en tres dimensiones en un dominio arbitrario

$$I = \int \int \int_V f(x, y, z) dV$$

Para calcular esta integral consideramos el volumen V limitado por dos superficies que llamaremos $z_1(x, y)$ y $z_2(x, y)$. Necesitamos además que cada sección transversal en el plano

$$I = \int_{x_1}^{x_2} dx \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy \int_{z_1(x,y)}^{z_2(x,y)} dz f(x, y, z)$$

Esta integral la podemos expresar como

$$I = \int_{x_1}^{x_2} dx f_1(x) dx$$

donde

$$f_1(x) = \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy f_2(x, y) dy$$

y a su vez

$$f_2(x, y) = \int_{z_1(x,y)}^{z_2(x,y)} dz f(x, y, z) dz$$

Vemos por lo tanto que el cálculo implica una llamada recursiva a la función de integración unidimensional. La llamada recursiva de una función a sí misma es posible en C y C++ pero no en FORTRAN77 donde es necesario realizar tantas copias idénticas de la función con nombres distintos como llamadas recursivas se realicen. Vemos además que para cada cálculo de $f_2(x, y)$, las variables x e y deben de permanecer fijas, por lo que habrá que declararlas como variables globales, es decir fuera de las funciones o como *static* si se utilizan varios programas fuente diferentes que implican dichas variables. Consideremos como ejemplo el cálculo del momento de inercia de una esfera en su centro de masas en coordenadas cartesianas. En este caso tenemos

$$f(x) = x^2 + y^2 + z^2$$

$$x_{1,2} = \mp R \quad y_{1,2}(x) = \mp \sqrt{R^2 - x^2} \quad z_{1,2}(x, y) = \mp \sqrt{R^2 - x^2 - y^2}$$

El resultado es inmediato en coordenadas esféricas: $\frac{4\pi}{5}R^5$, por lo que podemos comparar el resultado numérico con el resultado exacto.

El programa es:

```
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>
using namespace std;
//Integracion en 3d recursiva; Adaptado de quad3d de Numerical recipe
typedef long double DP;           //permite definir la precision del pr
static DP xmax;                   //variable global xmin=-xmax
// DP y1(const DP), y2(const DP)  curvas superiores e inferiores
// DP z1(const DP, const DP)      superficie inferior
// DP z2(const DP, const DP)      superficie superior
```

```

DP xglob, yglob; //variables globales
// Las raices cuadrados no definidas para argumento negativo
// Sumar 1e-15 en bordes
DP z1(const DP x, const DP y){
    return -sqrt(xmax * xmax - x * x - y * y+ 1.e-15);
}
DP z2(const DP x, const DP y){
    return sqrt(xmax * xmax - x * x - y * y+ 1.e-15);
}
DP y1(const DP x){
    return -sqrt(xmax * xmax - x * x + 1.e-16);
}
DP y2(const DP x){
    return sqrt(xmax * xmax - x * x + 1.e-16);
}
DP fun(const DP x, const DP y, const DP z){
    return x * x + y * y + z * z; //función a integrar
}
DP simpson(DP func1(const DP), const DP a, const DP b){
    //Simpson 2N intervalos
    int N = 10;
    DP h = (b - a) / (2 * N);
    DP xm, s;
    s = func1(a) + 4. * func1(b - h) + func1(b);
    xm = a + h;
    for (int j = 1; j < N; j++) {
        s += (4 * func1(xm) + 2 * func1(xm + h));
        xm += 2 * h;
    }
    // cout<<a<<" "<<b<<" "<<s<<" "<<h<<endl;
    return s * h / 3;
}
DP integ1d(DP func1(const DP), const DP a, const DP b){
    return simpson(func1, a, b); //seleccionar metodo integracion en
}
// Llamada recursiva integ3d->f1->f2->f3->func
DP f3(const DP z){
    return fun(xglob, yglob, z);
}
DP f2(const DP y){
    yglob = y;
    return integ1d(f3, z1(xglob, y), z2(xglob, y));
}

```

```

DP f1(const DP x){
    xglob = x;
    return integ1d(f2, y1(x), y2(x));
}
DP integ3d(DP fun(const DP, const DP, const DP), const DP x1, const DP x2)
    return integ1d(f1, x1, x2);
}
//fin ciclo recursivo

int main(void){
    const int NRADIO = 10;          //numero de radios para calcular Volu
    const DP PI = 3.141592653589793238;
    DP xmin, s;
    cout << "Integral de r**2 en volumen esfera" << endl << endl;
    cout << setw(11) << "radio" << setw(13) << "INTEG3D";
    cout << setw(12) << "exacto" << endl << endl;
    cout << fixed << setprecision(6);
    for (int i = 0; i < NRADIO; i++) {
        xmax = 0.1 * (i + 1);
        xmin = -xmax;
        s = integ3d(fun, xmin, xmax);
        cout << setw(12) << xmax << setw(13) << s;
        cout << setw(12) << 4.0 * PI * pow(xmax, DP(5.0)) / 5.0 << endl;
    }
    return 0;
}

```

El resultado es

Integral de r**2 en volumen esfera		
radio	INTEG3D	exacto
0.100000	0.000025	0.000025
0.200000	0.000798	0.000804
0.300000	0.006059	0.006107
0.400000	0.025532	0.025736
0.500000	0.077918	0.078540
0.600000	0.193886	0.195432
0.700000	0.419064	0.422406
0.800000	0.817034	0.823550
0.900000	1.472321	1.484063
1.000000	2.493389	2.513274

Vemos que el resultado no es demasiado exacto y precisa de muchas llamadas a la función Simpson. Si aumentamos el número de subintervalos de Simpson a 100,

el resultado no mejora demasiado y el tiempo de cálculo comienza a ser prohibitivo. Otros métodos de integración unidimensionales, como el método de Romberg o el de Gauss, son más apropiados en este caso pues precisan muchas menos evaluaciones de la función para una precisión dada. De hecho, si la función $f(x)$ en vez de ser una función suave fuese una función con variaciones bruscas, el resultado habría sido mucho peor. En estos casos, los métodos de Montecarlo son mucho más eficientes y los únicos realmente prácticos, pues en casos en los que la función toma valores muy pequeños en una parte considerable del volumen, la densidad de puntos de integración depende del valor absoluto de la función. En caso de dominios rectangulares es más eficiente utilizar reglas multidimensionales compuestas, pues se evita la sobrecarga de llamar repetidamente a la función de integración unidimensional. Si en una dimensión tenemos

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

en dos dimensiones tendremos

$$I = \int_a^b \int_c^d f(x,y)dx dy = \sum_{i=0, j=0}^{n,m} w_i w_j f(x_i, y_j)$$

y así sucesivamente para tres o más dimensiones. Aunque los w_i pueden ser los pesos de cualquier método, como por ejemplo Simpson, los métodos Gaussianos precisan un menor número de evaluaciones de la función.

6.8. Ejercicios

1. Sea la función $f(x) = \sqrt{x}$. Calcúlese $f'(x)$ en $x = 1$, numéricamente, aplicando el método de extrapolación de Richardson a las derivadas numéricas, con paso $h = 0,8, 0,4$ y $0,2$. ¿En qué factor mejora el error la extrapolación de Richardson con respecto al valor obtenido con $h = 0,2$?
2. Repetir el problema anterior para la derivada segunda.
3. Calcular la integral

$$\int_0^1 \frac{\sinh(x)}{x} dx$$

mediante la regla trapezoidal con 1, 2 y 4 intervalos, seguida de las extrapolaciones de Richardson a $O(h^4)$ y $O(h^6)$.

4. Calcular la integral

$$\int_0^1 e^x dx$$

mediante la regla de Simpson con $h=0.5$ y $h=0.25$ y aplicar una extrapolación de Richardson. Comparar con el valor exacto.

5. Un cuerpo está sometido a la fuerza conservativa $F(x) = x - \frac{1}{x}$ y se desplaza desde la posición $x = 1$ hasta $x = 1,8$. Determinar el trabajo realizado utilizando la regla trapezoidal con pasos de $h = 0,2, 0,4$ y $0,8$ y haciendo todas la extrapolaciones de Richardson posibles. Obtener asimismo, una estimación del error del mejor resultado.
6. Determinése el valor de la integral

$$\int_0^1 \frac{\sin(x)}{x} dx$$

con pasos $h = 0,5, 0,25$ y $0,125$, mediante la regla trapezoidal y las extrapolaciones de Richardson correspondientes. Estimar el error del mejor resultado.

7. A partir de la siguiente tabla de valores

x	1	2	3	4	5	6	7
$f(x)$	2.0000	4.2500	9.1111	16.0625	25.0400	36.0277	49.0204

determinar la mejor aproximación posible al valor de la integral

$$\int_1^7 f(x) dx$$

8. Se calcula una cierta integral definida mediante la regla trapezoidal, con distintos valores para el número de intervalos, obteniendo los resultados que se muestran en la tabla

número intervalos	3	7	8
Regla trapezoidal	0.2366255	0.2067888	0.2052002

Usar la extrapolación de Richardson para obtener el mejor valor posible de la integral y además una estimación del error de dicho valor.