5. Interpolación, Diferenciación e Integración Numérica

5.1. Diferencias Finitas

Dadas las abscisas x_k, uniformemente espaciadas: $x_{k+1} = x_k + h$, a las que corresponden valores $f_k \approx f(x_k)$, se definen las primeras diferencias finitas *hacia adelante* como:

$$\Delta f_k = f_{k+1} - f_k \, .$$

Análogamente pueden definirse las segundas diferencias:

$$\Delta^2 f_k = \Delta f_{k+1} - \Delta f_k = f_{k+2} - 2 f_{k+1} + f_k$$

y en general las diferencias finitas hacia adelante de orden n:

$$\Delta^n f_k = \Delta^{n-1} f_{k+1} - \Delta^{n-1} f_k$$

$$\Delta^n f_k = \sum_{i=0}^{n} (-1)^i \binom{n}{i} f_{k+n-i}$$

donde: $\displaystyle \binom{n}{i} = \frac{n!}{i!(n-i)!}$

Una *tabla de diferencias* es un arreglo de la forma:

k	f_k	Δf_k	$\Delta^2 f_k$	$\Delta^3 f_k$	$\Delta^4 f_k$	$\Delta^5 f_k$	$\Delta^6 f_k$	$\Delta^7 f_k$
0	0	0	0	0	1	-5	15	-35
1	0	0	0	1	-4	10	-20	35
2	0	0	1	-3	6	-10	15	
3	0	1	-2	3	-4	5		
4	1	-1	1	-1	1			
5	0	0	0	0				
6	0	0	0					
7	0	0						
8	0							

Puede apreciarse como un pequeño error en las f_k puede amplificarse en las diferencias finitas altas, lo que puede ser útil para identificar posibles errores en una tabla de $f(x)$.

Las diferencias finitas tienen ciertas propiedades análogas a las derivadas. Así por ejemplo:

$$\Delta(c_1 u_k + c_2 v_k) = c_1 \Delta u_k + c_2 \Delta v_k$$

$$\Delta(u_k \, v_k) = u_k \, \Delta v_k + v_{k+1} \, \Delta u_k$$

$$\Delta\left(\frac{u_k}{v_k}\right) = \frac{v_k \, \Delta u_k - u_k \, \Delta v_k}{v_k \, v_{k+1}}$$

$$\sum_{i=0}^{n-1} u_i \, \Delta v_i = (u_n v_n - u_0 v_0) - \sum_{i=0}^{n-1} \Delta(u_i v_{i+1})$$

En forma similar, pueden definirse diferencias finitas hacia atrás:

$$\nabla f_k = f_k - f_{k-1}$$

$$\nabla^n f_k = \nabla^{n-1} f_k - \nabla^{n-1} f_{k-1}$$

y diferencias centrales:

$$\delta f_k = f_{k+\frac{1}{2}} - f_{k-\frac{1}{2}}$$

$$\delta^2 f_k = \delta f_{k+\frac{1}{2}} - \delta f_{k-\frac{1}{2}} = f_{k+1} - 2 f_k + f_{k-1}$$

.....

$$\delta^n f_k = \delta^{n-1} f_{k+\frac{1}{2}} - \delta^{n-1} f_{k-\frac{1}{2}}$$

Estas diferencias están relacionadas:

$$\Delta f_k = \nabla f_{k+1} = \delta f_{k+\frac{1}{2}}$$

Y en general:

$$\Delta^n f_k = \nabla^n f_{k+n} = \delta^n f_{k+\frac{n}{2}}$$

Para puntos con espaciamiento no uniforme pueden calcularse *diferencias divididas*:

$$[x_0, x_1] = \frac{f(x_0) - f(x_1)}{x_0 - x_1} = [x_1, x_0]$$

$$[x_0, x_1, x_2] = \frac{[x_0, x_1] - [x_1, x_2]}{x_0 - x_2}$$

...

$$[x_0, x_1, x_2, \cdots x_n] = \frac{[x_0, x_1, \cdots x_{n-1}] - [x_1, x_2, \cdots x_n]}{x_0 - x_n}$$

Por ejemplo:

k	x_k	f_k	$[x_k, x_{k+1}]$	$\cdots$			
0	0	-5	6	2	1	0	0
1	1	1	12	6	1	0	
2	3	25	30	11	1		
3	4	55	63	15			
4	6	181	108				
5	7	289					

Para el caso de puntos con espaciamiento uniforme, h, las diferencias divididas pueden relacionarse con diferencias finitas hacia delante:

$$[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, \cdots x_{i+n}] = \frac{\Delta^n f_i}{n!\, h^n}$$

y en forma similar con diferencias finitas centrales o hacia atrás.

Si $f(x)$ es un polinomio de grado n, las diferencias finitas (de cualquier tipo) de orden $n+1$ o superior obtenidas con los $f_k = f(x_k)$ son cero. En el ejemplo anterior $f(x)$ es un polinomio de tercer grado.

5.2. Interpolación

Supóngase que se tiene una tabla de valores tales como:

x_n	$f(x_k)$
0	1.000 000
0.1	0.995 004
0.2	0.980 067
0.3	0.955 336
0.4	0.921 061
0.5	0.877 582

Y se requiere calcular $f(0.25)$. Para ello, $f(x)$ puede aproximarse localmente por una función más simple, $g(x)$, tal que $g(x_k) = f(x_k)$. El caso más común es aquel en que $g(x)$ es un polinomio, pero también son frecuentes las aproximaciones con funciones trigonométricas, por ejemplo:

$$g(x) = a_0 + a_1 \cos x + a_2 \cos 2x + \cdots + b_1 \operatorname{sen} x + b_2 \operatorname{sen} 2x + \cdots$$

En lo que sigue se hace énfasis en interpolaciones polinómicas. Dados $n+1$ puntos $x_k, f(x_k)$, sólo un polinomio de grado n, $p_n(x)$, satisface las condiciones $p_n(x_k) = f(x_k)$ para todo k. Sus coeficientes, a_i, podrían obtenerse resolviendo:

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & x_0 & \dots \\ 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 & \dots \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 & \dots \\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3 & \dots \\ \dots & & & & \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ \vdots \end{Bmatrix}$$

pero esto no es práctico. Otros métodos más eficientes se revisan a continuación.

5.2.1 Fórmulas de Interpolación de Newton y Otras Expresiones Análogas.

Para puntos uniformemente espaciados:

$$f(x_0 + \alpha h) = f_0 + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)\cdots(\alpha-j+1)}{j!} \Delta^j f_0$$

Esta expresión es fácil de obtener considerando un operador E tal que $E f_k = f_{k+1}$, es decir $E = 1 + \Delta$. Como $E^n f_k = f_{k+n}$, puede escribirse: $f(x_0 + \alpha h) = E^\alpha f_0 = (1+\Delta)^\alpha f_0$. Generalmente se consideran solo algunos términos de esta serie.

Por ejemplo, despreciando las diferencias de orden 3 o superior:

$$f(x_k + \alpha h) \approx f_k + \alpha \Delta f_k + \tfrac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \Delta^2 f_k =$$

$$= \frac{(\alpha-1)(\alpha-2)}{2} f_k + \alpha(2-\alpha) f_{k+1} + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2} f_{k+2}$$

Considerando los valores numéricos:

k	x_k	$f(x_k)$
2	0.2	0.980 067
3	0.3	0.955 336
4	0.4	0.921 061

(para los que $h = 0.1$), el valor de $f(0.25)$ podría obtenerse con $\alpha = 0.5$:

$$f(x_2 + 0.5h) = \frac{(-0.5)(-1.5)}{2}(0.980067) + (0.5)(1.5)(0.955336) + \frac{(0.5)(-0.5)}{2}(0.921061)$$

de donde $f(0.25) \approx 0.968895$ (el valor exacto es 0.968912)

La expresión anterior es la fórmula de interpolación de Newton con diferencias finitas hacia adelante. Similarmente puede escribirse la fórmula de Newton con diferencias hacia atrás:

$$f(x_n + \alpha h) = f_n + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)\cdots(\alpha+j-1)}{j!} \nabla^j f_n$$

o la fórmula de Newton con diferencias divididas:

$$\begin{aligned} f(x) = f_0 &+ [x_0, x_1](x - x_0) + [x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \\ &+ [x_0, x_1, x_2, x_3](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) + \cdots \end{aligned}$$

Esta última expresión es válida también para puntos con espaciamiento no uniforme.

Considérese por ejemplo la tabla de diferencias divididas:

i	x_i	f_i	$[x_i, x_{i+1}]$	$[x_i, \cdots x_{i+2}]$	$[x_i, \cdots x_{i+3}]$	$[x_i, \cdots x_{i+4}]$
-1	0.	1.000 000	-0.099 667	-0.492 113	0.037 106	0.039 670
0	0.2	0.980 067	-0.247 301	-0.477 270	0.060 908	0.037 594
1	0.3	0.955 336	-0.342 755	-0.452 907	0.079 705	
2	0.4	0.921 061	-0.478 627	-0.421 025		
3	0.6	0.825 335	-0.604 934			
4	0.7	0.764 842				

$$\begin{aligned} f(0.25) = 0.980067 &+ (-0.247301)(0.25 - 0.2) + (-0.477270)(0.25 - 0.2)(0.25 - 0.3) + \\ &+ (0.060908)(0.25 - 0.2)(0.25 - 0.3)(0.25 - 0.4) + \cdots = 0.968914 \end{aligned}$$

(Este es el resultado con 5 términos, con 3 términos se obtiene 0.968 895)

Otra alternativa es interpolar con diferencias centrales:

$$f(x_k + \alpha h) = f_k + \alpha\,\delta f_{k+\frac{1}{2}} + \tfrac{1}{2}\alpha(\alpha-1)\,\delta^2 f_k + \tfrac{1}{6}\alpha(\alpha-1)(\alpha+1)\,\delta^3 f_{k+\frac{1}{2}} + \cdots$$

$$f(x_k + \alpha h) = f_k + \alpha\,\delta f_{k-\frac{1}{2}} + \tfrac{1}{2}\alpha(\alpha+1)\,\delta^2 f_k + \tfrac{1}{6}\alpha(\alpha-1)(\alpha+1)\,\delta^3 f_{k-\frac{1}{2}} + \cdots$$

Estas son las fórmulas de Gauss. Promediando las dos expresiones se obtiene la fórmula de Stirling:

$$f(x_k + \alpha h) = f_k + \frac{\alpha}{2}\left(\delta f_{k+\frac{1}{2}} + \delta f_{k-\frac{1}{2}}\right) + \frac{\alpha^2}{2}\delta^2 f_k + \frac{\alpha(\alpha^2-1)}{12}\left(\delta^3 f_{k+\frac{1}{2}} + \delta^3 f_{k-\frac{1}{2}}\right) + \cdots$$

5.2.2. Fórmula de Interpolación de Lagrange

Esta fórmula es más adecuada para análisis teóricos que para el cómputo práctico. El polinomio de interpolación se obtiene como:

$$p(x) = \sum_{i=0}^{m} g_i(x) \cdot f_i$$

Los polinomios $g_i(x)$ se obtienen multiplicando n binomios: $g_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{m} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}$.

Nótese que $g_i(x_j) = \delta_{ij}$.

El siguiente ejemplo es ilustrativo:

k	x_k	f_k
0	0.	-5.
1	1.	1.
2	3.	25.

$$g_0(x) = \frac{(x-1)(x-3)}{(0-1)(0-3)} = \tfrac{1}{3}(x^2 - 4x + 3)$$

$$g_1(x) = \frac{(x-0)(x-3)}{(1-0)(1-3)} = \tfrac{1}{2}(-x^2 + 3x)$$

$$g_2(x) = \frac{(x-0)(x-1)}{(3-0)(3-1)} = \tfrac{1}{6}(x^2 - x)$$

$$p(x) = \sum_{i=0}^{2} g_i(x) \cdot f_i = 2x^2 + 4x - 5$$

5.2.3. Interpolación de Hermite.

En algunos casos es conveniente trabajar con los valores de la función, $f(x)$ y un cierto número de sus derivadas $f'(x), f''(x), f'''(x), \ldots f^{(m)}(x)$. Dados los valores $f_k, f'_k, f''_k, \ldots f_k^{(m)}$ en n puntos de abscisas x_k, es posible determinar un polinomio $p(x)$ de grado $(m+1)n - 1$ que satisfaga:

$$p^{(i)}(x_j) = f^{(i)}(x_j) \qquad \begin{array}{l} i = 0,1,\ldots m \\ j = 0,1,\ldots n-1 \end{array}$$

La interpolación de una función cuando una o más de sus derivadas son conocidas en cada punto se llama interpolación de Hermite. $p(x)$ puede obtenerse utilizando la fórmula de Newton con diferencias divididas y considerando que:

$$[x_0, x_0] = \lim_{x_1 \to x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{(x_1 - x_0)} = f'(x_0)$$

$$[x_0, x_0, x_1] = \frac{f'(x_0) - [x_0, x_1]}{(x_0 - x_1)}$$

También podrían usarse las expresiones de Lagrange, considerando primero puntos a una distancia pequeña, ε, y luego identificando a las derivadas con los límites de diversas expresiones para $\varepsilon \to 0$.

El siguiente ejemplo es ilustrativo. Se trata de determinar un polinomio $p(x)$ de grado 3, tal que:

$$p(0) = v_A$$
$$p(L) = v_B$$
$$p'(0) = \theta_A$$
$$p'(L) = \theta_B$$

k	x_k	f_k	$[x_k, x_{k+1}]$	$[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}]$	$[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}, x_{k+3}]$
0	0	v_A	θ_A	$\dfrac{v_B - v_A}{L^2} - \dfrac{\theta_A}{L}$	$\dfrac{2(v_B - v_A)}{L^3} + \dfrac{\theta_A + \theta_B}{L^2}$
1	0	v_A	$\dfrac{v_B - v_A}{L}$	$\dfrac{\theta_B}{L} - \dfrac{v_B - v_A}{L^2}$	
2	L	v_B	θ_B		
3	L	v_B			

Se han tomado datos de esta tabla siguiendo una trayectoria horizontal.

$$p(x) = v_A + \theta_A(x-0) + \left(\frac{v_B - v_A}{L^2} - \frac{\theta_A}{L}\right)(x-0)^2 + \left(\frac{2(v_A - v_B)}{L^3} + \frac{\theta_A + \theta_B}{L^2}\right)(x-0)^2(x-L)$$

$$p(x) = \left(1 - 3\xi^2 + 2\xi^3\right)v_A + \left(3\xi^2 - 2\xi^3\right)v_B + \xi(1-\xi)^2\theta_A L - \xi^2(1-\xi)\theta_B L \quad \text{donde} \quad \xi = \frac{x}{L}\,.$$

5.2.4. Interpolación Inversa.

En la solución de $f(x) = 0$ pueden obtenerse aproximaciones a una raíz, x, por interpolación de una función inversa con ordenadas x_k para abscisas de espaciamiento no uniforme, $f(x_k)$. Considérese, por ejemplo:

x_k	$f(x_k)$
1.	1.76
2.	0.41
3.	-0.16
4.	-0.32

Usando la fórmula de Lagrange con 4 puntos:

$$x \approx \frac{(0-0.41)\,(0+0.16)\,(0+0.32)\,(1)}{(1.76-0.41)\,(1.76+0.16)\,(1.76+0.32)} + \frac{(0-1.76)\,(0+0.16)\,(0+0.32)\,(2)}{(0.41-1.76)\,(0.41+0.16)\,(0.41+0.32)} +$$
$$+ \frac{(0-1.76)\,(0-0.41)\,(0+0.32)\,(3)}{(-0.16-1.76)\,(-0.16-0.41)\,(-0.16+0.32)} + \frac{(0-1.76)\,(0-0.41)\,(0+0.16)\,(4)}{(-0.32-1.76)\,(-0.32-0.41)\,(-0.32+0.16)}$$

$$x \approx 2.37$$

5.2.5. Generalización a Varias Dimensiones.

Las expresiones anteriores pueden fácilmente generalizarse para "mallas" de más dimensiones. Así, si se tienen puntos con coordenadas x_i, y_j, z_k ($i = 0 \cdots n;\ j = 0 \cdots m; k = 0 \cdots l$) las fórmulas de Lagrange resultan:

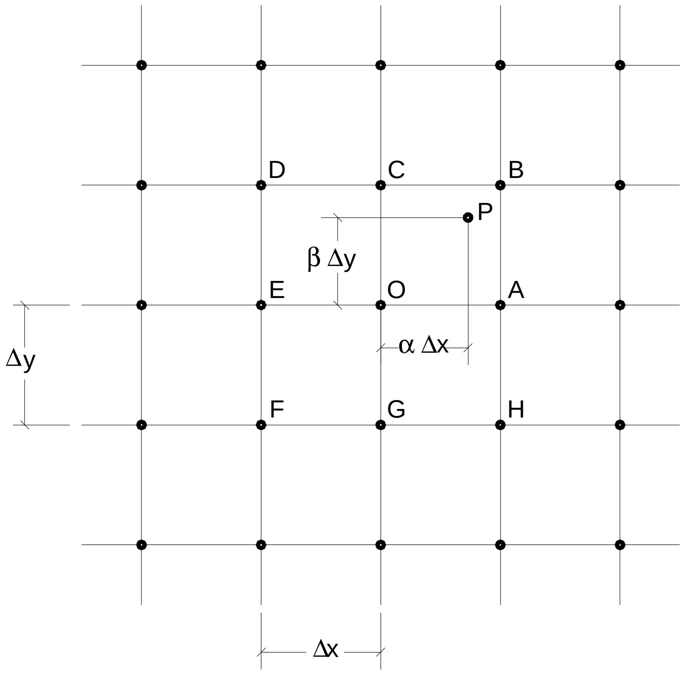
$$p(x,y,z) = \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{m}\sum_{k=0}^{l} g_{x_i}(x)\cdot g_{y_j}(y)\cdot g_{z_k}(z)\cdot f_{ijk}$$

donde $g_{xi}(x) = \prod_{\substack{r=0 \\ r\neq i}}^{n} \dfrac{(x - x_r)}{(x_i - x_r)}$ y expresiones similares en las direcciones y, z.

Frecuentemente los puntos están uniformemente espaciados:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x$$
$$y_{i+1} = y_i + \Delta y$$
$$z_{i+1} = z_i + \Delta z$$

La figura muestra una zona de una malla bidimensional con espaciamiento uniforme. Las coordenadas de un punto en la proximidad de A pueden definirse por dos parámetros α, β (coordenadas relativas medidas en unidades $\Delta x, \Delta y$).



Usando la fórmula de Stirling, e incluyendo diferencias centrales hasta de 2° orden inclusive, se obtiene:

$$f\left(x_0 + \alpha\Delta x, y_0 + \beta\Delta y\right) = \sum_{i=-1}^{+1} \sum_{j=-1}^{+1} a_i b_j f_{ij}$$

donde:

$$a_1 = \tfrac{1}{2}\alpha(\alpha - 1) \qquad b_1 = \tfrac{1}{2}\beta(\beta - 1)$$

$$a_2 = 1 - \alpha^2 \qquad b_2 = 1 - \beta^2$$

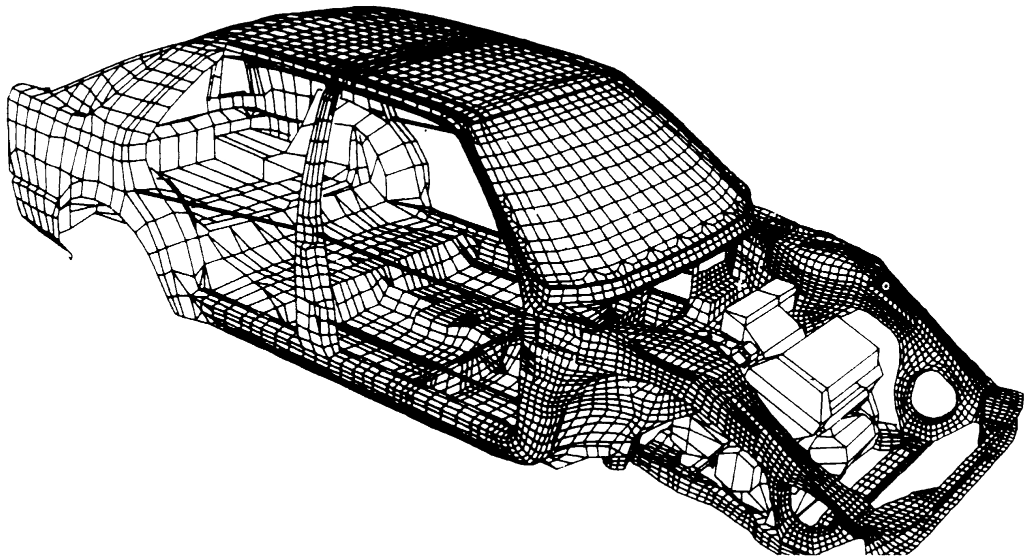
$$a_3 = \tfrac{1}{2}\alpha(\alpha + 1) \qquad b_3 = \tfrac{1}{2}\beta(\beta + 1)$$

y es igualmente fácil desarrollar expresiones análogas considerando un número mayor o menor de puntos en cada dirección. La presencia de bordes curvos introduce algunas dificultades (no es posible seguir teniendo un espaciamiento uniforme).

Sin embargo, en muchos casos es necesario trabajar con *mallas* no regulares, como la mostrada en la figura siguiente. Las diferencias finitas no son entonces la herramienta más adecuada. El concepto de *elementos finitos* es útil y permite un tratamiento más simple. La región en estudio se divide en subregiones o *elementos*, conectados en un número finito de *nudos* con los elementos adyacentes.

El valor de una función, f, en un punto en el interior de un elemento se obtiene interpolando los valores de la función en los nudos del elemento:

$$f(x, y, z) = \sum_{i=1}^{N} N_i(x, y, z) \cdot f_i$$



Las funciones de interpolación deben satisfacer:

$$N_i(x_j, y_j, z_j) = \delta_{ij} \qquad (x_j, y_j, z_j \text{ son las coordenadas del nudo } j)$$

$$\sum_{i=0}^{N} N_i(x, y, z) = 1$$

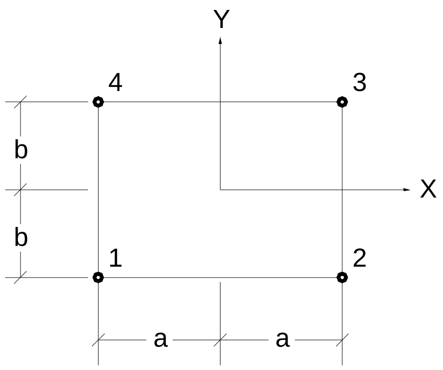
Esto último es evidente si se supone $f_i = c$ para todo j y entonces $f(x, y, z) = c$.

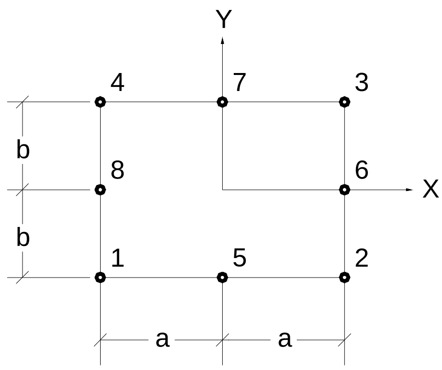
Adicionalmente, las N_i deben ser tales que se mantenga la continuidad de f (y en algunos casos la continuidad de una o más derivadas) en los bordes entre elementos.

Es relativamente fácil construir estas funciones para elementos bidimensionales rectangulares.

Por ejemplo, para un elemento con 4 nudos (con referencia al centroide):

$$N_i(x, y) = \frac{1}{4}\left(1 + \frac{x_i}{a}\frac{x}{a}\right)\left(1 + \frac{y_i}{b}\frac{y}{b}\right) \qquad i = 1,2,3,4$$





Y para un elemento con 8 nudos (con referencia al centroide):

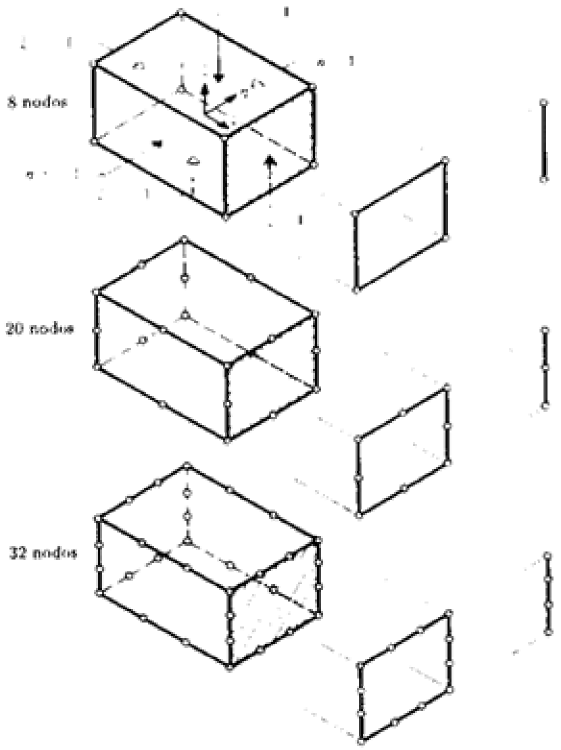
$$N_i = \frac{1}{4}\left(1 + \frac{x_i}{a}\frac{x}{a}\right)\left(1 + \frac{y_i}{b}\frac{y}{b}\right)\left(\frac{x_i}{a}\frac{x}{a} + \frac{y_i}{b}\frac{y}{b} - 1\right) \qquad i = 1,2,3,4$$

$$N_i = \frac{1}{2}\left(1-\left(\frac{x}{a}\right)^2\right)\left(1+\frac{y_i}{b}\frac{y}{b}\right) \qquad i=5,7$$

$$N_i = \frac{1}{2}\left(1+\frac{x_i}{a}\frac{x}{a}\right)\left(1-\left(\frac{y}{b}\right)^2\right) \qquad i=6,8$$

Estos son los dos elementos más simples de la familia de Serendip.

Las funciones de interpolación para los correspondientes elementos tridimensionales son similares.



En subregiones triangulares las funciones de interpolación resultan más simples si se escriben en coordenadas de área, L_1, L_2, L_3.. Un punto en el interior de un triángulo permite definir tres triángulos parciales, cuyas áreas divididas entre el área total del triángulo son justamente las L_i:

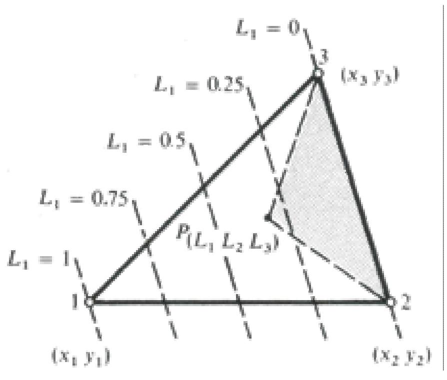
$$L_i = \frac{A_i}{A}$$

En consecuencia:

$$L_1 + L_2 + L_3 = 1\,.$$

Las coordenadas x, y se relacionan con las coordenadas de área mediante:

$$\sum_{i=1}^{3} L_i x_i = x \qquad \sum_{i=1}^{3} L_j y_j = y$$



Por otro lado si el origen de coordenadas x, y está en el centroide del triángulo:

$$L_i = \frac{1}{3} + \frac{b_i}{2A} x + \frac{c_i}{2A} y$$

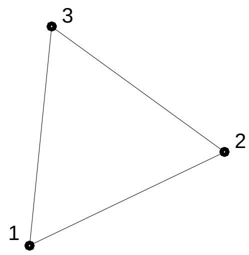
donde:

$$b_i = y_j - y_k$$

$$c_i = x_k - x_j \qquad i, j, k \text{ son permutaciones cíclicas de } 1,2,3.$$

Para un elemento con 3 nudos, el valor de una función, $f(x, y)$, puede obtenerse por interpolación lineal de los tres valores nodales f_1, f_2, f_3:

$$f(x, y) = \sum_{i=1}^{3} L_i f_i$$



es decir, $N_i(x, y) = L_i(x, y)$.

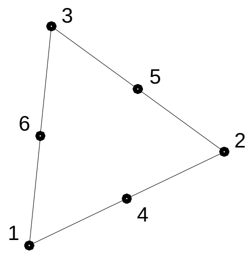
En forma similar, para un elemento con 6 nudos (nudos adicionales al centro de cada lado), $f(x, y)$ puede obtenerse por interpolación cuadrática de los valores nodales.

$$N_i = L_i(2L_i - 1) \qquad i = 1,2,3$$

$$N_4 = 4 L_1 L_2$$

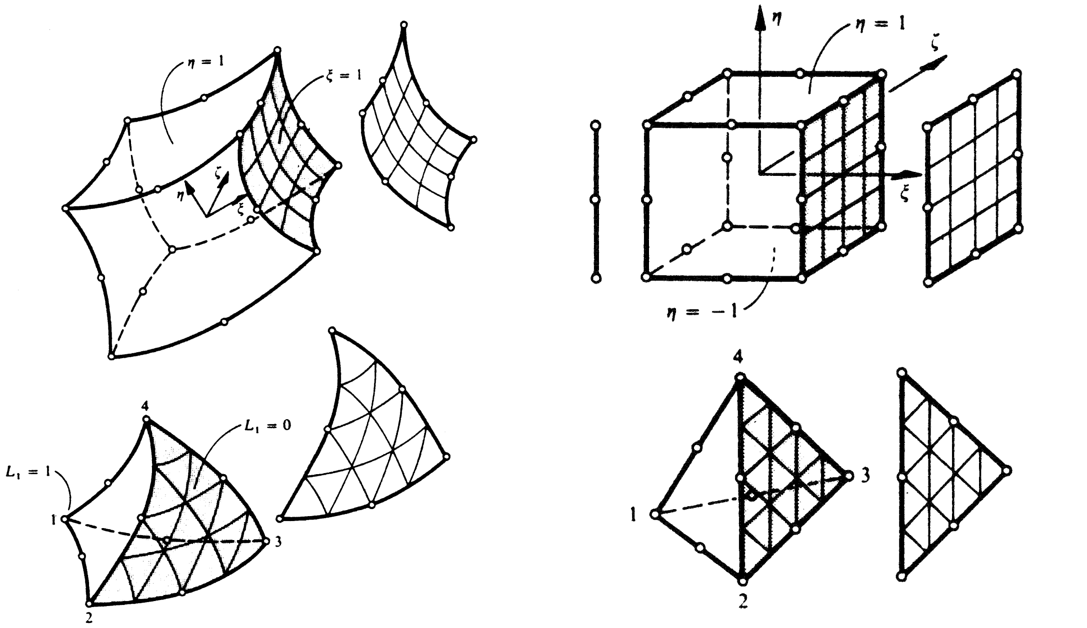
$$N_5 = 4 L_2 L_3$$

$$N_6 = 4 L_3 L_1$$



(Los elementos triangulares de mayor orden son en general poco útiles). Pueden escribirse fácilmente expresiones análogas para los correspondientes elementos tridimensionales.

Para elementos más complejos, la construcción de funciones de interpolación puede simplificarse si se efectúa previamente un "mapeo" adecuado.



Por ejemplo, para el hexaedro de Serendip con 20 nudos:

$$f(\xi,\eta,\varsigma)=\sum_{i=1}^{20} N_i(\xi,\eta,\varsigma)\cdot f_i$$

$$N_i=\tfrac{1}{8}(1+\xi_i\xi)(1+\eta_i\eta)(1+\varsigma_i\varsigma)(\xi_i\xi+\eta_i\eta+\varsigma_i\varsigma-2) \qquad i=1,\cdots 8$$

$$N_i=g(\xi,\xi_i)\,g(\eta,\eta_i)\,g(\varsigma,\varsigma_i) \qquad i=9,\cdots 20$$

donde: $g(\xi,\xi_i)=\tfrac{1}{2}(1+\xi\,\xi_i)$ si $\xi_i=\pm 1$

$g(\xi,\xi_i)=(1-\xi^2)$ si $\xi_i=0$.

Las coordenadas x,y,z pueden asociarse con las ξ,η,ς usando las mismas funciones de interpolación:

$$x=\sum_{i=1}^{20} N_i(\xi,\eta,\varsigma)\,x_i$$

$$y=\sum_{i=1}^{20} N_i(\xi,\eta,\varsigma)\,y_i$$

$$z=\sum_{i=1}^{20} N_i(\xi,\eta,\varsigma)\,z_i$$

en tal caso se dice que el elemento es *isoparamétrico*. También puede hablarse de elementos *sub-paramétricos* o *hiper-paramétricos*, según las funciones utilizadas en el mapeo sean de grado menor o mayor que aquellas con que se interpola la función, f.

Nótese que también es posible hacer mapeos con las coordenadas de área.

5.3. Derivación

Dados $f_1 \approx f(x_1),\ f_2 \approx f(x_2) \ldots f_n \approx f(x_n)$ puede obtenerse una aproximación, $g(x)$, a la función $f(x)$, tal que $g(x_i)=f(x_i)$ para $i=1,2,\ldots n$. Este es el problema de interpolación considerado en la sección 5.2. Entonces, las derivadas de $f(x)$ podrían aproximarse, localmente, por aquellas de $g(x)$. Sin embargo, debe tenerse presente que pequeños errores en los valores de la función pueden amplificarse enormemente al calcular las derivadas. A mayor orden de la derivada, mayores son las probabilidades de errores de cancelación.

En lo que sigue se considera el caso de abscisas $x_1, x_{2,} \ldots x_n$ con espaciamiento uniforme, h. Para h suficientemente pequeño:

$$f(x_i \pm h)=f(x_i)\pm h\,f'(x_i)+\tfrac{1}{2}h^2 f''(x_i)\pm\tfrac{1}{6}h^3 f'''(x_i)+\ldots$$

$$hf'(x_i)=f(x_i+h)-f(x_i)-\tfrac{1}{2}h^2 f''(x_i)-\ldots$$

de donde, con la notación $f_i^{(m)}=f^{(m)}(x_i)$:

$$f_i'=\frac{f_{i+1}-f_i}{h}+O(h)=\frac{\Delta f_i}{h}+O(h)$$

y en forma similar se tienen:

$$f_i'=\frac{f_i-f_{i-1}}{h}+O(h)$$

$$f_i' = \frac{f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}}{h} + O(h^2)$$

Incluyendo puntos más alejados pueden obtenerse expresiones del tipo:

$$f_i' = \frac{-\frac{1}{3} f_{i-1} - \frac{1}{2} f_i + f_{i+1} - \frac{1}{6} f_{i+2}}{h} + O(h^3)$$

Pero las expresiones más simples son las más frecuentemente utilizadas.

Considérese por ejemplo los valores ($\cos x$):

x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$\frac{\Delta f_k}{h}$	$\frac{f_{k+1} - f_{k-1}}{2h}$
0.	1.000 000	0.	0.049 958	
0.1	0.995 004	0.099 833	0.149 376	0.099 667
0.2	0.980 067	0.198 669	0.247 301	0.198 338
0.3	0.955 336	0.295 520	0.342 755	0.295 028
0.4	0.921 061	0.389 418	0.434 784	0.388 770
0.5	0.877 582	0.479 426		

Igualmente, $f''(x)$ puede ser aproximada por diferencias finitas de segundo orden:

$$f''(x_i) = f_i'' = \frac{f_{i+1} - 2 f_i + f_{i-1}}{h^2} + O\left(h^2\right) = \delta^2 f_i + O\left(h^2\right)$$

Por ejemplo, para la función de la tabla precedente:

$$f''(0.2) \approx \frac{0.995004 - 2\,(0.980067) + 0.955336}{(0.1)^2} \approx -0.97925$$

El valor exacto es $\operatorname{sen}(0.2) = -0.980067$

y las derivadas de orden superior pueden ser aproximadas por las correspondientes diferencias finitas.

Por ejemplo: $f_i^{(m)} \approx \frac{\Delta^m f_i}{h^m}$

$$f_i^{(m)} \approx \frac{\delta^m f_i}{h^m}$$

Cuando se tienen 2 o más variables independientes, $x, y, t \cdots$ y mallas ortogonales de puntos uniformemente espaciados, las derivadas parciales pueden aproximarse por diferencias finitas trabajando separadamente con cada variable. Así por ejemplo, para $\Delta x = \Delta y = h$, el Laplaciano:

$$\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

en un punto de coordenadas x_i, y_j puede aproximarse por:

$$\nabla_5^2 u_{ij} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2_{u,j} + u_{i,j+1}}{h^2}$$

con un error de $O\left(h^2\right)$ Nótese que en $\nabla^2 u$ y $\nabla_5^2 u_{ij}$ el símbolo ∇ no es el operador para diferencias hacia atrás.

Al utilizar elementos finitos, las derivadas se obtienen operando exactamente con las funciones de interpolación. Así, si: $f = \sum_{i=1}^{n} N_i(x,y,z)\, f_i$ se tiene: $\frac{\partial f}{\partial x} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial N_i}{\partial x} f_i$.

Algunos comentarios adicionales relativos al uso de elementos isoparamétricos son aquí necesarios. Para elementos isoparamétricos las funciones de interpolación N_i están expresadas como función de $\xi, \eta, \varsigma \cdots$:

$$f = \sum_{i=1}^{n} N_i(\xi, \eta, \varsigma)\, f_i$$

y las coordenadas $\xi, \eta, \varsigma \cdots$ están relacionadas con las $x, y, z \cdots$ mediante las mismas funciones de interpolación, v.g.:

$$x = \sum_{i=1}^{n} N_i(\xi, \eta, \varsigma)\, x_i$$

Excepto para casos particulares de geometría muy simple, es prácticamente imposible obtener expresiones explícitas para las $\xi, \eta, \varsigma \cdots$ en función de las $x, y, z \cdots$ y lo mismo puede decirse de las funciones de interpolación, $N_i(\xi, \eta, \varsigma)$. Como consecuencia, en general es fácil obtener derivadas con relación a las $\xi, \eta, \varsigma \cdots$, pero comparativamente difícil obtener expresiones explícitas para las $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}, \cdots$. Su evaluación numérica es, sin embargo, muy simple. Teniendo en cuenta que:

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial f}{\partial \xi} \\ \frac{\partial f}{\partial \eta} \\ \frac{\partial f}{\partial \varsigma} \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \varsigma} & \frac{\partial y}{\partial \varsigma} & \frac{\partial z}{\partial \varsigma} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial f}{\partial z} \end{Bmatrix}$$

O en notación más compacta: $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{J} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}}$. Los elementos de la matriz $\mathbf{J}$ y de $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}}$ se obtienen con expresiones e la forma:

$$\frac{\partial x}{\partial \xi} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} x_i$$

$$\vdots$$

$$\frac{\partial z}{\partial \eta} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial N_i}{\partial \eta} z_i$$

Por otro lado, al obtenerse la matriz $\mathbf{J}$ puede hacerse el cambio de variables:

$$dx\; dy\; dz = \det(\mathbf{J}) \cdot d\xi\; d\eta\; d\varsigma$$

lo que facilita enormemente las integrales, ya que los límites de integración son en cada caso -1 y $+1$.

5.4. Ecuaciones de Diferencias

Una fórmula de recursión del tipo: $y_{n+k} = f(y_n, y_{n+1}, y_{n+2}, \ldots, y_{n+k-1}, n)$ se denomina ecuación de diferencias de orden k. La solución de ecuaciones de diferencias tiene cierta analogía con la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias.

La ecuación

$$y_{n+k} + a_1 y_{n+k-1} + \ldots + a_j y_{n+k-j} + \ldots + a_k y_n = 0$$

es una ecuación de diferencias lineal, homogénea, de orden k, con coeficientes constantes. Esta ecuación queda satisfecha por $y_j = c r^j$. Los posibles valores de r corresponden a las raíces de la ecuación característica:

$$p(r) = r^k + a_1 r^{k-1} + a_2 r^{k-2} + \ldots + a_{k-1} r + a_k = 0 .$$

Si la ecuación característica tiene k raíces distintas $r_1, r_2, \ldots r_k$ la solución general de la ecuación de diferencias (lineal, homogénea, con coeficientes constantes) puede escribirse:

$$y_j = c_1 r_1{}^j + c_2 r_2{}^j + c_3 r_3{}^j + \ldots c_k r_k{}^j$$

Lo cual puede probarse por simple sustitución. Si en cambio se tiene una raíz de multiplicidad m, deben considerarse términos $q(j)\, r^j$, donde $q(j)$ es un polinomio de orden $m-1$. En cualquier caso la solución tiene k constantes independientes.

Considérese por ejemplo: $y_{n+2} - 5y_{n+1} + 6y_n = 0$, con condiciones iniciales $y_0 = 0$, $y_1 = 1$. Por recursión con $y_{n+2} = 5y_{n+1} - 6y_n$ se obtienen:

$$y_2 = (5)(1) - (6)(0) = 5$$

$$y_3 = (5)(5) - (6)(1) = 19$$

$$y_4 = (5)(19) - (6)(5) = 65$$

$$y_5 = (5)(65) - (6)(19) = 211$$

Por otro lado, la ecuación característica es en este caso $r^2 - 5r + 6 = 0$, cuyas raíces son $r_1 = 2$, $r_2 = 3$. La solución general es: $y_n = c_1 \cdot 2^n + c_2 \cdot 3^n$ y dadas las condiciones iniciales:

$$n = 0 \qquad c_1 + c_2 = 0$$

$$n = 1 \qquad 2c_1 + 3c_2 = 1$$

se obtienen: $c_1 = -1$ y $c_2 = 1$, es decir $y_n = 3^n - 2^n$.

Por ejemplo, $y_4 = (3)^4 - (2)^4 = 81 - 16 = 65$.

En cambio, $y_{n+3} - 3y_{n+2} + 4y_n = 0$ tiene la ecuación característica $r^3 - 3r^2 + 4 = 0$ cuyas raíces son $r_1 = -1$, $r_2 = r_3 = 2$, y su solución general es entonces: $y_n = c_1(-1)^n + (c_2 + c_3 n)(2)^n$.

La fórmula de recursión para los polinomios de Tchebicheff:

$$T_{n+1}(x) - 2xT_n(x) + T_{n-1}(x) = 0$$

es también una ecuación de diferencias lineal, homogénea, de orden 2, con coeficientes constantes (porque 1, -2*x*, 1 no son función de *n*). Su ecuación característica es: $r^2 - 2x\,r + 1 = 0$, con raíces $r = x \pm i\sqrt{1 - x^2}$. Haciendo el cambio de variable $x = \cos\theta$ se tiene: $r = \cos\theta \pm i \operatorname{sen}\theta = e^{\pm i\theta}$. La solución general de la ecuación de diferencias es $T_n = c_1\left(e^{+i\theta}\right)^n + c_2\left(e^{-i\theta}\right)^n = c_1 e^{in\theta} + c_2 e^{-in\theta}$. Con las condiciones iniciales $T_0(x) = 1$, $T_1(x) = x = \cos\theta$ se obtienen $c_1 = c_2 = \frac{1}{2}$ y finalmente $T_n(x) = \frac{1}{2} e^{in\theta} + \frac{1}{2} e^{-in\theta} = \cos n\theta$, donde $\theta = \arccos x$.

La solución de una ecuación de diferencias lineal no homogénea puede obtenerse sumando a la solución de la correspondiente ecuación homogénea una solución particular. Los ejemplos siguientes son ilustrativos:

Considérese: $y_{n+1} - 2y_n = a^n$, con la condición inicial $y_0 = 1$. La correspondiente ecuación homogénea, $y_{n+1} - 2y_n = 0$, tiene la ecuación característica $r - 2 = 0$ y su solución es entonces $y_n = c(2)^n$. Para la solución particular puede tantearse una solución de la forma $y_n = \alpha a^n$, de donde $\alpha a^{n+1} - 2\alpha a^n = a^n$ y por lo tanto $\alpha = (a-2)^{-1}$ (esto es, suponiendo que $a \neq 2$). La solución general es: $y_n = a^n / (a-2) + c(2)^n$. Con la condición inicial se halla $c = 1 - (a-2)^{-1}$ y finalmente $y_n = 2^n + (a^n - 2^n)/(a-2)$ (para $a \neq 2$). Para $a = 2$ la regla de L' Hospital da: $y_n = 2^n + n2^{n-1}$.

Para la ecuación de diferencias $y_{n+2} - 5y_{n+1} + 6y_n = 2n + 3(-1)^n$ puede considerarse la solución particular: $y \;= an + b + c(-1)^n$. Sustituyendo esta expresión en la ecuación e identificando coeficientes se obtienen: $a = 1$, $b = 3/2$, $c = 1/4$. Por otro lado, la ecuación característica es: $r^2 - 5r + 6 = 0$ con raíces $r_1 = 2$, $r_2 = 3$. La solución general resulta entonces $y_n = n + 3/2 + 1/4(-1)^n + c_1(2)^n + c_2(3)^n$.

5.5. *Integración Numérica (Cuadratura)*

La evaluación de una integral definida:

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

en forma explícita es a veces muy difícil o prácticamente imposible. En tales casos puede hacerse una aproximación numérica tal como las que se mencionan en esta sección.

5.5.1 Regla de los Trapecios, Regla de Simpson y otras fórmulas interpolatorias.

Una posible forma de resolver el problema es aproximando, localmente, la función, $f(x)$, por otra, $g(x)$, más simple de integrar.

En la *Regla de los Trapecios* se aproxima $f(x)$ con segmentos de recta y entonces:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx \approx \tfrac{1}{2}(x_1 - x_0)\left[f(x_0) + f(x_1)\right]$$

Esta expresión puede generalizarse para un intervalo $[x_0, x_n]$. Considerando abscisas con espaciamiento uniforme $x_i = x_{i-1} + h$, para los que se tiene valores de la función $f_i = f(x_i)$ puede hacerse interpolaciones lineales en cada subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$ para obtener:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx \approx T(h) = \frac{h}{2}\left(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \ldots + 2f_{n-1} + f_n\right)$$

El error de truncación puede estimarse más fácilmente considerando primero el sub-intervalo $[-h/2, +h/2]$ para el cual (siendo h pequeño):

$$f(x) = f(0) + xf'(0) + \tfrac{1}{2}x^2 f''(0) + \tfrac{1}{6}x^3 f'''(0) + \tfrac{1}{24}x^4 f^{IV}(0) + \ldots$$

e integrando:

$$\int_{-h/2}^{+h/2} f(x)\,dx = h \cdot f(0) + \frac{h^3}{24} f''(0) + \frac{h^5}{1920} f^{IV}(0) + \cdots$$

Por otro lado:

$$f(\pm h/2) = f_0 \pm \frac{h}{2} f'(0) + \frac{h^2}{8} f''(0) \pm \frac{h^3}{48} f'''(0) + \frac{h^4}{384} f^{IV}(0) \pm \cdots$$

$$\therefore \int_{-h/2}^{+h/2} f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left[f\left(\frac{h}{2}\right) + f\left(-\frac{h}{2}\right)\right] - \frac{h^3}{12} f''(0) - \frac{h^5}{480} f^{IV}(0)\ldots$$

Si h es pequeño el error local de truncación es de $O(h^3)$. Sin embargo, para integrar entre límites a y b se requieren $(b-a)/h$ subintervalos (este número es inversamente proporcional a h) y el error global es entonces de $O(h^2)$.

En la *Regla de Simpson* la aproximación local se hace interpolando con parábolas de 2° grado. Considerando puntos con abscisas uniformemente espaciadas:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + f_2\right) - \frac{h^5}{90} f^{IV}(x_1) + \ldots$$

y en general, considerando un número par de subintervalos:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \ldots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n\right) + O(h^4)$$

Esta fórmula es exacta cuando $f(x)$ es un polinomio de hasta tercer grado.

Considérese por ejemplo: $\int_1^5 \frac{dx}{x} = \text{Ln}\,5 = 1.609\,437\,912$ Para la función $f(x) = \frac{1}{x}$ se obtienen los valores siguientes:

x	$f(x)$	x	$f(x)$
1.00	1.	3.25	0.3076 9231
1.25	0.8	3.50	0.2857 1429
1.50	0.6666 6667	3.75	0.2666 6667
1.75	0.5714 2857	4.00	0.25
2.00	0.5	4.25	0.2352 9412
2.25	0.4444 4444	4.50	0.2222 2222
2.50	0.4	4.75	0.2105 2632
2.75	0.3636 3636	5.00	0.2
3.00	0.3333 3333		

y utilizando la regla trapezoidal se obtienen aproximaciones a $\int_1^5 \frac{dx}{x}$.

Por ejemplo con $h = 1$:

$$\int_1^5 \frac{dx}{x} \approx \tfrac{1}{2}(1)\left[1. + 2(0.5 + 0.333\ldots + 0.25) + 0.2\right] = 1.\underline{6}833\ldots$$

y en forma similar

h	$T(h)$
1.0	1.683 333
0.5	1.628 968
0.25	1.614 406
....	

Con la regla de Simpson se obtienen:

h	$S(h)$
0.5	1.610846
0.25	1.609552
0.125	1.609446

Las fórmulas de los trapecios y de Simpson corresponden al grupo de fórmulas de Newton - Cotes de intervalo cerrado. Algunas otras fórmulas de este grupo son la regla de Simpson de los $3/8$:

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)\,dx = \frac{3h}{8}\left(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3\right) + O\left(h^7\right)$$

y la regla de Bode:

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)\,dx = \frac{2h}{45}\left(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4\right) + O\left(h^9\right)$$

También pueden obtenerse fórmulas que utilizan puntos uniformemente espaciados pero no incluyen los valores de la función en uno o en los dos límites de la integral. Estas son las fórmulas de Newton - Cotes de intervalo abierto. Por ejemplo:

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)\,dx = \frac{3h}{2}\left(f_1 + f_2\right) + O\left(h^3\right)$$

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)\,dx = \frac{4h}{3}\left(2f_1 - f_2 + 2f_3\right) + O\left(h^5\right)$$

5.5.2. Extrapolación de Richardson y el Método de Romberg

Si $T(h)$ es la aproximación de $\int_a^b f(x)\,dx$ obtenida de la aplicación de la regla de los trapecios con intervalo h, puede escribirse:

$$T(h) = \int_a^b f(x)\,dx + a_1 h^2 + a_2 h^4 + a_3 h^6 + \ldots$$

$$T(2h) = \int_a^b f(x)\,dx + a_1 (2h)^2 + a_2 (2h)^4 + a_3 (2h)^6 + \ldots$$

y entonces:

$$\frac{4T(h) - T(2h)}{3} = \int_a^b f(x)\,dx + a_2 h^4 + a_3 h^6 + \ldots$$

es decir $\frac{1}{3}\left(4\,T(h) - T(2h)\right)$ es una aproximación a $\int_a^b f(x)\,dx$ con un error de truncación de $O\left(h^4\right)$, menor que el de $T(h)$ o $T(2h)$. En forma similar, para la regla de Simpson:

$$S(h) = \int_a^b f(x)\,dx + a_2 h^4 + a_3 h^6 + a_4 h^8 + \ldots$$

$$S(2h) = \int_a^b f(x)\,dx + a_2 (2h)^4 + a_3 (2h)^6 + a_4 (2h)^8 + \ldots$$

y entonces:

$$\frac{(2)^4 S(h) - S(2h)}{(2)^4 - 1} = \int_a^b f(x)\,dx + a_3 h^6 + a_4 h^8 + \ldots$$

es una aproximación mejor a la integral, con un error global de $O(h^6)$. Estos son dos ejemplos de la *extrapolación* de Richardson.

Para la integral $\int_1^5 \frac{dx}{x}$ considerada anteriormente:

$$T(1,0) = 1.683\,333$$

$$T(0,5) = 1.628\,968 \qquad \tfrac{1}{3}\left(4T(0.5) - T(1.0)\right) = 1.610\,846 = S(0.5)$$

$$T(0,25) = 1.614\,406 \qquad \tfrac{1}{3}\left(4T(.25) - T(0.5)\right) = 1.609\,552 = S(0.25)$$

Obsérvese que estos resultados coinciden con los obtenidos de la regla de Simpson.

El método de Romberg considera inicialmente los resultados $T_{1.j}$, de aplicar la regla de los trapecios con distintos grados de subdivisión, $h_j = (b-a)/2^j$. Estas aproximaciones tienen errores de truncación de $O(h_j^2)$. No es necesario rehacer todos los cálculos para cada nueva subdivisión, pudiéndose emplear la expresión:

$$T_{1,j} = \tfrac{1}{2} T_{1,j-1} + h_j \sum_{\substack{i=1 \\ \Delta i=2}}^{2^j-1} f(a + h_j i)$$

Usando la extrapolación de Richardson se obtienen nuevas aproximaciones con errores de $O\left(h_j^{2i+2}\right)$:

$$T_{i+1,j} = \frac{(2)^{2i} T_{i,j+1} - T_{i,j}}{(2)^{2i} - 1}$$

Considérese nuevamente la integral: $\int_1^5 \frac{dx}{x}$. Con la regla de los trapecios se obtienen:

j	$h_j = \frac{4}{2^j}$	$\sum_{\substack{i=1 \\ \Delta i=2}}^{2^j-1} f(a + i\,h_j)$	$T_{1,j}$
0	4.		2.4
1	2.	0.333 333	1.866 667
2	1.	0.75	1.683 333
3	0.5	1.574 603	1.628 968
4	0.25	3.199 689	1.614 406
5	0.125	6.427 862	1.610 686

Y de las sucesivas extrapolaciones:

j	$T_{2,j}$	$T_{3,j}$	$T_{4,j}$	$T_{5,j}$	$T_{6,j}$
0					
1	$\underline{1.6}88\ 889$				
2	$\underline{1.6}22\ 222$	$\underline{1.6}17\ 777$			
3	$\underline{1.6}10\ 847$	$\underline{1.6}10\ 088$	$\underline{1.609}\ 966$		
4	$\underline{1.609}\ 552$	$\underline{1.609\ 4}66$	$\underline{1.609\ 4}56$	$\underline{1.609\ 4}54$	
5	$\underline{1.609\ 4}46$	$\underline{1.609\ 43}9$	$\underline{1.609\ 43}8$	$\underline{1.609\ 43}8$	$\underline{1.609\ 43}8$

Las cifras subrayadas coinciden con las de la solución exacta.

5.5.3. Integración con puntos no equidistantes

Las fórmulas de integración con puntos equidistantes consideradas en la sección 5.5.1:

$$\int_a^b f(x)dx \approx c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) + c_3 f(x_3) + \cdots + c_m f(x_m)$$

con m puntos de integración y m parámetros $c_1, c_2 \cdots c_m$ permiten integrar exactamente polinomios de grado $m-1$ (y excepcionalmente de grado m, como en la regla de Simpson). Si en cambio se toman puntos no equidistantes, para m puntos de integración se tienen $2m$ parámetros: $w_1, w_2 \cdots w_m$ y $x_1, x_2 \cdots x_m$ lo que permite integrar exactamente polinomios hasta de grado $2m-1$. Esta forma de integración numérica se denomina de Gauss.

Con propósitos ilustrativos, considérese la fórmula de integración de Gauss con 3 puntos:

$$\int_a^b f(x)dx \approx w_1\ f(x_1) + w_2\ f(x_2) + w_3\ f(x_3)$$

Esta expresión será exacta si $f(x)$ es un polinomio de grado igual o menor que 5 (es decir, 2(3)-1) ¿Cuáles deben ser las abscisas x_1, x_2, x_3? Esto se considera brevemente en lo que sigue. El polinomio $g(x) = (x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)$, cuyas raíces son precisamente las abscisas de integración, es de tercer grado. En consecuencia la integración:

$$\int_a^b g(x)\,dx = w_1\ g(x_1) + w_2\ g(x_2) + w_3\ g(x_3) = 0$$

es exacta. Lo mismo puede decirse de las integrales de los polinomios $x\,g(x)$ y $x^2 g(x)$ (que son de grado 4 y 5, respectivamente):

$$\int_a^b x\ g(x)\ dx = w_1 x_1\ g(x_1) + w_2 x_2\ g(x_2) + w_3 x_3\ g(x_3) = 0$$

$$\int_a^b x^2 g(x)\,dx = w_1 x_1^2\ g(x_1) + w_2 x_2^2\ g(x_2) + w_3 x_3^2\ g(x_3) = 0$$

Es decir, x_1, x_2, x_3 son los 3 ceros del polinomio $g(x)$ que satisface las condiciones de ortogonalidad:

$$\int_a^b g(x)\,dx = 0$$

$$\int_a^b x\,g(x)\,dx = 0$$

$$\int_a^b x^2 g(x)\,dx = 0$$

Con el cambio de variable $x = \frac{1}{2}(b-a)z + \frac{1}{2}(b+a)$ se tiene que:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^{+1} F(z)dz = w_1\ F(z_1) + w_2\ F(z_2) + w_3\ F(z_3)$$

y en tal caso las abscisas z_i son los ceros del polinomio que satisface las condiciones:

$$\int_{-1}^{+1} P_3(z)\, dz = 0$$
$$\int_{-1}^{+1} z\, P_3(z)\, dz = 0$$
$$\int_{-1}^{+1} z^2 P_3(z)\, dz = 0$$

$P_3(z)$ es el polinomio de Legendre de grado 3. En general, cuando se consideran m puntos de integración las z_i son los ceros del polinomio de Legendre de grado m, $P_m(z)$. En la tabla siguiente se indican algunos de estos polinomios y sus ceros:

m	$P_m(z)$	z_i
1	z	0.
2	$\frac{1}{2}\left(3z^2 - 1\right)$	$\pm 0.57735\ldots$
3	$\frac{1}{2}\left(5z^3 - 3z\right)$	0., $\pm 0.77459\ldots$
4	$\frac{1}{8}\left(35z^4 - 30z^2 + 3\right)$	$\pm 0.33998\ldots$, $\pm 0.86113\ldots$
5	$\frac{1}{8}\left(63z^5 - 70z^3 + 15z\right)$	0., $\pm 0.53846\ldots$, $\pm 0.90617\ldots$

para estos polinomios: $(n+1)\, P_{n+1}(z) - (2n+1)\, zP_n(z) + n\, P_{n-1}(z) = 0$.

Para determinar los "pesos" correspondientes $w_1, w_2 \cdots w_m$ puede considerarse que:

$$\int_{-1}^{+1} F(z)dz = w_1 F(z_1) + w_2 F(z_2) + \ldots + w_m F(z_m) = 0$$

debe ser exacta para $F(z) = 1$, $F(z) = z$,... $F(z) = z^{m-1}$. En general:

$$w_i = \frac{2}{(1 - z_i^2) P'_m(z_i)} .$$

Las raíces, z_i , de $P_m(z)$ y los correspondientes pesos, w_i , pueden hallarse en tablas de Abramovitz y Según[1] u otras similares. Por ejemplo, para m=5:

z_i	w_i
0.	0.56888 88888 88889
$\pm 0.53846\,93101\,05683\ldots$	0.47862 86704 99366
$\pm 0.90617\,98459\,38664\ldots$	0.23692 68850 56189

Siendo conocidas estas abscisas y pesos:

$$\int_a^b f(x)\, dx = \tfrac{1}{2}(b-a)\left[w_1\ f(x_1) + w_2\ f(x_2) + \ldots + w_m\ f(x_{m)}) \right]$$

donde:

$$x_i = \tfrac{1}{2}(b-a) z_i + \tfrac{1}{2}(b+a)$$

Estas son las fórmulas de integración de Gauss - Legendre.

Considérese por ejemplo $\int_1^2 \frac{dx}{x} = \mathrm{Ln}\, 2 = 0.69314718$. En este caso $a = 1, b = 2$, $x_i = (z_i + 3)/2$ y se tiene:

[1] Véase: "Handbook of Mathematical Functions".- M. Abramowitz e I.A. Segun, editores. Dover Publications Inc., N.Y. 1965

i	z_i	x_i	$f(x_i)$	w_i
1	0.	1.5	0.666667	0.568889
2	-0.538469	1.230766	0.812502	0.478629
3	0.538469	1.769235	0.565216	0.478629
4	-0.906180	1.046910	0.955192	0.236927
5	0.906180	1.953090	0.512009	0.236927

y finalmente $\int_1^2 \frac{1}{x}\, dx \approx \frac{1}{2}(2-1)\sum_{i=1}^{5} w_i\, f(x_i) = \underline{0.6931474}$.

Algunas de las múltiples variantes de integración Gaussiana se mencionan a continuación (las correspondientes abscisas, x_i , y pesos, w_i , también pueden hallarse en tablas):

Fórmula de *Radau*:

$$\int_{-1}^{+1} f(x)dx \approx \left(\frac{2}{n^2}\right) f(-1) + \sum_{i=1}^{n-1} w_i\, f(x_i)$$

Las abscisas son los ceros de $\frac{\left(P_{n-1}(x) + P_n(x)\right)}{(1+x)}$ y los pesos: $w_i = \frac{(1-x_i)}{(nP_{n-1}(x_i))^2}$

Fórmula de *Lobatto*:

$$\int_{-1}^{+1} f(x)dx \approx \frac{2}{n(n-1)}\left[f(1) + f(-1)\right] + \sum_{i=1}^{n-1} w_i\, f(x_i)$$

La abscisa x_i es el $(i-1)^0$ cero de $P'_{n-1}(x)$ y los pesos $w_i = 2[n(n-1)]^{-1}[P_{n-1}(x_i)]^{-2}$.

Integración de *Gauss - Laguerre*:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i\, f(x_i)$$

Las abscisas son los ceros de los polinomios de Laguerre, $L_n(x)$
Los pesos resultan: $w_i = (n!)^2 x_i \left[(n+1)L_{n+1}(x_i)\right]^{-2}$.

Integración de *Gauss - Tchebicheff*:

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

En este caso se tienen abscisas $x_i = \cos\left(i - \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{n}$.

5.5.4. Generalización a dos o más dimensiones.

Hasta el momento solo se ha considerado la integración en una dimensión. El proceso para evaluar numéricamente integrales múltiples es análogo al proceso analítico, es decir, se integra en una variable a la vez y en cada una de estas etapas las otras variables se consideran como constantes. Por ejemplo:

$$\iint f(x,y)\, dx\, dy \approx \sum_{i=1}^{n} w_i \int f(x_i, y)\, dy \approx \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} w_i w_j\ f(x_i, y_j)$$