

MEMORIA DE ACTIVIDADES

INNOVACIÓN DOCENTE PARA EL CURSO 2008/2009

PROYECTO: Utilización de nuevas tecnologías en la asignatura de Análisis Numérico en el Grado de Matemáticas

CÓDIGO: ID/0080

RESPONSABLE: JESÚS VIGO AGUIAR.
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA

CENTRO DE APLICACIÓN DEL PROYECTO:

FACULTAD DE CIENCIAS

MATERIAS/ TITULACIÓN:

GRADO DE MATEMÁTICAS

CENTROS Y DEPARTAMENTOS IMPLICADOS:

FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA

PARTICIPANTES:

JESÚS VIGO AGUIAR. DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA
(jvigo@usal.es)

HIGINIO RAMOS CALLE. DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA
(higra@usal.es)

ARACELI QUEIRUGA DIOS. DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA
(queirugadios@usal.es)

El nuevo Grado en Matemáticas es uno de los cuatro grados que la Universidad de Salamanca ha puesto en marcha durante el curso 2008-09, y es también uno de los primeros en Matemáticas que se implantan a nivel nacional. La Facultad de Ciencias se está adaptando para la transformación del resto de titulaciones, a nivel de infraestructuras, tecnología y metodología docente, con el objetivo de cumplir con las directrices que establece el Espacio Europeo de Educación Superior. Este proceso debe conducirnos hacia una situación en la que nuestra calidad docente e investigadora sea aún mayor y así poder ofrecer a los futuros alumnos un atractivo añadido para que decidan estudiar en nuestra Universidad.

El Título de Graduado o Graduada en Matemáticas se dirige a capacitar para la formulación matemática, análisis, resolución y, en su caso, tratamiento informático de problemas en diversos campos de las ciencias básicas, ciencias sociales y de la vida, ingeniería, finanzas, consultoría, etc.

Objetivos formativos

Los objetivos generales que pretenden alcanzarse con las enseñanzas del Grado en Matemáticas son los siguientes:

1. Conocer la naturaleza, métodos y fines de los distintos campos de la Matemática junto con cierta perspectiva histórica de su desarrollo.
2. Reconocer la presencia de la Matemática subyacente en la Naturaleza, en la Ciencia, en la Tecnología y en el Arte. Reconocer a la

Matemática como parte integrante de la Educación y la Cultura.

3. Desarrollar las capacidades analíticas y de abstracción, la intuición y el pensamiento lógico y riguroso a través del estudio de la Matemática.
4. Capacitar para la utilización de los conocimientos teóricos y prácticos adquiridos en la definición y planteamiento de problemas y en la búsqueda de sus soluciones tanto en contextos académicos como profesionales.
5. Preparar para posteriores estudios especializados, tanto en una disciplina matemática como en cualquiera de las ciencias que requieran buenos fundamentos matemáticos.

Como objetivos particulares, el plan de estudios está orientado a la preparación profesional para la inserción de los matemáticos en equipos interdisciplinarios de empresas, industrias, bancos y consultorías, en ámbitos tanto investigadores como aplicados. Para ello, los estudiantes podrán elegir su itinerario formativo a partir de tres posibles itinerarios con materias comunes: académico, técnico y social.

Sistema de enseñanza – aprendizaje

La metodología de enseñanza - aprendizaje se pretende que sea similar en todas las asignaturas de los estudios del Grado de Matemáticas. En cada una de ellas se expondrá el contenido teórico de los temas a través de clases presenciales, siguiendo uno o dos libros de texto de referencia, que servirán para fijar los conocimientos ligados a las competencias previstas y dar paso a clases prácticas de resolución de problemas, en los que se aplicarán las

definiciones, propiedades y teoremas expuestos en las clases teóricas, utilizando cuando sea conveniente medios informáticos, de modo que en las clases prácticas los estudiantes se inicien en las competencias previstas.

A partir de esas clases teóricas y prácticas los profesores propondrán a los estudiantes la realización de trabajos personales sobre teoría y problemas, para cuya realización tendrán el apoyo del profesor en seminarios tutelados. En esos seminarios los estudiantes podrán compartir con sus compañeros y con el profesor las dudas que encuentren, obtener solución a las mismas y comenzar a desempeñar por si mismos las competencias previstas en cada asignatura.

Además, los estudiantes tendrán que desarrollar por su parte un trabajo personal de estudio y asimilación de la teoría, resolución de problemas propuestos y preparación de los trabajos propuestos.

Uso de nuevas tecnologías

La utilización creciente de las nuevas tecnologías de la información es una de las propuestas de la Conferencia de Rectores para llevar a buen término la adaptación a las nuevas estructuras académicas que pretendemos abordar de cara al EEES.

Dentro de este marco, la utilización de la plataforma Studium que la Universidad de Salamanca ha puesto a disposición de sus miembros, creemos que es una opción eficaz. Hemos desarrollado unos apuntes de los que aportamos el primer tomo, realizado a partir de la experiencia docente de los participantes en este proyecto durante el curso 2006-07 impartiendo la asignatura equivalente sobre la que se ha desarrollado este proyecto. El tomo segundo está también prácticamente finalizado. Estos apuntes serán la base de la asignatura, en consonancia con lo apuntado en el apartado anterior sobre metodología.

Estarán disponibles para que los alumnos los puedan descargar a través de la página que se creará cuando haya alumnos matriculados dentro de Studium.

Allí pondremos también las prácticas que han de hacer, así como las tareas docentes, los trabajos académicos, etc. buscando que sea un vehículo de intercambio entre todos lo que constituimos la asignatura, docentes y alumnos.



Para el curso próximo en que ya empezará a funcionar la asignatura de Análisis Numérico II pondremos todos los recursos que hemos ido elaborando en la página de la asignatura que se creará en Studium.



VNiVERSiDAD
D SALAMANCA

APUNTES

DE

ANÁLISIS NUMÉRICO

Jesús Vigo Aguiar, Higinio Ramos Calle, Araceli Queiruga Dios

CURSO 2008-09

Presentación:

Estos apuntes se ciñen a la materia estudiada en la asignatura de Análisis Numérico de 4 Curso de la Licenciatura de Matemáticas tal y como se imparte actualmente en la Universidad de Salamanca. Han sido concebidos como una ayuda que pueda servir para la comprensión de la asignatura y así deben entenderse.

La materia central objeto de estudio son los métodos más clásicos de resolución de ecuaciones diferenciales, esto es, los métodos de Runge-Kutta y los métodos lineales multipaso. Previamente hay unos capítulos dedicados a material complementario, que tratan de la interpolación, derivación e integración numéricas y ecuaciones en diferencias. El material de estos primeros capítulos se utilizará en mayor o menor medida en otras etapas más avanzadas del curso. Finalmente, tras el estudio de los métodos numéricos de resolución de ecuaciones hay dos capítulos dedicados a los problemas de valores en la frontera.

Los autores agradecen la comunicación de los errores que puedan advertirse y las sugerencias por parte de los usuarios, para así mejorar la calidad del texto (jvigo@usal.es, higr@usal.es, queirugadios@usal.es).

Salamanca, Enero de 2009

Índice general

| | |
|----------------------------------------------------------------------|-----------|
| 1. Interpolación polinómica. | 1 |
| 1.1. Introducción a la interpolación. Ejemplos. | 1 |
| 1.2. Planteamiento general del problema de la interpolación. | 2 |
| 1.3. Interpolación polinómica. | 3 |
| 1.4. Fórmula de Lagrange del polinomio de interpolación. | 3 |
| 1.5. Diferencias divididas y diferencias finitas. | 5 |
| 1.6. Fórmula de Newton del polinomio de interpolación. | 5 |
| 1.7. Algoritmo de Neville. | 8 |
| 1.8. Nodos igualmente espaciados. | 9 |
| 1.9. Error de interpolación. | 10 |
| 1.10. El polinomio de Taylor como caso particular. | 11 |
| 1.11. Polinomio osculador. | 12 |
| 1.12. Error del polinomio osculador. | 13 |
| 1.13. construcción del polinomio de Hermite | 14 |
| 1.14. Ejemplos. | 16 |
| 1.15. Elección óptima de los nodos de interpolación. | 17 |
| 1.16. Elección de nodos | 19 |
| 1.17. Actividades complementarias. | 20 |
| 1.18. Bibliografía. | 22 |
| 2. Derivación numérica | 25 |
| 2.1. Planteamiento y ejemplos introductorios. | 25 |
| 2.2. La derivación es un problema mal condicionado. | 26 |
| 2.3. Derivación interpolatoria | 26 |

| | | |
|-----------|--------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 2.4. | Fórmula de derivación interpolatoria para datos equiespaciados. | 28 |
| 2.5. | Método de coeficientes indeterminados | 29 |
| 2.6. | Deducción de fórmulas de derivación a partir del desarrollo de Taylor. | 30 |
| 2.7. | Inestabilidad de la diferenciación numérica. | 31 |
| 2.8. | Aproximación de derivadas de orden superior. | 33 |
| 2.9. | Extrapolación de Richardson. | 34 |
| 2.10. | Actividades complementarias. | 38 |
| 2.11. | Actividades complementarias. | 39 |
| 2.12. | Bibliografía. | 40 |
| 3. | Fórmulas de Newton-Cotes | 43 |
| 3.1. | Planteamiento del problema de integración numérica. | 43 |
| 3.2. | Fórmulas interpolatorias | 45 |
| 3.3. | Fórmulas cerradas de Newton-Cotes. | 46 |
| 3.4. | Ejemplos de fórmulas cerradas. | 48 |
| 3.5. | Formulas abiertas de Newton-Cotes. | 49 |
| 3.6. | Ejemplos de fórmulas abiertas. | 49 |
| 3.7. | Grado de precisión. Error en las fórmulas de tipo interpolatorio. | 50 |
| 3.8. | Método de coeficientes indeterminados | 51 |
| 3.9. | Fórmulas de integración de Newton-Cotes compuestas. | 52 |
| 3.10. | Errores en las fórmulas compuestas | 53 |
| 3.11. | Errores en las fórmulas de integración compuestas. | 54 |
| 3.12. | Estabilidad respecto del error de redondeo. | 54 |
| 3.13. | Polinomios de Bernoulli. | 56 |
| 3.14. | Fórmula de Euler-MacLaurin. | 56 |
| 3.15. | Fórmula compuesta de Euler-MacLaurin. | 58 |
| 3.16. | Actividades complementarias. | 59 |
| 3.17. | Bibliografía. | 62 |
| 4. | Cuadratura gaussiana | 65 |
| 4.1. | Introducción. | 65 |
| 4.2. | Polinomios ortogonales. | 69 |
| 4.3. | grado de precisión máximo | 71 |

| | |
|--------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 4.4. Error en las fórmulas gaussianas | 76 |
| 4.5. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Legendre. | 78 |
| 4.6. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Chebyshev. | 81 |
| 4.7. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Laguerre. | 84 |
| 4.8. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Hermite. | 87 |
| 4.9. Cambio del intervalo de integración. | 90 |
| 4.10. Actividades complementarias. | 91 |
| 4.11. Bibliografía. | 92 |
| 5. Ecuaciones en diferencias | 93 |
| 5.1. Generalidades y motivación. | 93 |
| 5.2. Independencia lineal de funciones. | 96 |
| 5.3. Ecuaciones en diferencias lineales. | 98 |
| 5.4. Solución general de la ecuación no homogénea | 103 |
| 5.5. Ecuación lineal de primer orden. | 103 |
| 5.6. Método de coeficientes indeterminados | 104 |
| 5.7. Método de variación de parámetros para la ecuación lineal de primer orden. | 106 |
| 5.8. Ecuación lineal de coeficientes constantes. | 107 |
| 5.9. Ecuación lineal de segundo orden con coeficientes constantes. | 108 |
| 5.10. Método de variación de parámetros | 109 |
| 5.11. sistemas de ecuaciones | 111 |
| 5.12. Actividades complementarias. | 113 |
| 5.13. Bibliografía. | 114 |
| 6. P.V.I. y el método de Euler | 117 |
| 6.1. resolución numérica de P.V.I. | 117 |
| 6.2. El método de Euler y el campo de pendientes. | 120 |
| 6.3. El método de Euler. | 121 |
| 6.4. Estudio de los errores. | 124 |
| 6.5. Análisis de la convergencia del método de Euler. | 125 |
| 6.6. Efecto de los errores de redondeo | 127 |
| 6.7. Acotación del error global | 129 |

| | |
|-------------------------------------------------------------|-----|
| 6.8. Comportamiento asintótico del error global. | 130 |
| 6.9. Método de Euler y extrapolación de Richardson. | 133 |
| 6.10. Actividades complementarias. | 133 |
| 6.11. Bibliografía. | 134 |

Capítulo 1

Interpolación polinómica.

1.1. Introducción a la interpolación. Ejemplos.

Sabemos cómo aproximar localmente una función suficientemente derivable por un polinomio: polinomio de Taylor. Pero la información para obtenerla está concentrada en un determinado punto, x_0 . Cuando se dispone de información sobre la función en más puntos, por ejemplo en los $n + 1$ puntos distintos $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, se requiere otro tipo de aproximación.

El problema más simple de la interpolación consiste en hallar un polinomio de grado $\leq n$ que pase por $n + 1$ puntos $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$, siendo los valores x_i distintos entre sí. Los números y_i corresponden a valores de determinada función $f(x)$, aunque no se conozca explícitamente, en los puntos x_i , es decir, $y_i = f(x_i)$. Estudiaremos cómo encontrar polinomios que se aproximen a la función en base al conocimiento del valor de la función o también de sus derivadas en ciertos puntos (interpolaciones de Lagrange y Hermite). Pero hay otras posibilidades:

Ejemplo:

Halle los valores de los parámetros a y b para que la función $y(x) = a + bx$ pase por los puntos $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$. ¿Puede relacionar este problema con un problema de ecuaciones diferenciales?

Ejemplo:

Halle los valores de los parámetros a y b para que la función $y(x) = ae^x + be^{-x}$ pase por los puntos $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$. ¿Puede relacionar este problema con un

problema de ecuaciones diferenciales?

Ejemplo:

Halle los valores de los parámetros a y b para que la función $y(x) = a \cos(x) + b \sin(x)$ pase por los puntos $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$. ¿Puede relacionar este problema con un problema de ecuaciones diferenciales?

1.2. Planteamiento general del problema de la interpolación.

OBJETIVO: Dada una familia de funciones $\phi(x; a_0, \dots, a_n)$ en una variable x , dependiente de $n + 1$ parámetros, a_0, a_1, \dots, a_n , se trata de determinar los valores de los parámetros de modo que dado un conjunto de puntos $\{(x_i, y_i)\}_{i \in I}$ con $x_i \neq x_j$ para $i \neq j$, se verifique que

$$\phi(x_i; a_0, \dots, a_n) = y_i, \quad i \in I.$$

En el caso de los ejemplos anteriores se habla de **interpolación polinomial**, **interpolación exponencial** o **interpolación trigonométrica**.

NOTA: normalmente el número de puntos por los que se hace pasar la función coincide con el número de parámetros, pero no siempre es así. Veamos algún ejemplo de **interpolación racional**.

Ejemplo:

Halle los valores de los parámetros a , b , y c para que la función racional dada por $y(x) = a/(b + cx)$ pase por los puntos $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)$. ¿Tiene solución el problema?.

Ejemplo:

¿Hay alguna función racional de la forma $q(x) = \frac{a_0 + a_1 x}{b_0 + b_1 x}$ que pase por los puntos $(0, 1), (1, 2), (2, 2)$?

1.3. Interpolación polinómica.

Teorema 1.3.1 (existencia y unicidad) *Sea P_n el conjunto de polinomios de grado menor o igual que n . Dados $n + 1$ puntos distintos, $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$, con $x_i \neq x_j$, existe un único polinomio $p_n(x) \in P_n$ tal que*

$$p_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Demostración

Si escribimos el polinomio $p_n(x)$ en la forma $p_n(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n$, e imponemos que $p_n(x_i) = y_i$, $i = 0, \dots, n$, se obtiene un sistema lineal de $n + 1$ ecuaciones con $n + 1$ incógnitas. El determinante de la matriz del sistema que resulta es un determinante de Vandermonde, y ello supone que exista una única solución, lo que determina la existencia y unicidad del polinomio de interpolación. \square

Ejemplo:

Halle el polinomio de interpolación que pasa por los puntos siguientes: $(0, 1)$, $(1, 3)$, $(3, 2)$.

Para valores de n grandes la tarea de obtener los coeficientes del polinomio resolviendo el sistema anterior, además de laboriosa, puede resultar muy ineficiente por cuanto la matriz de Vandermonde está mal condicionada. Una forma alternativa de obtener el polinomio de interpolación la constituye la llamada **forma de Lagrange**. Por otra parte es una manera constructiva de establecer la existencia del polinomio de interpolación en las condiciones del teorema anterior.

1.4. Fórmula de Lagrange del polinomio de interpolación.

La fórmula de Lagrange del polinomio de interpolación es una manera constructiva de demostrar la existencia de dicho polinomio.

Los polinomios básicos de Lagrange son polinomios de grado n que se definen como

$$L_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

y trivialmente verifican $L_i(x_j) = \delta_{ij}$.

Se comprueba sin dificultad que el polinomio dado por

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i L_i(x)$$

es un polinomio de $P_n(x)$ que es el polinomio de interpolación buscado.

Ejercicio:

Si se define $\omega(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$, pruebe que los polinomios básicos de Lagrange se pueden poner en la forma

$$L_i(x) = \frac{\omega(x)}{(x - x_i) \omega'(x_i)}.$$

Un inconveniente de la forma de Lagrange del polinomio de interpolación es la rigidez que presenta. Si se considera un punto adicional (x_{n+1}, y_{n+1}) , los correspondientes polinomios básicos de Lagrange (que ahora tendrán grado $n + 1$) habrán de calcularse de nuevo.

La **forma de Newton** del polinomio de interpolación permite obtener con un mínimo de esfuerzo el nuevo polinomio cuando se añaden puntos adicionales. Veremos que esta formulación será particularmente útil para la obtención de fórmulas de integración numérica de problemas de valor inicial.

Por el contrario, el algoritmo de Lagrange tiene la ventaja de que para un mismo soporte con distintos valores $\{y_i\}_{i=0}^n$ basta con calcular los polinomios básicos una sola vez, lo que permite calcular diferentes polinomios de interpolación asociados al mismo soporte.

Ejercicio:

Si los puntos del soporte están igualmente espaciados, $x_{i+1} - x_i = h$, pruebe que los polinomios de la base de Lagrange dependen sólo del número de puntos del soporte y no de la posición de los mismos.

Indicación: Basta hacer una transformación lineal que transforme el intervalo $[x_0, x_n]$ en el $[0, n]$ para obtener que

$$L_i(x) = l_i(t) = \frac{(-1)^{n-i}}{n!} \binom{n}{i} \prod_{j=0, j \neq i}^n (t - j).$$

1.5. Diferencias divididas y diferencias finitas.

Definición 1.5.1 *La diferencia dividida de orden cero de una función f en el punto x_i , la cual se escribe $f[x_i]$, es simplemente el valor de la función en el punto, $f(x_i)$. Las diferencias divididas de orden superior se definen recursivamente a partir de las diferencias divididas de menor orden por la fórmula*

$$f[x_i, \dots, x_{i+k}] = \frac{f[x_i, \dots, x_{i+k-1}] - f[x_{i+1}, \dots, x_{i+k}]}{x_i - x_{i+k}}.$$

Definición 1.5.2 *Las diferencias progresivas de orden j de la función f en el punto x_i , $\Delta^j f(x_i)$, se definen recursivamente mediante*

$$\Delta^0 f(x_i) = f(x_i),$$

$$\Delta^1 f(x_i) = f(x_{i+1}) - f(x_i),$$

$$\Delta^j f(x_i) = \Delta^1 (\Delta^{j-1}) f(x_i).$$

Definición 1.5.3 *Las diferencias regresivas de orden j de la función f en el punto x_i , $\nabla^j f(x_i)$, se definen recursivamente mediante*

$$\nabla^0 f(x_i) = f(x_i),$$

$$\nabla^1 f(x_i) = f(x_i) - f(x_{i-1}),$$

$$\nabla^j f(x_i) = \nabla^1 (\nabla^{j-1}) f(x_i).$$

1.6. Fórmula de Newton del polinomio de interpolación.

Sea $p_{n-1}(x)$ el polinomio que interpola en los puntos x_0, x_1, \dots, x_{n-1} a una función $f(x)$, que supondremos conocido, y supongamos que obtenemos información

sobre el valor de la función en el punto x_n , $f(x_n)$, y sea $p_n(x)$ el correspondiente polinomio de interpolación en todos los puntos anteriores. Vamos a intentar aprovechar el conocimiento de $p_{n-1}(x)$ para obtener el $p_n(x)$.

El polinomio $q_n(x) = p_n(x) - p_{n-1}(x)$, $n \geq 1$, verifica $q_n(x_i) = 0$ para cada $i = 0, 1, \dots, n-1$, luego es de la forma

$$q_n(x) = c_n(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) \quad (1.1)$$

siendo c_n constante y por tanto

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + q_n(x) = p_{n-1}(x) + c_n(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}).$$

El coeficiente c_n se calcula de la siguiente forma: evaluando la igualdad en (1.1) en el punto x_n y despejando resulta

$$c_n = \frac{q_n(x_n)}{(x_n - x_0) \dots (x_n - x_{n-1})} = \frac{p_n(x_n) - p_{n-1}(x_n)}{(x_n - x_0) \dots (x_n - x_{n-1})}$$

y siendo $p_n(x_n) = f(x_n) = y_n$, llamando $c_0 = f(x_0) = p_0(x)$, podemos poner:

$$p_n(x) = p_0(x) + (p_1(x) - p_0(x)) + \dots + (p_n(x) - p_{n-1}(x))$$

es decir,

$$p_n(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + c_n(x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) \quad (1.2)$$

La determinación de los coeficientes c_i en (1.2) se puede obtener a partir de la definición de las diferencias divididas. Se tiene que

$$\begin{aligned} f[x, x_0, \dots, x_n] &= -\frac{f[x_0, \dots, x_n]}{x - x_n} + \frac{f[x, \dots, x_{n-1}]}{x - x_n} \\ f[x, x_0, \dots, x_{n-1}] &= -\frac{f[x_0, \dots, x_{n-1}]}{x - x_{n-1}} + \frac{f[x, \dots, x_{n-2}]}{x - x_{n-1}} \\ &\vdots \\ f[x, x_0, x_1] &= -\frac{f[x_0, x_1]}{x - x_1} + \frac{f[x, x_0]}{x - x_1} \\ f[x, x_0] &= -\frac{f(x_0)}{x - x_0} + \frac{f(x)}{x - x_0} \end{aligned}$$

y sustituyendo hacia atrás en las fórmulas anteriores resulta

$$f[x, x_0, \dots, x_n] = -\frac{f[x_0, \dots, x_n]}{x - x_n} - \frac{f[x_0, \dots, x_{n-1}]}{(x - x_n)(x - x_{n-1})} - \dots$$

$$-\frac{f[x_0, x_1]}{(x - x_n) \dots (x - x_1)} - \frac{f(x_0)}{\omega(x)} + \frac{f(x)}{\omega(x)}$$

y despejando $f(x)$ y llamando $R_n(x) = \omega(x) f[x, x_0, \dots, x_n]$ se tiene que

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

$$+ f[x_0, \dots, x_n](x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) + R_n(x)$$
(1.3)

Como $R_n(x)$ se anula en x_0, x_1, \dots, x_n y por la unicidad del polinomio de interpolación resulta que $p_n(x)$ se puede escribir en la forma que sigue, siendo $c_i = f[x_0, \dots, x_i]$,

$$p_n(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots$$

$$+ f[x_0, \dots, x_n](x - x_0) \dots (x - x_{n-1})$$

$$= c_0 + c_1(x - x_0) + \dots + c_n(x - x_0) \dots (x - x_{n-1}).$$

A partir de la representación del polinomio de interpolación en la forma de Newton se siguen fácilmente los siguientes resultados

Proposición 1.6.1 *Las diferencias divididas son funciones simétricas de sus argumentos, esto es,*

$$f[x_0, \dots, x_n] = f[x_{i_0}, \dots, x_{i_n}]$$

siendo (i_0, \dots, i_n) una permutación cualquiera de $(0, 1, \dots, n)$.

Proposición 1.6.2 *Si $f(x)$ es un polinomio de grado n entonces es*

$$f[x_0, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots] = 0.$$

Proposición 1.6.3 Sea Γ una trayectoria cerrada que contiene a los puntos x_0, \dots, x_n . Entonces, si $h(z) = f(z) / \prod_{s=0}^n (z - x_s)$, y si $f(x)$ no tiene polos en esos puntos, resulta que

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{f(z)}{(z - x_0) \dots (z - x_n)} dz = \sum_{s=0}^n \text{Res}(h, x_s) = f[x_0, \dots, x_n].$$

Las diferencias divididas se pueden representar a partir de los datos $(x_i, f(x_i))$ en una tabla en la forma:

$$\begin{array}{cccccc} x_0 & f[x_0] & f[x_0, x_1] & f[x_0, x_1, x_2] & f[x_0, x_1, x_2, x_3] & \dots \\ x_1 & f[x_1] & f[x_1, x_2] & f[x_0, x_1, x_2] & \vdots & \\ x_2 & f[x_2] & f[x_0, x_1] & \vdots & & \\ x_3 & f[x_3] & \vdots & & & \\ \vdots & & & & & \end{array}$$

situándose en la primera fila los coeficientes necesarios para formar el polinomio de Newton.

1.7. Algoritmo de Neville.

Si no se pretende determinar la expresión del polinomio de interpolación y sí conocer el valor de éste en un punto, se puede proceder en la forma recurrente que se señala en el siguiente teorema.

Teorema 1.7.1 Denotando por p_{i_1, \dots, i_n} el polinomio de interpolación correspondiente a los puntos x_{i_1}, \dots, x_{i_n} , si $f(x)$ está definida en x_0, \dots, x_n y $x_i \neq x_j$ son dos de estos puntos, entonces el polinomio de interpolación $p_n(x)$ se puede expresar en la forma:

$$p_n(x) = p_{01\dots n} = \frac{(x - x_j)p_{0\dots j-1j+1\dots n} - (x - x_i)p_{0\dots i-1i+1\dots n}}{x_i - x_j},$$

siendo $p_i = f(x_i)$.

Demostración

La demostración se obtiene de forma inmediata sin más que evaluar el polinomio $p_{01\dots n}$ en la forma anterior (el cual es de grado menor o igual a n puesto que $p_{0\dots j-1j+1\dots n}$ y $p_{0\dots i-1i+1\dots n}$ son de grado menor o igual a $n - 1$) en los puntos x_0, \dots, x_n para verificar que $p_{01\dots n}(x_i) = f(x_i)$ para $i = 0, \dots, n$, y por la unicidad del polinomio de interpolación se concluye. \square

1.8. Nodos igualmente espaciados.

En el caso particular en que los puntos x_i estén igualmente espaciados, a una distancia $h > 0$, poniendo $x_j = x_0 + jh$, $0 \leq j \leq n$, el polinomio de interpolación adopta una forma más sencilla, expresándose únicamente en términos de h y de x_0 . El siguiente teorema nos da la clave para obtener una forma más sencilla.

Teorema 1.8.1 Sean los puntos $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ igualmente espaciados a una distancia $h > 0$. Se tiene que siendo $0 \leq m \leq n$ se puede poner

$$f[x_0, x_1, \dots, x_m] = \frac{\Delta^m f(x_0)}{h^m m!},$$

$$f[x_n, \dots, x_{n-m}] = \frac{\nabla^m f(x_n)}{h^m m!}.$$

Demostración

Se procede por inducción. \square

Corolario 1.8.1 Si los puntos x_i están igualmente espaciados, siendo $x_i = x_0 + ih$, $i = 1, \dots, n$ entonces se tiene que $\Delta^n f(x_0) = \nabla^n f(x_n)$.

A partir de la forma de Newton del polinomio de interpolación, utilizando el teorema anterior se obtiene que se puede escribir

$$p_n(x) = p_n(x_0 + sh) = \sum_{i=0}^n \binom{s}{i} \Delta^i f(x_0),$$

o bien,

$$p_n(x) = p_n(x_n + s h) = \sum_{i=0}^n (-1)^i \binom{-s}{i} \nabla^i f(x_n).$$

1.9. Error de interpolación.

Un aspecto importante dentro del análisis numérico es la medida del error que se comete al realizar una aproximación. En el caso del polinomio de interpolación, según vimos en (1.3) se tiene

$$Err(x) = R_n(x) = f(x) - p_n(x).$$

Lema 1.9.1 Si $f \in \mathcal{C}^n[a, b]$ siendo $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a, b]$ existe $\zeta \in (a, b)$ tal que

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\zeta)}{n!}.$$

Demostración

La función $R_n(x)$ se anulaba en x_0, x_1, \dots, x_n , así que aplicando el Teorema de Rolle repetidamente se sigue que existe un ζ entre los x_i tal que $R_n^{(n)}(\zeta) = 0$. Pero $R_n^{(n)}(\zeta) = f^{(n)}(\zeta) - n! f[x_0, x_1, \dots, x_n]$, de donde se sigue el resultado. \square

Aplicando el lema anterior se tiene que el error se puede poner

$$Err(x) = R_n(x) = \omega(x) f[x, x_0, \dots, x_n] = \frac{f^{(n+1)}(\zeta_x)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i), \quad (1.4)$$

donde ζ_x es un punto intermedio entre los nodos de interpolación x_i y el punto x .

Además, si $M = \max_{a \leq x \leq b} |f^{(n+1)}(x)|$ se tiene que

$$|Err(x)| \leq \frac{M}{(n+1)!} \max_{a \leq x \leq b} \left| \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right|.$$

1.10. El polinomio de Taylor como caso particular.

Si $f \in \mathcal{C}^{n+1}[a, b]$, a partir de la fórmula de interpolación de Newton

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots \\ &\quad + f[x_0, \dots, x_n](x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) \\ &\quad + f[x_0, \dots, x_n, x] w(x) \end{aligned}$$

y del lema anterior, podemos poner

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + f'(\xi_1)(x - x_0) + \dots \\ &\quad + \frac{f^{(n)}(\xi_n)}{n!} (x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) \\ &\quad + \frac{f^{(n+1)}(\xi_{n+1})}{(n+1)!} w(x) \end{aligned}$$

donde cada ξ_j es un valor intermedio entre los nodos x_0, \dots, x_j para $j = 0, \dots, n$, mientras que ξ_{n+1} es un valor entre x, x_0, \dots, x_n .

Si ahora hacemos que todos los puntos de interpolación tiendan hacia el x_0 , entonces los puntos ξ_j para $j = 0, \dots, n$, también tenderán a x_0 . La fórmula anterior entonces se expresa en la forma

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \dots \\ &\quad + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)^{n+1} \end{aligned}$$

donde ξ es un valor entre x y x_0 .

Se obtiene así la fórmula de Taylor, y el polinomio de Taylor resulta ser un polinomio que interpola a la función y sus derivadas hasta el orden n en el punto x_0 en el sentido de que

$$p_n^{(l)}(x_0) = f^{(l)}(x_0), \quad 0 \leq l \leq n.$$

1.11. Polinomio osculador.

Cuando, además de conocer los valores de una función en un conjunto de nodos, se conoce información sobre algunas de sus derivadas en esos nodos, buscaremos un polinomio que coincida con esos datos. Este polinomio se conoce como **polinomio osculador**.

Así por ejemplo, si se conocen los valores de una función $f(x)$ y su derivada en dos puntos, x_0, x_1 , parece evidente que el polinomio interpolador habrá de ser de grado tres, $p(x) = a + bx + cx^2 + dx^3$, puesto que disponemos de cuatro coeficientes a determinar, que obtendremos imponiendo las cuatro condiciones conocidas. El teorema general que sigue permite afirmar la existencia de polinomios de esta forma.

Teorema 1.11.1 *Dados $k+1$ puntos x_0, \dots, x_k , y $k+1$ números $\alpha_0, \dots, \alpha_k \in \mathbb{N}$, con $n = k + \alpha_0 + \dots + \alpha_k$, si se conocen los valores de las derivadas hasta orden α_i de cierta función $f(x)$ en los puntos x_i , entonces existe un único polinomio $p_n(x)$ de grado $\leq n$ tal que*

$$p_n^{(l)}(x_i) = f^{(l)}(x_i), \quad 0 \leq i \leq k, \quad 0 \leq l \leq \alpha_i.$$

Demostración

Si ponemos $p_n(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n$, las condiciones anteriores conducen a un sistema de $n+1$ ecuaciones ($k+1 + \alpha_0 + \dots + \alpha_k$) con $n+1$ incógnitas (las a_i , $i = 0, \dots, n$).

Es suficiente probar que el sistema homogéneo asociado tiene únicamente la solución nula, es decir,

$$\text{si } p_n^{(l)}(x_i) = 0, \quad 0 \leq i \leq k, \quad 0 \leq l \leq \alpha_i \Rightarrow a_0 = a_1 = \dots = a_n = 0.$$

Ahora bien, estas ecuaciones implican que x_i es una raíz de orden $\alpha_i + 1$ de $p_n(x)$, con lo que $p_n(x)$ tiene la forma

$$p_n(x) = q(x) \prod_{i=0}^k (x - x_i)^{\alpha_i + 1}.$$

Pero el grado de la parte derecha de la igualdad anterior es al menos

$$\alpha_0 + 1 + \alpha_1 + 1 + \dots + \alpha_k + 1 = k + 1 + \alpha_0 + \dots + \alpha_k = n + 1,$$

luego para que $p_n(x) \in P_n$ ha de ocurrir que $q(x) = 0$, y en definitiva, $p_n(x) = 0$.
□

En particular, si en los resultados anteriores se toma $\alpha_i = 0$ para todo i se obtiene la conocida fórmula de interpolación de Lagrange, y si sólo se tiene un punto, es decir, $k = 0$, junto con $\alpha_0 = n$, entonces se obtiene el polinomio de Taylor. Y cuando sólo se dan condiciones sobre la primera derivada, es decir, $\alpha_i = 1$ para todo i , el polinomio resultante se conoce como **polinomio de Hermite**.

NOTA: si en lugar de los valores de la función y sus derivadas en los puntos x_i se tienen valores b_{il} para $0 \leq i \leq k$, $0 \leq l \leq \alpha_i$, el resultado es el mismo, y existe un único polinomio $p_n(x) \in P_n$ tal que $p_n^{(l)}(x_i) = b_{il}$.

NOTA: La **unicidad** del polinomio anterior se obtiene del hecho de que la matriz del sistema lineal que se forma es no singular, pero se puede demostrar directamente:

Sean $p(x)$ y $q(x)$ dos polinomios de grado $\leq n$ que verifican las condiciones del teorema. Entonces se tiene que

$$p(x_i) = q(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, k$$

y además

$$p^{(\alpha_i)}(x_i) = q^{(\alpha_i)}(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, k$$

con lo cual, x_i es una raíz de multiplicidad $\alpha_i + 1$ del polinomio de grado $\leq n$, $r(x) = p(x) - q(x)$. Pero esto es una contradicción, puesto que $r(x)$ sería de la forma

$$r(x) = \lambda(x)(x - x_0)^{\alpha_0+1} \dots (x - x_k)^{\alpha_k+1}$$

y tendría grado $\geq \alpha_0 + 1 + \dots + \alpha_k + 1 = n + 1$. □

1.12. Error del polinomio osculador.

La medida del error que se comete al aproximar la función $f(x)$ por el polinomio osculador viene dada por un teorema análogo al que vimos para la interpolación de Lagrange.

Teorema 1.12.1 *En las condiciones del teorema anterior, si $f(x) \in \mathcal{C}^{n+1}[a, b]$ entonces existe $\xi_x \in (a, b)$ tal que*

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} (x - x_0)^{\alpha_0+1} \cdots (x - x_k)^{\alpha_k+1}.$$

Demostración

Para $x \neq x_i$ consideramos el polinomio de grado $n+1$ dado por

$$q_{n+1}(t) = p_n(t) + \frac{f(x) - p_n(x)}{(x - x_0)^{\alpha_0+1} \cdots (x - x_k)^{\alpha_k+1}} (t - x_0)^{\alpha_0+1} \cdots (t - x_k)^{\alpha_k+1},$$

el cual cumple que $q_{n+1}(x) = f(x)$ además de

$$q_{n+1}^{(l)}(x_i) = f^{(l)}(x_i), \quad 0 \leq i \leq k, \quad 0 \leq l \leq \alpha_i$$

(es decir, q_{n+1} es el polinomio osculador relativo a x_0, x_1, \dots, x_k, x para los enteros $\alpha_0, \dots, \alpha_k, 0$).

Sea $F(t) = f(t) - q_{n+1}(t)$. Según acabamos de ver $F(t)$ tiene en x_0 un cero de al menos multiplicidad $\alpha_0 + 1$, en x_1 un cero de al menos multiplicidad $\alpha_1 + 1$, y así en todos los puntos x_i , y en el punto x un cero de multiplicidad al menos 1. En definitiva, $F(t)$ tiene al menos

$$\alpha_0 + 1 + \dots + \alpha_k + 1 + 1 = n + 2$$

ceros. Haciendo uso del Teorema de Rolle se sigue que $F^{(n+1)}$ tendrá al menos un cero, ξ_x , y por tanto

$$0 = F^{(n+1)}(\xi_x) = f^{(n+1)}(\xi_x) - (n+1)! \frac{f(x) - p_n(x)}{(x - x_0)^{\alpha_0+1} \cdots (x - x_k)^{\alpha_k+1}},$$

de donde se obtiene el enunciado. \square

1.13. Algoritmos de construcción del polinomio de Hermite.

Veamos cómo se puede construir el polinomio de Hermite. Supongamos que pretendemos determinar el polinomio $p(x)$ de grado $\leq 2n+1$ que verifica

$$p(x_i) = f(x_i) = y_i, \quad p'(x_i) = f'(x_i) = z_i, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Consideraremos dos algoritmos, uno que procede de manera recursiva, de manera parecida al que vimos para construir el polinomio de interpolación en la forma de Newton, y otro similar al de la construcción del polinomio de Lagrange, a partir de unos polinomios básicos.

1. Algoritmo tipo Newton.

Consideramos los polinomios

$$\begin{aligned} w_1(x) &= x - x_0 \\ w_2(x) &= (x - x_0)^2 \\ w_3(x) &= (x - x_0)^2 (x - x_1) \\ w_4(x) &= (x - x_0)^2 (x - x_1)^2 \\ &\vdots \\ w_{2n+1}(x) &= (x - x_0)^2 \cdots (x - x_{n-1})^2 (x - x_n) \end{aligned}$$

y tomamos sucesivos polinomios $p_k(x) = p_{k-1}(x) + c_k w_k(x)$ siendo $p_0(x) = y_0$ a los que se va imponiendo las condiciones requeridas sobre los valores del polinomio y su derivada en los sucesivos puntos para obtener los coeficientes c_i .

$$\begin{aligned} p_1(x) &= y_0 + c_1 w_1(x), & z_0 &= p_1'(x_0) = c_1 \\ p_2(x) &= p_1(x) + c_2 w_2(x), & y_1 &= p_2(x_1) = p_1(x_1) + c_2 (x_1 - x_0)^2 \\ p_3(x) &= p_2(x) + c_3 w_3(x), & z_1 &= p_3'(x_1) = p_2'(x_1) + c_3 (x_1 - x_0)^2 \\ &\vdots \\ p_{2n}(x) &= p_{2n-1}(x) + c_{2n} w_{2n}(x), & c_{2n} p_{2n}(x_n) &= y_n \\ p_{2n+1}(x) &= p_{2n}(x) + c_{2n+1} w_{2n+1}(x), & c_{2n+1} p_{2n+1}'(x_n) &= z_n \end{aligned}$$

El polinomio $p_{2n+1}(x)$ así construido es el polinomio buscado.

2. Algoritmo tipo Lagrange.

Se considera un conjunto de polinomios auxiliares H_k y K_k , para $k = 0, 1, \dots, n$,

definidos por

$$H_k(x) = [L_k(x)]^2 (1 - 2L'_k(x_k)(x - x_k))$$

$$K_k(x) = [L_k(x)]^2 (x - x_k)$$

donde L_k son los polinomios de la base de Lagrange, es decir,

$$L_k(x) = \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j}, \quad L'_k(x_k) = \sum_{j=0, j \neq k}^n \frac{1}{x_k - x_j}.$$

Estos polinomios verifican para $i, k = 0, 1, \dots, n$:

$$\begin{aligned} H_k(x_i) &= \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases} & H'_k(x_i) &= 0 \\ K_k(x_i) &= 0, & K'_k(x_i) &= \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases} \end{aligned}$$

de donde se deduce que el polinomio

$$p_{2n+1}(x) = \sum_{k=0}^n H_k(x)y_k + K_k(x)z_k$$

es un polinomio que cumple las condiciones pedidas.

Y como, según vimos, el polinomio de Hermite es único, este es el polinomio pedido.

1.14. Ejemplos.

Ejemplo:

Construya el polinomio de interpolación que verifica

$$p(0) = 0, \quad p'(0) = 1, \quad p(1) = 0, \quad p'(1) = 1.$$

Solución: se obtiene el polinomio $x - 3x^2 + 2x^3$.

Ejemplo:

¿Puede calcular un polinomio de grado ≤ 2 que cumpla las condiciones siguientes?

$$p(0) = 0, \quad p(1) = 1, \quad p'(1/2) = 2.$$

¿Existe algún valor de k para el cual tiene solución el problema anterior siendo $p'(1/2) = k$? ¿Y si consideramos un polinomio de grado ≤ 3 ?

1.15. Elección óptima de los nodos de interpolación.

La fórmula teórica del error en (1.4) resulta útil para intentar minimizar el error de interpolación. Sobre el factor $f^{(n+1)}(\zeta_x)$ no podemos intervenir, pero el otro término sí que se puede modificar escogiendo los puntos x_i de manera que la magnitud del producto $\omega(x) = (x - x_0) \cdots (x - x_n)$ sea lo más pequeña posible en valor absoluto. El problema de cómo escoger los puntos de la mejor manera posible fue resuelto por el matemático ruso Chebyshev, quien demostró que la mejor elección de las abscisas de los puntos de interpolación en el intervalo $[-1, 1]$ viene dada por los ceros de los polinomios que llevan su nombre.

Definición 1.15.1 *El polinomio de Chebyshev de grado n en $[-1, 1]$ está definido por*

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x).$$

Estos polinomios se pueden obtener recursivamente a partir de las fórmulas ¹

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x,$$

$$T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x), \quad n \geq 2,$$

de donde se deduce que el coeficiente del término de mayor grado de $T_n(x)$ es 2^{n-1} . La acotación del término $\omega(x)$ se obtiene a partir del teorema siguiente.

¹ Se obtiene a partir de la identidad
 $\cos(n\theta) + \cos((n-2)\theta) = 2 \cos(\theta) \cos((n-1)\theta).$

Teorema 1.15.1 *Si $q_n(x)$ es un polinomio mónico de grado n entonces*

$$\max_{x \in [-1,1]} |q_n(x)| \geq \frac{1}{2^{n-1}}.$$

Demostración

Se procede por reducción al absurdo. Supongamos entonces que

$$|q_n(x)| < \frac{1}{2^{n-1}} \quad \text{para } |x| < 1.$$

Sea $r(x) = 1/(2^{n-1})T_n(x)$ el polinomio mónico de Chebyshev de grado n , y $x_i = \cos(i\pi/n)$, $i = 0, 1, \dots, n$ los puntos de extremo de $T_n(x)$. Se tiene que

$$(-1)^i q_n(x_i) \leq |q_n(x_i)| < \frac{1}{2^{n-1}} = (-1)^i r(x_i),$$

de donde se sigue que

$$(-1)^i [r(x_i) - q(x_i)] > 0, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Entonces, el polinomio $r(x) - q(x)$ tiene al menos n raíces en el intervalo $(-1, 1)$. Pero por ser $r(x)$ y $q(x)$ mónicos, entonces $r(x) - q(x)$ tiene como mucho grado $n - 1$, con lo cual se llega a una contradicción. \square

Entonces, como $T_{n+1}(x)/2^n$ es un polinomio mónico, se sigue que tomando $q_{n+1}(x) = T_{n+1}(x)/2^n$ se alcanzará el valor mínimo de $\max_{x \in [-1,1]} |q_{n+1}(x)|$. Es decir, cogiendo los puntos x_0, \dots, x_n como los ceros del polinomio $T_{n+1}(x)$ podremos poner

$$\begin{aligned} |Err(x)| &\leq \frac{1}{(n+1)!} \max_{x \in [-1,1]} |f^{(n+1)}(x)| \max_{x \in [-1,1]} |q_{n+1}(x)| \\ &= \frac{1}{2^n (n+1)!} \max_{x \in [-1,1]} |f^{(n+1)}(x)|. \end{aligned}$$

Corolario 1.15.1 *Si $|f^{(n+1)}(x)| \leq M_{n+1}$ para $x \in [-1, 1]$ y además se tiene que $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{M_{n+1}}{2^n (n+1)!} = 0$, entonces la sucesión de polinomios $\{p_n(x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ que interpola*

a $f(x)$ en los puntos de Chebyshev convergerá uniformemente a la función $f(x)$ en $[-1, 1]$.

Demostración

Se sigue inmediatamente a partir de la fórmula de acotación del error que acabamos de ver. \square

1.16. Elección de los nodos de interpolación de manera óptima cuando $x \in [a, b]$.

¿Cómo podemos elegir los nodos de interpolación de manera óptima cuando $x \in [a, b]$?

Consideramos la transformación

$$t = 2 \frac{x - a}{b - a} - 1,$$

es decir,

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

Como consecuencia del teorema anterior podemos poner

$$\begin{aligned} \|\omega(x)\|_\infty &= \|(x - x_0) \dots (x - x_n)\|_\infty \\ &= \left\| \left(\frac{t(b - a)}{2} - \frac{t_0(b - a)}{2} \right) \dots \left(\frac{t(b - a)}{2} - \frac{t_n(b - a)}{2} \right) \right\|_\infty \\ &= \left(\frac{b - a}{2} \right)^{n+1} \|(t - t_0) \dots (t - t_n)\|_\infty \\ &= \left(\frac{b - a}{2} \right)^{n+1} \frac{1}{2^n} = 2 \left(\frac{b - a}{4} \right)^{n+1}. \end{aligned}$$

donde la penúltima igualdad se produce cuando los t_i son los ceros del polinomio de Chebyshev T_{n+1} , así que los puntos que hacen mínimo el término del error $\|\omega(x)\|_\infty$ cuando $x \in [a, b]$ son los dados por

$$x_i = \frac{b-a}{2} t_i + \frac{b+a}{2}, \quad i = 0, \dots, n,$$

donde

$$t_i = \cos\left(\frac{2i+1}{2n+2}\pi\right).$$

Ejemplo:

Obtenga una sucesión de polinomios interpolantes $p_n(x)$ de la función $f(x) = 1/(1+25x^2)$ sobre el intervalo $[-1, 1]$ considerando dos posibilidades:

1. nodos igualmente espaciados
2. como nodos los ceros de los polinomios de Chebyshev $T_n(x)$

1.17. Actividades complementarias.

- Si se tienen puntos $x_0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_n$, las diferencias divididas con repetición se pueden definir recursivamente mediante la fórmula

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \begin{cases} \frac{f[x_1, x_2, \dots, x_n] - f[x_0, x_1, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0} & \text{si } x_n \neq x_0 \\ \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} & \text{si } x_n = x_0. \end{cases}$$

Compruebe que utilizando estas diferencias divididas se generalizan los distintos polinomios de interpolación. Así, si todos los puntos son iguales, $x_0 = x_1 = \dots = x_n$, lo que se obtiene es el polinomio de Taylor. Si todos los puntos son distintos entre sí se obtiene el polinomio de Lagrange. Y si se tiene un número par de puntos, $n = 2m - 1$, y son iguales primero y segundo, tercero y cuarto, etcétera, $x_{2j} = x_{2j+1}$, $j = 0, \dots, m - 1$, entonces se obtiene el polinomio de Hermite.

- La interpolación para funciones de dos variables es un tema que aparece en ciertos problemas de Ingeniería. Suponga que se tiene un conjunto de puntos

del plano, $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$, diferentes entre sí, junto con valores c_i , $i = 1, \dots, n$. ¿Cómo puede determinarse una función $F(x, y)$ tal que $F(x_i, y_i) = c_i$ para $1 \leq i \leq n$?

- Si en el conjunto de puntos $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=0}^n$ se intercambian las coordenadas entonces estaremos considerando puntos de la gráfica de la función inversa de $f(x)$ (suponiendo que esta exista, o en todo caso lo que tendremos serán puntos de la gráfica simétrica de la de $f(x)$ respecto de la diagonal). Si se interpola en los puntos anteriores se habla de **interpolación inversa**. Estudie cómo puede utilizarse esta interpolación para aproximar una raíz de la ecuación $f(x) = 0$. Si se usa interpolación inversa en sólo dos puntos, estudie cómo se expresa la fórmula del error. Esta técnica puede usarse como un procedimiento para obtener una estimación inicial de la raíz, que luego se mejorará con otras técnicas, como por ejemplo el método de Newton. Aplique lo anterior para estimar una raíz del polinomio $x^3 + x^2 + x - 1$ en el intervalo $(0,5, 0,6)$.
- Dada una serie de puntos $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=0}^n$, hay diversas formas de hacer pasar una función por esos puntos: realizando diversos tipos de interpolaciones, considerando una interpolación a trozos, e incluso si se dispone de alguna información adicional sobre las derivadas en algunos puntos, una interpolación osculatoria. La cuestión que planteamos ahora es cómo llevar a cabo el proceso contrario, es decir, dada una función $f(x)$, ¿cómo podemos encontrar los puntos $\{x_i\}_{i=0}^n$ tal que una aproximación a trozos $S(x)$ de esa función sea satisfactoria? (en el sentido de que $\max_{x \in [x_0, x_n]} |f(x) - S(x)| \leq \epsilon$ para una tolerancia ϵ predeterminada).
- Al aumentar el grado del polinomio surgen grandes oscilaciones de manera que el polinomio interpolador no representa de manera realista la función de la que provienen los datos que dan lugar al polinomio. Este comportamiento imprevisto de la sucesión de polinomios de interpolación puede mostrarse considerando el clásico ejemplo debido a Runge, tomando la función $f(x) = 1/(1 + 25x^2)$ sobre el intervalo $[-1, 1]$.

Una manera de evitar este inconveniente consiste, como ya dijimos, en tomar los puntos de interpolación como las raíces de los polinomios de Chebyshev.

Otra idea para eliminar el problema puede consistir en descomponer el intervalo donde queremos realizar la aproximación en subintervalos donde llevaremos a cabo la aproximación por polinomios de grados más pequeño. Esta manera de proceder conlleva el que se hagan coincidir las aproximaciones en los extremos de los subintervalos para tener continuidad. Si se quiere que la aproximación sea suave hay que imponer condiciones sobre las derivadas. El procedimiento más utilizado para conseguir esto consiste en la interpolación cúbica por splines cúbicos. Estudie la forma en que se lleva a cabo esta aproximación.

1.18. Bibliografía.

Bibliografía básica.

- [Aubanell, A., Benseny, A. y Delshams, A. : 1993]: es una completa recopilación de métodos numéricos en general.
- [Burden, R. L. y Faires, J. D. : 1998]: el capítulo 3 presenta un desarrollo del tema adecuado, junto con algoritmos detallados.
- [Carnahan, B., Luther, H. A. and Wilkes, J. O. : 1979]: tratamiento acertado del tema con numerosos ejemplos y aplicaciones.
- [Chapra, S. C. y Canale, R. P. : 2003]: libro muy básico, dirigido más bien a las aplicaciones en ingeniería.
- [Gasca, M. : 1990]: un desarrollo completo del tema incluyendo un apartado sobre interpolación trigonométrica.
- [Gerald, C. F. and Wheatley, P. O. : 2000]: el capítulo 3 trata varios aspectos de la interpolación, incluyendo el uso de programas de cálculo simbólico como Matlab y MATHEMATICA.
- [Infante, J. A. y Rey, J. M. : 2002]: el capítulo 6 contiene variados problemas sobre el tema. A pesar de la referencia a Matlab en el título no se desarrolla ningún algoritmo en este entorno.

- [Phillips, G. M., Taylor, P. J. : 1996]: el capítulo 4 presenta un tratamiento adecuado del tema incluyendo el algoritmo de Neville. Ejemplos interesantes.
- [Ralston, A. and Rabinowitz, P. : 2001]: el capítulo 3 es una excelente introducción que contiene además notas bibliográficas.
- [Rodríguez, F. J. : 2003]: contiene numerosos ejemplos.
- [Sanchez, J. M. y Souto, A. : 2005]: el capítulo 3 presenta numerosos tópicos de la interpolación a través de ejercicios, con algoritmos programados en Matlab.
- [Sanz-Serna, J. M. : 1998]: presenta una introducción básica a la interpolación, pero muy bien estructurada, con ejemplos aclaratorios.
- [Scheid, F. : 1972]: un libro clásico que presenta los temas a través de problemas.
- [Scheid, F. y Constanzo, R. E.]: una versión del anterior con resúmenes didácticos.
- [Smith, W. A. : 1988]: el capítulo 7 presenta una introducción a la interpolación. Recomendable por la cantidad de variados ejercicios que incluye.
- [Süli, E. : 2006]: presenta un tratamiento riguroso pero asequible del tema, con ejemplos y demostraciones.

Bibliografía complementaria.

- [Davis, P. J. : 1975]: es un monográfico sobre interpolación y aproximación.
- [Demidovich, B. P., Maron I. A. : 1977]: el capítulo 14 recoge variadas fórmulas de interpolación, interpolación inversa, así como interpolación de funciones de dos variables.
- [Fox, L. and Parker, I. B. : 1968]: presenta un tratamiento exhaustivo de los polinomios de Chebyshev.
- [Kincaid, D. y Cheney, W. : 1994]: el capítulo 6 presenta la interpolación polinomial como parte de la teoría de la aproximación.

- [Mason, J. C. and Handscomb, D. C. : 2003]: un libro excelente sobre los polinomios de Chebyshev y sus aplicaciones.
- [Rivlin, T. : 1990]: un libro clásico sobre polinomios de Chebyshev.

Capítulo 2

Derivación numérica y extrapolación de Richardson.

2.1. Planteamiento y ejemplos introductorios.

Cuando se conoce la expresión de una función, obtener el valor de la derivada en un punto es algo que los programas de cálculo simbólico realizan sin dificultad. Pero si sólo se conocen los valores de la función en algunos puntos la necesidad de fórmulas numéricas para aproximar la derivada resulta evidente (o bien cuando la expresión de la función es muy compleja).

En el capítulo sobre la interpolación vimos varias formas de obtener polinomios que aproximaban una función dada por un conjunto discreto de valores. En tal situación, la estimación del valor de la derivada se puede obtener a partir de la derivada de la función polinómica que aproxima a la función $f(x)$. Se obtienen así las llamadas fórmulas de **derivación de tipo interpolatorio**. Sabemos que si $f(x)$ es un polinomio de grado $\leq n$ los valores de esta función en $n + 1$ puntos la determinan completamente, y entonces podemos calcular con exactitud el valor de $f'(x)$. Pero en la mayoría de las situaciones los datos de que se dispone no determinan completamente a la función, y la estimación de la derivada estará sujeta a errores.

Ejemplo:

Considere la aproximación de la derivada y el término de error correspondiente

a partir del desarrollo de Taylor

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(\xi).$$

Aplíquelo para calcular la derivada de $f(x) = \cos(x)$ en $x = \pi/4$.

Ejemplo:

Obtenga la aproximación a la derivada de $f(x) = \arctg(x)$ en $x = \sqrt{2}$ utilizando la fórmula del ejemplo anterior tomando valores de $h = 1/10^k$, $k = 6, \dots, 16$.

2.2. La derivación es un problema mal condicionado.

Sea $f(x)$ una función derivable en $x = 0$, y consideremos a función $f^*(x)$ dada por

$$f^*(x) = f(x) + 10^{-s} \operatorname{sen}(10^{k+s} x).$$

Se tiene que

$$\|f(x) - f^*(x)\|_{\infty} \leq 10^{-s}$$

pero

$$f^{*'}(x) = f'(x) + 10^k \cos(10^{k+s} x)$$

y por tanto es

$$f^{*'}(0) = f'(0) + 10^k.$$

Es decir, que podemos hacer que f^* esté tan cerca de f como queramos, y sin embargo las derivadas se alejan también tanto como queramos.

2.3. Derivación aproximada basada en el polinomio de interpolación.

El procedimiento más usual para obtener fórmulas de derivación numérica consiste en construir el polinomio de interpolación y tomar sus derivadas como aproximaciones de las derivadas de la función. Así, si consideramos la fórmula del polinomio de interpolación junto con la expresión del error podemos poner

$$f(x) = p_n(x) + Err(x) = \sum_{i=0}^n y_i L_i(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \omega(x), \quad (2.1)$$

y derivando, obtenemos

$$f'(x) = \sum_{i=0}^n y_i L_i'(x) + \frac{1}{(n+1)!} \left[f^{(n+1)}(\xi_x) \omega'(x) + \omega(x) \frac{d f^{(n+1)}(\xi_x)}{d x} \right].$$

En esta fórmula se presenta una dificultad insalvable puesto que no es posible evaluar el término diferencial que aparece al final, ya que ξ_x depende de x en una forma desconocida. Sin embargo, si el punto x es uno de los nodos, es decir $x = x_k$ para algún $k = 0, \dots, n$, entonces la fórmula queda

$$f'(x_k) = \sum_{i=0}^n y_i L_i'(x_k) + \frac{1}{(n+1)!} \left[f^{(n+1)}(\xi_x) \prod_{j=0, j \neq k}^n (x_k - x_j) \right]. \quad (2.2)$$

Definición 2.3.1 Una fórmula del tipo $\sum_{i=0}^n f(x_i) A_i(x)$ para aproximar la derivada de $f(x)$ se dice que es exacta si el error es cero.

Ejercicio:

Si una fórmula de aproximación de la derivada es exacta para las funciones $\phi_0(x), \dots, \phi_k(x)$ entonces también lo es para cualquier combinación lineal de ellas.

Demostración

Sea una combinación lineal de las funciones dadas,

$$\phi(x) = \sum_{j=0}^k \lambda_j \phi_j(x).$$

Debido a la linealidad de la derivada se tiene que siendo $\phi_j'(x) = \sum_{i=0}^n \phi_j(x_i) A_i(x)$, para $j = 0 \dots, k$, también se tiene que

$$\lambda_0 \phi_0'(x) + \dots + \lambda_k \phi_k'(x) = \sum_{i=0}^n (\lambda_0 \phi_0(x_i) + \dots + \lambda_k \phi_k(x_i)) A_i(x),$$

es decir,

$$\phi'(x) = \sum_{i=0}^n \phi(x_i) A_i(x)$$

con lo que la fórmula es exacta para la combinación lineal de las $\phi_j(x)$. \square

Ejercicio:

Una fórmula para aproximar la derivada de la forma $\sum_{j=0}^n f(x_j) A_j(x)$ es exacta para polinomios de grado $\leq n$ si y sólo si es de tipo interpolatorio.

Demostración

\Rightarrow) Por ser exacta para polinomios de grado $\leq n$ en particular lo es para los polinomios básicos de Lagrange, $L_i(x)$, y por tanto

$$L_i'(x) = \sum_{j=0}^n L_i(x_j) A_j(x).$$

Pero como $L_i(x_j) = \delta_{ij}$ resulta que $A_i(x) = L_i'(x)$ y la fórmula es de tipo interpolatorio.

\Leftarrow) Trivial, pues si $f(x)$ es un polinomio de grado $\leq n$ entonces su derivada de orden $n + 1$ es cero y el error es cero.

2.4. Fórmula de derivación interpolatoria para datos equiespaciados.

Cuando los nodos están equiespaciados con un tamaño de paso $h > 0$, vimos que el polinomio de interpolación se podía expresar en términos de las diferencias progresivas según la fórmula

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n \binom{s}{i} \Delta^i f(x_0), \quad (2.3)$$

y en este caso, el error de interpolación viene dado por

$$Errr(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} h^{n+1} s(s-1) \cdots (s-n), \quad (2.4)$$

siendo $s = (x - x_0)/h$.

Derivando formalmente la igualdad

$$f(x) = p_n(x) + Err(x),$$

con $p_n(x)$ como en (2.3) y $Err(x)$ como en (2.4), y evaluando en el punto $x = x_0$ (es decir, para $s = 0$) se obtiene que

$$f'(x_0) = \frac{1}{h} \sum_{j=1}^n \frac{(-1)^{j-1}}{j} \Delta^j f(x_0) + \frac{(-h)^n}{n+1} f^{(n+1)}(\xi_x). \quad (2.5)$$

También a partir de la fórmula en (2.2) se puede obtener una fórmula como la anterior, pues poniendo $x_k = x_0 + k h$ se tiene que la fórmula en (2.2) queda:

$$f'(x_k) = \sum_{i=0}^n y_i L'_i(x_k) + \frac{1}{(n+1)!} \left[f^{(n+1)}(\xi_x) h^n \prod_{j=0, j \neq k}^n (k-j) \right], \quad (2.6)$$

y en particular, para $k = 0$ obtenemos de nuevo una fórmula donde el error es el mismo que en (2.5).

2.5. Método de coeficientes indeterminados para obtener fórmulas de derivación.

Supongamos que tenemos los valores de una función correspondientes a puntos de la forma $x - h, x, x + 3h$. A partir de estos valores, ¿cómo podemos aproximar la derivada de la función?

Podemos considerar una fórmula del tipo

$$f'(x) = A f(x - h) + B f(x) + C f(x + 3h) + Err$$

y determinar las constantes A, B, C para que la fórmula sea exacta para ciertas funciones, por ejemplo, $1, x, x^2$.

Se obtiene así un sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas, y después de resolver el sistema resulta $A = -9/(12h), B = 8/(12h), C = 1/(12h)$, y la fórmula queda

$$f'(x) = \frac{-9}{12h} f(x-h) + \frac{8}{12h} f(x) + \frac{1}{12h} f(x+3h) + Err.$$

La expresión del error se puede obtener desarrollando por Taylor hasta el orden 3, y suponiendo que $f'''(x)$ es continua, resulta

$$Err = -\frac{h^2}{2} f'''(\theta).$$

NOTA: este procedimiento puede utilizarse con otro tipo de fórmulas, por ejemplo para obtener una aproximación de la derivada segunda de la forma

$$\begin{aligned} f''(x) = & A f(x-2h) + B f(x-h) + C f(x) + D f(x+h) \\ & + E f(x+2h) + Err. \end{aligned}$$

NOTA: también se puede imponer que las funciones sobre las que sea exacta la fórmula sean de un tipo especial, y en tal caso obtendremos fórmulas de derivación adaptadas.

2.6. Deducción de fórmulas de derivación a partir del desarrollo de Taylor.

Una manera muy sencilla de estimar la derivada de una función se obtiene a partir de la definición de derivada tomando la aproximación

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

pues sabemos que en el proceso de paso al límite cuando $h \rightarrow 0$ es cuando se da la igualdad. La estimación del error en esta fórmula se determina a partir del desarrollo de Taylor de $f(x+h)$ hasta orden uno en torno al punto x , pues reordenando la fórmula podemos poner

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

con ξ_x como es habitual un punto intermedio entre x y $x+h$. El término de error nos indica cómo han de ser las funciones en las que se puede estimar el error de la

fórmula, a saber, han de tener derivada segunda, y el hecho de que vaya multiplicado por h nos dice que si esa derivada segunda está acotada entonces el error tenderá a disminuir cuando $h \rightarrow 0$.

Si en lugar de tomar el desarrollo de Taylor anterior se consideran los desarrollos hasta orden dos en torno a x de $f(x+h)$ y de $f(x-h)$, restando ambas fórmulas resulta

$$f(x+h) - f(x-h) = 2h f'(x) + \frac{h^3}{3!} (f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)), \quad (2.7)$$

y si se supone que $f'''(x)$ es continua se puede poner

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi_x), \quad (2.8)$$

obteniendo así una fórmula para aproximar la primera derivada con un error de la forma $\mathcal{O}(h^2)$.

2.7. Inestabilidad de la diferenciación numérica.

Un aspecto muy importante en la diferenciación numérica es el efecto de los errores de redondeo en la aproximación. Si consideramos la fórmula para la aproximación de la primera derivada que aparece en (2.8) y suponemos que al calcular los valores de $f(x+h)$ y de $f(x-h)$ se cometen errores entonces tendremos

$$f(x+h) = \bar{f}(x+h) + e(h), \quad f(x-h) = \bar{f}(x-h) + e(-h).$$

Es decir, las $\bar{f}(\cdot)$ se refieren a los valores realmente calculados, y las $e(\cdot)$ a los errores de redondeo cometidos. Entonces el error de la aproximación en (2.8) se puede expresar en la forma

$$\begin{aligned}
f'(x) - \frac{\bar{f}(x+h) - \bar{f}(x-h)}{2h} & \tag{2.9} \\
= f'(x) - \frac{f(x+h) - e(h) - (f(x-h) - e(-h))}{2h} \\
= f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \frac{e(h) - e(-h)}{2h} \\
= -\frac{h^2}{3!} f'''(\xi_x) + \frac{e(h) - e(-h)}{2h},
\end{aligned}$$

y suponiendo que los valores absolutos de los errores de redondeo están acotados por algún $\epsilon > 0$, y que el valor absoluto de la derivada tercera lo está por una cota M , tendremos

$$\left| f'(x) - \frac{\bar{f}(x+h) - \bar{f}(x-h)}{2h} \right| \leq \frac{h^2}{3!} M + \frac{\epsilon}{h}.$$

Observamos que para reducir el error de truncamiento debemos disminuir el tamaño del paso h , pero en tal caso, como en la acotación anterior estamos dividiendo por h en el segundo sumando, tendremos que a partir de cierto valor de h el error final en la aproximación crecerá. Aunque el error de truncamiento en las fórmulas de derivación de tipo interpolatorio es proporcional al tamaño de paso, no sucede que la fórmula sea más precisa a medida que el paso tiende a cero. Ello es debido a la cancelación por sustracción de los términos próximos que aparecen en la fórmula de derivación. Cambios arbitrariamente pequeños en los valores que toma la función pueden ocasionar cambios arbitrariamente grandes en el valor de la derivada en un punto determinado. Se dice que el problema de evaluar la derivada en un punto es un problema mal condicionado (*ill-conditioned* en inglés). Este mal comportamiento de la operación de derivar se traslada a las fórmulas de derivación numérica y por tanto hay que proceder con cautela cuando se emplean tales fórmulas.

2.8. Aproximación de derivadas de orden superior.

También puede utilizarse el procedimiento del desarrollo de Taylor para obtener derivadas de orden superior. Por ejemplo, considerando los desarrollos de Taylor de $f(x+h)$ y de $f(x-h)$ en torno a x , pero ahora hasta el tercer orden, si suponemos que la derivada $f^{(4)}(x)$ es continua, al sumar se eliminan los términos con potencias impares de h y resulta la fórmula

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi_x), \quad (2.10)$$

con $\xi_x \in (x-h, x+h)$.

En el caso de las fórmulas para las derivadas de orden superior, además de la fórmula de Taylor señalada anteriormente, cuando se consideran datos equiespaciados, la utilización de operadores simbólicos puede facilitar la obtención de tales fórmulas. Así, si consideramos los operadores

$$\begin{aligned} \Delta f(x_i) &= f(x_i+h) - f(x_i), \\ Ef(x_i) &= f(x_i+h), \\ Df(x_i) &= \frac{df}{dx}(x_i). \end{aligned}$$

y las relaciones entre ellos

$$E = Id + \Delta, \quad D = \frac{1}{h} \text{Ln}(E),$$

procediendo formalmente se obtiene

$$\begin{aligned} Df(x_i) &= \frac{1}{h} \text{Ln}(E)(f(x_i)) = \frac{1}{h} \text{Ln}(Id + \Delta)(f(x_i)) \\ &= \frac{1}{h} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \Delta^k f(x_i) \\ &= \frac{1}{h} \left(\Delta f(x_i) - \frac{1}{2} \Delta^2 f(x_i) + \frac{1}{3} \Delta^3 f(x_i) - \dots \right), \end{aligned}$$

fórmula que permite obtener aproximaciones para la primera derivada.

En el caso de derivadas de orden superior, procediendo de manera parecida se llega a la fórmula

$$D^n f(x_i) = \frac{1}{h^n} [Ln(Id + \Delta)]^n f(x_i),$$

y haciendo el desarrollo en serie del operador $Ln(Id + \Delta)$ se obtienen según los valores de n las distintas fórmulas para aproximar las derivadas.

Ejemplo:

Desarrollando el operador $Ln(Id + \Delta)$ en serie de MacLaurin se obtiene

$$n = 2: \quad f''(x_i) = \frac{1}{h^2} \left(\Delta^2 f(x_i) - \Delta^3 f(x_i) + \frac{11}{12} \Delta^4 f(x_i) - \dots \right)$$

$$n = 3: \quad f'''(x_i) = \frac{1}{h^3} \left(\Delta^3 f(x_i) - \frac{3}{2} \Delta^4 f(x_i) + \frac{7}{4} \Delta^5 f(x_i) - \dots \right)$$

2.9. Extrapolación de Richardson.

Mostraremos cómo puede usarse el procedimiento conocido como **extrapolación de Richardson** para obtener más exactitud en algunas fórmulas de derivación numérica. Este procedimiento se aplica para mejorar las estimaciones de las derivadas cuando se parte de una tabla de valores uniformemente espaciados. Pero es una técnica mucho más general que aparecerá más adelante en los capítulos de integración numérica o de resolución numérica de ecuaciones diferenciales. Se puede utilizar siempre que se sepa que una determinada aproximación tiene un término de error que depende del paso en la forma

$$M = N_1(h) + K_1 h^{\alpha_1} + \dots + K_m h^{\alpha_m} + \mathcal{O}(h^{\alpha_m+1}) \quad (2.11)$$

siendo $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_m$, y donde M es el valor exacto que queremos calcular, $N_1(h)$ es la aproximación que se obtiene, y $\sum_{i=1}^m K_i h^{\alpha_i} + \mathcal{O}(h^{\alpha_m+1})$ el término de error.

Si sustituimos h por $h/2$ en (2.11) se obtiene

$$M = N_1 \left(\frac{h}{2} \right) + K_1 \left(\frac{h}{2} \right)^{\alpha_1} + \dots + K_m \left(\frac{h}{2} \right)^{\alpha_m} + \mathcal{O}(h^{\alpha_{m+1}})$$

y a partir de las dos fórmulas anteriores resulta

$$\begin{aligned} M &= N_1 \left(\frac{h}{2} \right) + \frac{N_1 \left(\frac{h}{2} \right) - N_1(h)}{2^{\alpha_1} - 1} + \mathcal{O}(h^{\alpha_2}) \\ &= N_2(h) + \bar{K}_2 h^{\alpha_2} + \dots + \bar{K}_m h^{\alpha_m} + \mathcal{O}(h^{\alpha_{m+1}}), \end{aligned} \quad (2.12)$$

es decir, se obtiene una aproximación para M dada por

$$N_2(h) = N_1 \left(\frac{h}{2} \right) + \frac{N_1 \left(\frac{h}{2} \right) - N_1(h)}{2^{\alpha_1} - 1},$$

con un error al menos un orden mayor. Si se repite el proceso con la nueva fórmula se obtiene otra fórmula de la forma $M = N_3(h) + \mathcal{O}(h^{\alpha_3})$, siendo

$$N_3(h) = N_2 \left(\frac{h}{2} \right) + \frac{N_2 \left(\frac{h}{2} \right) - N_2(h)}{2^{\alpha_2} - 1}.$$

Procediendo de esta forma se obtienen sucesivas aproximaciones donde cada $N_i(h)$ teóricamente proporciona una mejor aproximación que la anterior $N_{i-1}(h)$ (en la práctica el procedimiento no produce una sucesión convergente a la solución pues a partir de cierto valor j los errores en los cálculos predominan y hacen que $N_{j+1}(h)$ sea menos exacto que $N_j(h)$). En realidad, se puede tomar como nuevo paso en lugar de $h/2$, un múltiplo de h , es decir, λh , y se obtienen nuevas aproximaciones, pero con $\lambda = 1/2$ se obtiene una forma más tratable computacionalmente. En el capítulo de integración numérica el algoritmo que resulta se conoce como método de extrapolación de Romberg, y resulta de una gran eficacia.

Ejemplo:

A partir de los desarrollos de Taylor dados por

$$\begin{aligned} f(x+h) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(x) \\ f(x-h) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-h)^k}{k!} f^{(k)}(x) \end{aligned}$$

se obtiene la fórmula

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{3!} f'''(x) - \frac{h^4}{5!} f^{(5)}(x) - \dots$$

Llamando

$$N_1(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

según lo anterior tendremos una nueva aproximación de la derivada dada por

$$N_2(h) = N_1\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{N_1\left(\frac{h}{2}\right) - N_1(h)}{2^2 - 1} + \mathcal{O}(h^4).$$

Y procediendo nuevamente, una nueva aproximación de la forma

$$N_3(h) = N_2\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{N_2\left(\frac{h}{2}\right) - N_2(h)}{2^4 - 1} + \mathcal{O}(h^6),$$

y así sucesivamente.

Aplíquese el procedimiento anterior para hallar $f'(\sqrt{2})$, siendo $f(x) = \arctg(x)$.

Ejercicio:

En el procedimiento de Richardson, fórmese la aproximación dada por $N_2(h)$ a partir de $N_1(h)$ y de $N_1\left(\frac{h}{2^{1/\alpha_1}}\right)$, la aproximación dada por $N_3(h)$ a partir de $N_2(h)$ y de $N_2\left(\frac{h}{2^{1/\alpha_2}}\right)$, y así sucesivamente. ¿Se obtiene alguna ventaja al tomar estos valores?.

El procedimiento de extrapolación de Richardson se suele representar en forma de tabla triangular. Si llamamos

$$D(n, 0) = N_1\left(\frac{h}{2^n}\right), \quad n = 0, 1, \dots$$

se forma la tabla de aproximaciones dada por

$$\begin{array}{cccc}
D(0,0) & & & \\
D(1,0) & D(1,1) & & \\
D(2,0) & D(2,1) & D(2,2) & \\
D(3,0) & D(3,1) & D(3,2) & D(3,3) \quad \dots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots
\end{array}$$

siendo

$$D(j, k) = D(j, k-1) + \frac{D(j, k-1) - D(j-1, k-1)}{2^{\alpha_k} - 1},$$

para $k = 1, \dots, n$, $j = k, \dots, n$. La medida del error de esas aproximaciones viene dada por la proposición siguiente:

Proposición 2.9.1 *Los términos $D(n, k)$ del algoritmo de extrapolación de Richardson verifican*

$$D(n, k-1) = M + \sum_{j=k}^m A_{jk} \left(\frac{h}{2^n}\right)^{\alpha_j} + \mathcal{O}(h^{\alpha_m+1}).$$

Demostración

Se procede por inducción sobre k :

Si $k = 1$ a partir de la fórmula en (2.11) se tiene que

$$D(n, 0) = N_1 \left(\frac{h}{2^n}\right) = M - K_1 \left(\frac{h}{2^n}\right)^{\alpha_1} - \dots - K_m \left(\frac{h}{2^n}\right)^{\alpha_m} + \mathcal{O}(h^{\alpha_m+1}).$$

Suponemos cierto el enunciado hasta $k-1$. Entonces, tenemos

$$\begin{aligned}
D(n, k) &= \frac{2^{\alpha_k}}{2^{\alpha_k} - 1} D(n, k - 1) - \frac{1}{2^{\alpha_k} - 1} D(n - 1, k - 1) \\
&= \frac{2^{\alpha_k}}{2^{\alpha_k} - 1} \left[M + \sum_{j=k}^m A_{j k} \left(\frac{h}{2^n} \right)^{\alpha_j} + \mathcal{O}(h^{\alpha_{m+1}}) \right] \\
&\quad - \frac{1}{2^{\alpha_k} - 1} \left[M + \sum_{j=k}^m A_{j k} \left(\frac{h}{2^{n-1}} \right)^{\alpha_j} + \mathcal{O}(h^{\alpha_{m+1}}) \right] \\
&= M + \sum_{j=k}^m A_{j k} \left(\frac{h}{2^n} \right)^{\alpha_j} \frac{2^{\alpha_k} - 2^{\alpha_j}}{2^{\alpha_k} - 1} + \mathcal{O}(h^{\alpha_{m+1}}) \\
&= M + \sum_{j=k+1}^m A_{j k+1} \left(\frac{h}{2^n} \right)^{\alpha_j} + \mathcal{O}(h^{\alpha_{m+1}})
\end{aligned}$$

siendo

$$A_{j k+1} = \frac{2^{\alpha_k} - 2^{\alpha_j}}{2^{\alpha_k} - 1} A_{j k}. \quad \square$$

2.10. Actividades complementarias.

- La aproximación de la derivada de una función se puede expresar utilizando el operador de diferencias progresivas, obteniéndose la fórmula

$$f'(x_i) \simeq \frac{1}{h} \left[\Delta f(x_i) - \frac{1}{2} \Delta^2 f(x_i) + \dots + (-1)^n \frac{1}{n} \Delta^n f(x_i) \right],$$

donde se observa que la derivada en el punto x_i viene expresada en términos de los valores de la función en los puntos $\{x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+n}\}$.

Halle una fórmula que permita expresar la derivada $f'(x_i)$ en términos de las diferencias regresivas, en la forma

$$f'(x_i) \simeq \frac{1}{h} \sum_{k=1}^n c_k \nabla^k f(x_n),$$

con lo que desarrollando, se tendrá expresada la derivada en el punto x_i en términos de los valores de la función en los puntos $\{x_{i-n}, x_{i-n+1}, \dots, x_i\}$.

A partir de las dos fórmulas anteriores, ¿se podrá obtener una aproximación mejorada de la derivada $f'(x_i)$?

- Utilizando el método de coeficientes indeterminados determine fórmulas para aproximar las derivadas primera y segunda de $f(x)$ en el punto x_0 cuando se dispone de una tabla de datos igualmente espaciados de la forma

$$\{\dots, x_0 - k_2 h, x_0 - k_1 h, x_0, x_0 + k_1 h, x_0 + k_2 h, \dots\},$$

siendo los $k_i \in \mathbb{N}$ tales que $k_1 < k_2 < \dots$

2.11. Actividades complementarias.

- En el capítulo anterior vimos que la mejor elección de $n+1$ nodos x_0, x_1, \dots, x_n para minimizar el error de interpolación, correspondía a los ceros del polinomio de Chebyshev $T_{n+1}(x)$. Si llamamos $\{\xi_j\}_{j=0}^n$ a los ceros de $T_{n+1}(x)$, pruebe que cuando n es par $\xi_{n/2} = 0$. Entonces, como los ceros del polinomio de Chebyshev, están simétricamente distribuidos con respecto al origen, podemos considerar fórmulas para aproximar la derivada $f'(x)$ que tengan la forma

$$f'(x) \simeq \frac{1}{h} \sum_{j=0}^n b_k f(x + \xi_j h).$$

Estudie este tipo de fórmulas y obtenga una estimación del error de la aproximación. Aplíquela a ejemplos concretos y compárelas con otras fórmulas que se hayan visto para aproximar la derivada.

- Cuando se dispone de información sobre el comportamiento de una función puede tenerse en cuenta esto para obtener fórmulas de diferenciación adaptadas. Por ejemplo si se sabe que cierta función $f(x)$ tiene un comportamiento oscilatorio de carácter sinusoidal podría estimarse su derivada por medio de una fórmula del tipo

$$f'(x) \simeq A f(x + h) + B f(x - h),$$

e imponiendo que la fórmula sea exacta para $f(x) = \sin(\omega x)$ y $f(x) = \cos(\omega x)$ obtener los coeficientes A y B que previsiblemente nos permitirán obtener una mejor aproximación de la derivada.

Desarrolle lo anterior y aplíquelo para obtener aproximaciones de derivadas de funciones en casos concretos. Considere otras fórmulas de este tipo.

2.12. Bibliografía.

Bibliografía básica.

- [Burden, R. L. y Faires, J. D. : 1998]: el capítulo 4 presenta un desarrollo del tema adecuado, junto con la extrapolación de Richardson.
- [Chapra, S. C. y Canale, R. P. : 2003]: en el capítulo 23 se ocupa de una manera muy básica del tema. Con referencias a paquetes de cálculo simbólico.
- [Gerald, C. F. and Wheatley, P. O. : 2000]: el capítulo 5 trata del tema, con ejemplos del uso de Matlab y MATHEMATICA.
- [Infante, J. A. y Rey, J. M. : 2002]: el capítulo 7 contiene diversos problemas sobre el tema.
- [Kincaid, D. y Cheney, W. : 1994]: el capítulo 7 presenta una breve introducción.
- [Phillips, G. M., Taylor, P. J. : 1996]: el capítulo 7 se aborda la cuestión de manera no muy exhaustiva.
- [Rodríguez, F. J. : 2003]: contiene numerosos ejemplos.
- [Sanchez, J. M. y Souto, A. : 2005]: tratamiento básico del tema, incluyendo algún ejemplo de discretización de derivadas parciales.
- [Sanz-Serna, J. M. : 1998]: presenta una introducción básica a la derivación numérica muy bien estructurada y con ejemplos explicativos.

- [Scheid, F. : 1972]: un libro clásico que presenta los temas a través de problemas.
- [Scheid, F. y Constanzo, R. E.]: una versión del anterior con resúmenes didácticos. Numerosas fórmulas.
- [Smith, W. A. : 1988]: dedica el capítulo 9 a este tema. Incluye variados ejercicios.

Bibliografía complementaria.

- [Demidovich, B. P., Maron I. A. : 1977]: el capítulo 15 recoge variadas fórmulas de derivación numérica, así como el cálculo aproximado de derivadas parciales.
- [Stoer, J. and Bulirsh, R. : 1980]: la sección 3.5 presenta un desarrollo completo de la extrapolación.
- [Ralston, A. and Rabinowitz, P. : 2001]: el capítulo 4 se ocupa del tema, con numerosas referencias bibliográficas.

Capítulo 3

Integración numérica: fórmulas de Newton-Cotes.

3.1. Planteamiento del problema de integración numérica.

Dada una función $f(x)$ en un intervalo $[a, b]$, el problema de la integración numérica, consiste en calcular aproximadamente el valor de

$$I = \int_a^b f(x) dx .$$

Este problema es equivalente a encontrar el valor $y(b)$ al resolver el problema de valor inicial

$$\begin{cases} y'(x) = f(x) \\ y(a) = 0 \end{cases}$$

de manera, que cuando se traten los temas sobre resolución numérica de problemas de valores iniciales encontraremos también otros métodos para aproximar la integral.

Cuando no se puede determinar la primitiva de una función, o cuando sólo tenemos un conjunto discreto de datos de la función, no es posible la utilización de la regla de Barrow para calcular la integral. En tales casos utilizaremos fórmulas aproximadas de integración o **fórmulas de cuadratura**.

Consideraremos dos tipos de fórmulas, las cuales tienen la misma estructura: se trata de una suma de valores de la función en ciertos puntos (**nodos** de integración) multiplicados por ciertos coeficientes (**pesos**). La integral se aproximará por fórmulas de la forma

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \sum_{i=0}^n w_i f(x_i), \quad (3.1)$$

las cuales se obtienen a partir de dos estrategias muy distintas:

1. considerando la aproximación de la integral de la función $f(x)$ por la integral del polinomio de interpolación en ciertos puntos del intervalo. Se habla en este caso de **fórmulas de integración de tipo interpolatorio**.

En particular, cuando se toman nodos igualmente espaciados $a = x_0 < \dots < x_n = b$, siendo $h = x_i - x_{i-1} = (b - a)/n$, $i = 1, \dots, n$, se obtienen las **fórmulas de Newton-Cotes**.

2. determinando los nodos y los pesos para que la fórmula resultante tenga la mayor precisión posible. En este caso se habla de **fórmulas de integración de Gauss**.

Ejemplo:

La suma inferior de Riemann constituye una fórmula de cuadratura:

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) + Err,$$

siendo $h = (b - a)/n$, $x_i = a + i h$, $i = 0, 1, \dots, n - 1$.

Ejemplo:

La regla del punto medio también es una fórmula de cuadratura:

$$\int_a^b f(x) dx = (b - a) f\left(\frac{a + b}{2}\right) + Err,$$

Definición 3.1.1 *El error de una fórmula de cuadratura se define como*

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

3.2. Fórmulas de integración numérica de tipo interpolatorio.

Si integramos en un intervalo $[a, b]$ la fórmula

$$f(x) = p_n(x) + Err(x),$$

que relaciona una función, su polinomio de interpolación en $n + 1$ puntos y el error, resulta

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i) + \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b \prod_{i=0}^n (x - x_i) f^{(n+1)}(\xi_x) dx, \quad (3.2)$$

donde los coeficientes a_i están dados por

$$a_i = \int_a^b L_i(x) dx, \quad i = 0, 1, \dots, n. \quad (3.3)$$

Las fórmulas de cuadratura de la forma dada en (3.2) se llaman de **tipo interpolatorio**.

En particular, si se toma $x_0 = a$, $x_n = b$, y los nodos equiespaciados, $x_i - x_{i-1} = h = (b - a)/n$, la transformación $x = x_0 + th$ permite poner

$$a_i = \int_a^b \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx = h \int_0^n \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{t - j}{i - j} dt = h \alpha_i, \quad (3.4)$$

donde los coeficientes α_i son independientes del intervalo de integración (sólo dependen del número de puntos elegidos, así que puede formarse una tabla para distintos valores de n la cual servirá para todas las ocasiones). La fórmula de cuadratura en este caso se expresa en la forma

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) + h^{n+2} \int_0^n \binom{t}{n+1} f^{(n+1)}(\xi_t) dt.$$

Tomando los extremos de integración $a = x_0$, $b = x_n$ en (3.2), para distintos valores de n se obtienen fórmulas particulares, como la conocida **Regla del Trapecio** o las **fórmulas de Simpson**. En general, se obtienen las llamadas **fórmulas cerradas de Newton-Cotes**.

Ejercicio:

Pruebe que los pesos de las fórmulas interpolatorias verifican

$$\sum_{i=0}^n a_i = b - a, \quad \sum_{i=0}^n \alpha_i = n.$$

[Solución: basta tomar $f(x) = 1$ en la fórmula (3.2), y para el otro sumatorio tener en cuenta la relación en (3.4)].

Ejercicio:

Para $n = 2$ halle los coeficientes α_i de la correspondiente fórmula de cuadratura interpolatoria.

[Solución: se obtiene la regla de Simpson de $1/3$].

Ejercicio:

Pruebe que en las fórmulas interpolatorias con nodos igualmente espaciados los pesos dados por (3.3) son simétricos, es decir,

$$a_k = a_{n-k}, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

[Solución: hay que expresar los polinomios básicos de Lagrange en a_k y a_{n-k} explícitamente y hacer el cambio de variable $x = x_0 + th$ en las integrales. Un segundo cambio de variable, $n-t = z$, en la integral correspondiente a a_{n-k} conduce directamente a la igualdad].

3.3. Fórmulas cerradas de Newton-Cotes.

Teorema 3.3.1 *Tomando en la fórmula (3.2) los valores $a = x_0$, $b = x_n$, $h = (b - a)/n$, y puntos $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, 1, \dots, n$, se tiene que existe un $\xi \in (a, b)$ tal que*

1. si n es par y $f \in \mathcal{C}^{n+2}[a, b]$, entonces

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i) + h^{n+3} \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_0^n t(t-1) \dots (t-n-1) dt.$$

2. si n es impar y $f \in \mathcal{C}^{n+1}[a, b]$, entonces

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i) + h^{n+2} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_0^n t(t-1)\dots(t-n) dt.$$

Demostración

Lo demostraremos detalladamente para la fórmula de Simpson de 1/3, es decir, cuando $n = 2$. Los otros casos con n par son análogos, y en el caso impar se procede a partir de la fórmula de interpolación.

Con las notaciones del enunciado hemos de hallar la $\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx$. Consideramos un punto auxiliar $x_3 = x_0 + 3h$. Formamos el polinomio interpolador de f en los nodos x_0, x_1, x_2, x_3 y podemos poner

$$\begin{aligned} f(x) &= c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)(x - x_1) \\ &\quad + c_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\ &\quad + \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3). \end{aligned}$$

Si llamamos $p_2(x)$ al polinomio de interpolación de f en los nodos x_0, x_1, x_2 , la fórmula anterior se escribe

$$\begin{aligned} f(x) &= p_2(x) + c_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\ &\quad + \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) \end{aligned}$$

y por tanto integrando y haciendo el cambio de variable $x = x_0 + th$ con $h = (x_2 - x_0)/2$ resulta

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx &= \sum_{i=0}^2 a_i f(x_i) + c_3 \int_0^2 th(t-1)h(t-2)hh dt \\ &\quad + \int_0^2 \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} th(t-1)h(t-2)h(t-3)hh dt. \end{aligned}$$

La primera integral se anula (y así ocurre siempre que n sea par con el término $c_{n+1} \int_0^n t(t-1)\cdots(t-n) dt$), y la segunda se puede expresar en la forma

$$h^5 \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} \int_0^2 t(t-1)(t-2)(t-3) dt = -\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi).$$

Tras calcular los coeficientes a_i la fórmula queda

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi). \quad \square$$

3.4. Ejemplos de fórmulas cerradas.

$$I = \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx, \quad h = \frac{b-a}{n}$$

$n = 1$: FORMULA DEL TRAPECIO

$$I = \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] - \frac{1}{12} h^3 f''(\xi)$$

$n = 2$: FORMULA DE SIMPSON DE 1/3

$$I = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi)$$

$n = 3$: FORMULA DE SIMPSON DE 3/8 (O DE NEWTON)

$$I = \frac{3h}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] - \frac{3}{80} h^5 f^{(4)}(\xi)$$

$n = 4$: FORMULA DE BOOLE

$$I = \frac{2h}{45} [7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)] - \frac{8}{945} h^7 f^{(6)}(\xi)$$

3.5. Formulas abiertas de Newton-Cotes.

Existen también las llamadas **fórmulas abiertas de Newton-Cotes**. En ellas se integra en un intervalo más amplio que el intervalo donde se lleva a cabo la aproximación de la función por el polinomio interpolador. Se considera como antes, el intervalo $[a, b]$ y los nodos $x_i = x_0 + i h, i = 0, \dots, n$, pero ahora se toma $h = (b - a)/(n + 2)$, con lo cual es $x_0 = a + h$ y por tanto $x_n = b - h$. El resultado se recoge en el siguiente teorema.

Teorema 3.5.1 *Tomando los nodos $x_i = x_0 + i h, i = 0, \dots, n$ en la fórmula (3.2) con $h = (b - a)/(n + 2)$ y $x_0 = a + h$, se tiene que existe un $\xi \in (a, b)$ tal que*

1. *si n es par y $f \in \mathcal{C}^{n+2}[a, b]$, entonces*

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i) + h^{n+3} \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_{-1}^{n+1} t(t-1) \dots (t-n-1) dt.$$

2. *si n es impar y $f \in \mathcal{C}^{n+1}[a, b]$, entonces*

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i) + h^{n+2} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_{-1}^{n+1} t(t-1) \dots (t-n) dt.$$

Demostración

Se procede de forma similar a como se ha hecho para las fórmulas cerradas, teniendo en cuenta que cuando sea n par hay que considerar el punto auxiliar $x_{n+1} = b$ y el polinomio de interpolación de f en los nodos x_0, \dots, x_n, x_{n+1} . \square

Ejercicio:

Verifique que si n es par se tiene que

$$\int_{-1}^{n+1} t(t-1) \dots (t-n) dt = 0.$$

3.6. Ejemplos de fórmulas abiertas.

$$I = \int_a^b f(x) dx, \quad h = \frac{b-a}{n+2}$$

$n = 1$: FORMULA DEL TRAPECIO ABIERTA

$$I = \frac{3h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] + \frac{3}{4} h^3 f''(\xi)$$

$n = 2$: FORMULA DE MILNE

$$I = \frac{4h}{3} [2f(x_0) - f(x_1) + 2f(x_2)] + \frac{14}{45} h^5 f^{(4)}(\xi)$$

$n = 3$: FORMULA de 4 PUNTOS

$$I = \frac{5h}{24} [11f(x_0) + f(x_1) + f(x_2) + 11f(x_3)] + \frac{95}{144} h^5 f^{(4)}(\xi)$$

$n = 4$: FORMULA de 5 PUNTOS

$$I = \frac{3h}{10} [11f(x_0) - 14f(x_1) + 26f(x_2) - 14f(x_3) + 11f(x_4)] \\ + \frac{41}{140} h^7 f^{(6)}(\xi)$$

3.7. Grado de precisión. Error en las fórmulas de tipo interpolatorio.

Definición 3.7.1 *Se dice que una fórmula de cuadratura de la forma (3.1) tiene grado de precisión n si este es el mayor número natural tal que la fórmula es exacta para $1, x, \dots, x^n$.*

Según esta definición cualquier fórmula interpolatoria de la forma en (3.2) tiene al menos grado de precisión n . Pero a la vista de los teoremas anteriores sobre las fórmulas abiertas y cerradas de Newton-Cotes se sigue que

- las fórmulas de Newton-Cotes con n par tienen grado de precisión $n + 1$
- las fórmulas de Newton-Cotes con n impar tienen grado de precisión n

Observación:

Las fórmulas cerradas de Simpson de $1/3$ y de $3/8$ tienen respectivamente términos de error dados por

$$E_{S,1/3} = -\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi_1), \quad E_{S,3/8} = -\frac{3}{80} h^5 f^{(4)}(\xi_2).$$

A primera vista el primero es menor que el segundo. Pero si se aplican las dos fórmulas para integrar en un mismo intervalo $[a, b]$, las longitudes de los tamaños de paso en cada fórmula son distintas y al expresar los errores en términos de la longitud del intervalo se tiene que

$$E_{S,1/3} = -\frac{1}{90} \left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(4)}(\xi_1) = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi_1),$$

$$E_{S,3/8} = -\frac{3}{80} \left(\frac{b-a}{3}\right)^5 f^{(4)}(\xi_2) = -\frac{(b-a)^5}{6480} f^{(4)}(\xi_2),$$

así que si suponemos que $f^{(4)}(\xi_1)$ y $f^{(4)}(\xi_2)$ son parecidos, la segunda fórmula proporcionará un error menor (a cambio es más costosa computacionalmente ya que se necesita una evaluación más de la función).

3.8. Método de coeficientes indeterminados para la obtención de Fórmulas de cuadratura.

Naturalmente, cuando los nodos no son equidistantes también se pueden obtener fórmulas de cuadratura de tipo interpolatorio, lo que ocurre es que el cálculo de los coeficientes se complica notablemente. Un procedimiento alternativo en este caso lo constituye un método de coeficientes indeterminados. Elegidos los nodos $x_i, i = 0, 1, \dots, n$ distintos y sin que necesariamente sean equiespaciados, se impone que la fórmula

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

sea exacta para polinomios de grado $\leq n$; se obtiene así un sistema lineal de ecuaciones donde las incógnitas son los coeficientes c_i :

$$\frac{b^{k+1} - a^{k+1}}{k+1} = \sum_{i=0}^n c_i x_i^k, \quad k = 0, \dots, n,$$

cuya matriz de coeficientes es una matriz de Vandermonde, y por tanto el sistema tiene solución única.

Ejemplo:

Obtenga los coeficientes de la fórmula de integración

$$\int_0^h f(x) dx = h [A f(-h) + B f(0) + C f(h)] + Err$$

de manera que tenga el mayor grado de exactitud posible. ¿Se podría considerar en lugar de $f(-h)$, el valor $f(dh)$? ¿Qué fórmula se obtiene en este caso?.

3.9. Fórmulas de integración de Newton-Cotes compuestas.

Cuando el intervalo de integración es grande podemos pensar que se requiere el uso de fórmulas de integración de Newton-Cotes de grado elevado. Pero los coeficientes serían difíciles de calcular, y además el carácter oscilatorio que señalábamos de los polinomios de interpolación con un número elevado de puntos hacen poco recomendables las fórmulas del apartado anterior. Una estrategia más adecuada consiste en descomponer el intervalo en subintervalos más pequeños y aplicar en ellos (bien en cada uno de ellos o agrupándolos) fórmulas de menor grado de precisión. Se obtienen así las llamadas **fórmulas interpolatorias de integración compuestas**. Las más usadas son la Regla del Trapecio compuesta y la fórmula de Simpson de 1/3 compuesta. Señalamos cómo se expresan.

Regla del Trapecio Compuesta:

Dada $f \in \mathcal{C}^2[a, b]$ con $h = (b-a)/n$ y $x_0 = a, x_n = b$ y $x_j = x_0 + jh, j = 1, \dots, n$, se tiene que existe un $\xi \in (a, b)$ tal que

$$\int_a^b f(x) dx = h \left[\frac{f(x_0)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{f(x_n)}{2} \right] - \frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi).$$

Fórmula de Simpson de 1/3 Compuesta:

Dada $f \in \mathcal{C}^4[a, b]$ con $h = (b-a)/n$ y $x_0 = a, x_n = b$ y $x_j = x_0 + jh, j = 1, \dots, n$, con n par, se tiene que existe un $\xi \in (a, b)$ tal que

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{n/2-1} f(x_{2j}) + 4 \sum_{j=1}^{n/2} f(x_{2j-1}) + f(x_n) \right] - \frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\xi).$$

3.10. Errores en las fórmulas de integración compuestas.

Al descomponer el intervalo $[x_0, x_n]$ en subintervalos para aplicar en cada uno la fórmula del Trapecio y así obtener la fórmula del Trapecio compuesta, el error se obtiene como la suma de los errores de las fórmulas simples

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &= \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \dots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x) dx \\ &= h \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f(x_k) + f(x_{k+1})}{2} - \frac{1}{12} h^3 \sum_{k=0}^{n-1} f''(\xi_k). \end{aligned}$$

Pero siendo $f''(x)$ continua utilizando el teorema del valor medio se puede poner

$$\sum_{k=0}^{n-1} f''(\xi_k) = n f''(\xi),$$

con lo que el término de error de la fórmula del Trapecio compuesta se puede expresar en la forma

$$-\frac{1}{12} h^3 \sum_{k=0}^{n-1} f''(\xi_k) = -\frac{1}{12} h^3 n f''(\xi) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi).$$

Con las demás fórmulas se procede de igual manera. Para la fórmula de Simpson de 1/3 compuesta el término de error resulta ser

$$-\frac{1}{90} h^5 \sum_{k=0}^{n/2-1} f^{(4)}(\xi_k) = -\frac{1}{90} h^5 \frac{n}{2} f^{(4)}(\xi) = -\frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\xi).$$

3.11. Errores en las fórmulas de integración compuestas.

En el tema de interpolación vimos que el aumentar el grado del polinomio de interpolación no significaba obtener mejor aproximación a la función interpolada (fenómeno de Runge). Ese mal comportamiento en la aproximación de la función se traslada a la integración numérica, y así puede mostrarse que el aumentar el número de nodos en las fórmulas de Newton-Cotes no conlleva una mejora en la aproximación de la integral

$$\int_{-5}^5 \frac{1}{1+x^2} dx.$$

Este mal comportamiento de las fórmulas de Newton-Cotes también está relacionado con las cancelaciones que se producen, pues para $n \geq 8$ los coeficientes no son todos positivos.

Sin embargo, para la fórmula del Trapecio compuesta si el módulo de la derivada segunda se puede acotar por M el error se acota por

$$|E_{TC}| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} M. \quad (3.5)$$

En el caso de la fórmula de Simpson de 1/3 compuesta, si el módulo de la derivada cuarta se puede acotar por M , se tiene que

$$|E_{SC}| \leq \frac{(b-a)^5}{180n^4} M. \quad (3.6)$$

Las cotas en (3.5) y (3.6) nos indican que los errores en las fórmulas compuestas se pueden hacer arbitrariamente pequeños siempre que se aumente el número de subintervalos.

3.12. Estabilidad respecto del error de redondeo.

Finalmente haremos una observación sobre la estabilidad de las fórmulas de cuadratura compuestas respecto del error de redondeo. Vimos que tomar un paso muy

pequeño en el caso de la derivación numérica no era una garantía para obtener mejores aproximaciones. Ahora con la integración numérica no pasa lo mismo. Veamos un ejemplo.

Supongamos que al evaluar los términos $f(x_i)$ que aparecen en la fórmula de Simpson anterior cometemos un error e_i , es decir, $\tilde{f}(x_i)$ es el valor calculado y se tiene

$$f(x_i) = \tilde{f}(x_i) + e_i, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Entonces, considerando que los e_i están acotados, es decir, $|e_i| \leq \epsilon$ para todo i , se puede acotar el error acumulado debido al redondeo, e , en la forma

$$\begin{aligned} |e| &= \left| \frac{h}{3} \left[e_0 + 2 \sum_{j=1}^{n/2-1} e_{2j} + 4 \sum_{j=1}^{n/2} e_{2j-1} + e_n \right] \right| \\ &\leq \frac{h}{3} \left[\epsilon + 2 \left(\frac{n}{2} - 1 \right) \epsilon + 4 \left(\frac{n}{2} \right) \epsilon + \epsilon \right] \\ &= (b - a) \epsilon, \end{aligned}$$

con lo que la cota es independiente del número de nodos, o lo que es lo mismo, del tamaño del paso.

NOTA:

Vimos en un ejercicio anterior que los pesos de las fórmulas de cuadratura interpolatorias verifican

$$\sum_{i=0}^n a_i = b - a, \quad \sum_{i=0}^n \alpha_i = n,$$

y por tanto la acotación anterior será válida para cualquier fórmula interpolatoria.

3.13. Polinomios de Bernoulli.

Definición 3.13.1 Los polinomios de Bernoulli, $B_k(t)$ se definen por medio de la ecuación

$$\sum_{k=0}^n \binom{n+1}{k} B_k(t) = (n+1)t^n.$$

Se tiene que para $n = 0$ es $B_0(t) = 1$. Para $n = 1$ resulta $B_1(t) = t - 1/2$, y así sucesivamente.

PROPIEDADES: Los polinomios de Bernoulli verifican:

1. $B'_n = n B_{n-1} \quad n \geq 1$
2. $B_n(t+1) - B_n(t) = n t^{n-1} \quad n \geq 2$
3. $B_n(1-t) = (-1)^n B_n(t)$
4. La función $G(t) = B_{2n}(t) - B_{2n}(0)$ no tiene ceros en $(0, 1)$

La demostración de las anteriores propiedades se puede encontrar en [Kincaid y Cheney, p. 497]. En particular, a partir de las propiedad 2 anterior resulta que $B_n(1) = B_n(0) = b_n$, y a partir de la propiedad 3 se obtiene que si n es impar entonces $b_n = 0$, resultados que utilizaremos en el siguiente teorema.

3.14. Fórmula de Euler-MacLaurin.

Teorema 3.14.1 Si $f(x) \in \mathcal{C}^{2n}[0, 1]$ entonces se tiene que

$$\int_0^1 f(t) dt = \frac{1}{2} [f(0) + f(1)] + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{b_{2k}}{(2k)!} [f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(1)] - \frac{b_{2n}}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi)$$

siendo $\xi \in (0, 1)$ y $b_k = B_k(0)$.

Demostración [Kincaid y Cheney, p. 499]

Utilizando las propiedades de los polinomios de Bernoulli y la integración por partes se tiene que

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(t) dt &= \int_0^1 f(t) B_0(t) dt = \int_0^1 f(t) B_1'(t) dt \\ &= f(t) B_1(t) \Big|_0^1 - \int_0^1 B_1(t) f'(t) dt \end{aligned}$$

Como $B_1(0) = -1/2$ y $B_1(1) = 1/2$ podemos escribir

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(t) dt &= \frac{1}{2} [f(1) + f(0)] - \int_0^1 B_1(t) f'(t) dt \\ &= \frac{1}{2} [f(1) + f(0)] - \frac{1}{2} \int_0^1 B_2'(t) f'(t) dt \end{aligned}$$

Integrando de nuevo por partes en esta última integral, resulta

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(t) dt &= \frac{1}{2} [f(1) + f(0)] - \frac{b_2}{2} [f'(1) - f'(0)] \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_0^1 B_2(t) f''(t) dt \end{aligned}$$

Utilizando que $B_n(0) = B_n(1) = b_n$ y que $b_3 = b_5 = \dots = b_{2n-1} = 0$, después de repetir $2n$ veces el proceso anterior resulta

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(t) dt &= \frac{1}{2} [f(1) + f(0)] - \sum_{k=1}^n \frac{b_{2k}}{(2k)!} [f^{(2k-1)}(1) - f^{(2k-1)}(0)] \\ &\quad + \frac{1}{(2n)!} \int_0^1 B_{2n}(t) f^{(2n)}(t) dt \end{aligned}$$

Pero el último término del sumatorio anterior es

$$-\frac{b_{2n}}{(2n)!} [f^{(2n-1)}(1) - f^{(2n-1)}(0)] = -\frac{b_{2n}}{(2n)!} \int_0^1 f^{(2n)}(t) dt,$$

así que podemos poner

$$R = \frac{1}{(2n)!} \int_0^1 (B_{2n}(t) - b_{2n}) f^{(2n)}(t) dt,$$

Y como $B_{2n}(t) - b_{2n}$ no cambia de signo en $[0, 1]$, por el teorema generalizado del valor medio del cálculo integral se tiene que

$$R = \frac{1}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi) \int_0^1 (B_{2n}(t) - b_{2n}) dt,$$

Y como $B_{2n} = B'_{2n+1}/(2n+1)$ y $B_{2n+1}(0) = B_{2n+1}(1) = 0$, se obtiene que

$$R = -\frac{b_{2n}}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi),$$

y se sigue la fórmula del enunciado. \square

3.15. Fórmula compuesta de Euler-MacLaurin.

Como corolario de la fórmula anterior se obtiene el siguiente resultado:

Corolario 3.15.1 Si $f(x) \in \mathcal{C}^{2n}[x_0, x_m]$ entonces se tiene que

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_m} f(x) dx &= h \left[\frac{1}{2} f(x_0) + f(x_1) + \dots + f(x_{m-1}) + \frac{1}{2} f(x_m) \right] \\ &+ \sum_{k=1}^{n-1} h^{2k} \frac{b_{2k}}{(2k)!} [f^{(2k-1)}(x_0) - f^{(2k-1)}(x_m)] \\ &- h^{2n+1} m \frac{b_{2n}}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi) \end{aligned}$$

siendo $h = (x_m - x_0)/m$, $x_i = x_0 + ih$, $i = 1, \dots, m$, $\xi \in (x_0, x_m)$, y $b_k = B_k(0)$.

Demostración

El resultado se obtiene sin más que expresar la integral dada como suma de integrales

$$\int_{x_0}^{x_m} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \dots + \int_{x_{m-1}}^{x_m} f(x) dx$$

y tras hacer cambios de variable en cada una de las integrales para que estén extendidas al intervalo $[0, 1]$, aplicar la fórmula de Euler-MacLaurin a cada una de ellas. \square

La consecuencia práctica que se deriva de esta fórmula es que hemos obtenido un desarrollo asintótico del error para la fórmula del trapecio compuesta, y en consecuencia podemos aplicar el proceso de extrapolación de Richardson para obtener el **algoritmo de integración de Romberg**.

Otra consecuencia del corolario anterior es que cuando las diferencias de las sucesivas derivadas impares en los puntos extremos del intervalo se anulan se obtendrá una mejor aproximación. Tal ocurre con una función periódica donde las sucesivas derivadas de orden impar hasta cierto orden se anulan, estando la integral definida sobre un intervalo de longitud igual al periodo. Si el periodo es $b - a$ y

$$f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) = 0, \quad k = 1, \dots, n - 1$$

entonces según la fórmula anterior el error será

$$E_{TC} = \mathcal{O}(h^{2n+1}).$$

El error de la fórmula del Trapecio compuesta para una función no periódica es $\mathcal{O}(h^2)$, pero en el caso de funciones periódicas suaves el error es mucho menor, y por tanto esta fórmula está particularmente indicada para este tipo de funciones.

Ejemplo:

Calcule la integral en un intervalo $[x_0, x_0 + \pi]$ de la función $f(x) = \text{sen}^2(x)$ utilizando la fórmula del trapecio compuesta para distintos valores de x_0 .

Según la expresión del error de la fórmula compuesta, ¿cuántos intervalos serán necesarios para que el error de la integral aproximada sea menor que 10^{-8} ?.

¿ Qué error se obtiene utilizando sólo dos intervalos?.

3.16. Actividades complementarias.

- La utilización de operadores de manera formal permite obtener fórmulas de aproximación de integrales. Considere el *operador siguiente*, E , y la fórmula

$$E^s f(x_0) = f(x_0 + s h), \quad s \in \mathbb{Z}.$$

Utilice el cambio de variable $x = x_0 + s h$ en la integral para obtener

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = \int_0^n f(x_0 + s h) h ds = h \int_0^n E^s f(x_0) ds,$$

y tras resolver la integral y expresar el operador siguiente en término del operador *diferencia progresiva*, obtenga una fórmula de integración aproximada de la forma:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \simeq h \sum_{i=0}^n a_i \Delta^i f(x_0).$$

¿Qué fórmulas resultan para los distintos valores de n ? ¿Podrían obtenerse otras fórmulas para aproximar la integral utilizando otros operadores?

- La *Regla del Trapecio corregida o modificada* utiliza también valores de la derivada en los extremos de integración, y junto con el término de error se expresa en la forma

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \frac{h}{2} [f(a) + f(b)] + \frac{h^2}{12} [f'(a) - f'(b)] \\ &\quad + \frac{1}{720} (b-a)^5 f^{(4)}(\xi). \end{aligned}$$

Obtenga una fórmula corregida para la Regla de Simpson de $1/3$.

- Al igual que mencionamos en el tema sobre diferenciación, también es posible mejorar las fórmulas de integración si se dispone de alguna información sobre la función a integrar. Por ejemplo, si $f(x)$ tiene un comportamiento oscilatorio, en lugar de considerar la fórmula del trapecio para aproximar la integral,

$$\int_{x-h}^{x+h} f(t) dt \simeq 2(f(x+h) + f(x-h))$$

podríamos buscar una fórmula de la forma

$$\int_{x-h}^{x+h} f(t) dt \simeq A f(x+h) + B f(x-h)$$

e imponer que sea exacta para las funciones $f(x) = \text{sen}(\omega x)$ y $f(x) = \text{cos}(\omega x)$ para así determinar los coeficientes A y B . Se obtiene así una fórmula del trapecio adaptada.

Estudie otras fórmulas de integración numérica de este tipo y aplíquelas para resolver integrales concretas, comparando los resultados obtenidos con varios métodos.

- Cuando se tiene una función que varía de formas muy diferentes en regiones de un intervalo conviene adaptar el tamaño del paso a esa variación de la función, de manera que en las zonas donde la función varíe poco se pueda tomar un paso mas grande, y en las zonas de mayor variación se tome un paso más pequeño. Estudie en qué consiste la cuadratura adaptativa y aplíquelo a la regla de Simpson de 1/3.
- Considere la regla del Trapecio donde los nodos no están uniformemente espaciados, es decir, $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ siendo los $h_i = x_i - x_{i-1}$, $i = 1, \dots, n$ no todos iguales.

Se tiene que el error se puede poner en la forma

$$\begin{aligned} |E_{TCU}| &= \left| \int_a^b f(x) dx - \sum_{i=1}^n \frac{h_i}{2} [f(x_{i-1}) - f(x_i)] \right| \\ &= \left| \frac{1}{12} \sum_{i=1}^n h_i^3 f'' \right| \end{aligned}$$

Si llamamos $h = \max_{i=1, \dots, n} h_i$, se puede establecer la cota

$$|E_{TCU}| \leq \frac{1}{12} h^2 \sum_{i=1}^n h_i \|f''\|_{\infty} = \frac{1}{12} h^2 (b - a) \|f''\|_{\infty}$$

de manera que no obtenemos una cota mejor que en el caso de nodos igualmente espaciados.

Considere alguna forma de elegir los nodos desigualmente espaciados para que al aplicar la fórmula anterior se obtenga un error menor que con nodos equidistantes.

3.17. Bibliografía.

Bibliografía básica.

- [Aubanell, A., Benseny, A. y Delshams, A. : 1993]: presenta un tratamiento práctico del tema.
- [Burden, R. L. y Faires, J. D. : 1998]: el capítulo 4 presenta un desarrollo del tema adecuado, junto con temas sobre integrales impropias y múltiples.
- [Chapra, S. C. y Canale, R. P. : 2003]: libro muy básico, dirigido más bien a las aplicaciones en ingeniería. Se ocupa también de las integrales impropias y múltiples.
- [Gasca, M. : 1990]: un desarrollo adecuado del tema.
- [Gerald, C. F. and Wheatley, P. O. : 2000]: el capítulo 5 trata varios aspectos del tema, incluyendo la integración adaptativa.
- [Infante, J. A. y Rey, J. M. : 2002]: el capítulo 7 contiene variados problemas sobre el tema incluyendo algunos de carácter teórico.
- [Phillips, G. M., Taylor, P. J. : 1996]: el capítulo 7 presenta un tratamiento adecuado del tema. Ejemplos interesantes. el capítulo 4 detalla particularmente la cuadratura gaussiana.
- [Rodríguez, F. J. : 2003]: un desarrollo adecuado, con ejemplos numéricos detallados.
- [Sanz-Serna, J. M. : 1998]: el capítulo 5 constituye un tratamiento adecuado de las fórmulas interpolatorias.
- [Scheid, F. : 1972]: un libro clásico que presenta los temas a través de problemas. Incluye numerosos temas para posibles ampliaciones.
- [Scheid, F. y Constanzo, R. E.]: una versión del anterior con resúmenes didácticos.

- [Smith, W. A. : 1988]: el capítulo 8 se ocupa de las fórmulas de Newton-Cotes y el método de Romberg.
- [Süli, E. : 2006]: una presentación estupenda del tema.

Bibliografía complementaria.

- [Carnahan, B., Luther, H. A. and Wilkes, J. O. : 1979]: un tratamiento amplio del tema, con numerosas fórmulas y ejemplos numéricos, así como un apartado de problemas y aplicaciones.
- [Davis, P. J. and Rabinowitz, P. : 1984]: un clásico sobre el tema. Casi es una referencia obligada siempre que se habla de integración numérica.
- [Demidovich, B. P., Maron I. A. : 1977]: el capítulo 16 recoge variadas fórmulas de integración junto con otros aspectos: polinomios de Bernoulli, fórmula de Euler-Maclaurin, fórmulas de cubicación.
- [Kincaid, D. y Cheney, W. : 1994]: el capítulo 7 aborda los polinomios de Bernoulli y la fórmula de Euler-Maclaurin.

Capítulo 4

Integración numérica: cuadratura gaussiana.

4.1. Introducción.

En las fórmulas de Newton-Cotes que vimos en el tema anterior se utilizaban nodos equiespaciados, ahora, en la cuadratura de Gauss se escogen los nodos x_i y los pesos w_i para obtener fórmulas de integración con mayor precisión. Las fórmulas que se obtienen son de la forma

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

donde aparecen $2n$ parámetros, así que imponiendo que la fórmula sea exacta para polinomios hasta grado $2n - 1$ (o equivalentemente, debido a la linealidad de la fórmula, para las funciones $f(x) = x^j$, $j = 0, 1, \dots, 2n - 1$) resultará un sistema de $2n$ ecuaciones y $2n$ incógnitas. Resolviendo el sistema obtenemos los valores de los nodos y los pesos para la fórmula correspondiente.

La limitación de este método se encuentra en que hemos de conocer la expresión explícita de la función $f(x)$, para que pueda evaluarse en los nodos obtenidos (o disponer del valor de $f(x)$ en esos nodos, cosa más que improbable). La ventaja es que, con el mismo esfuerzo, se obtienen fórmulas que proporcionan mayor exactitud que las fórmulas de tipo interpolatorio. Así por ejemplo, mediante un procedimiento de

coeficientes indeterminados puede obtenerse directamente la fórmula de cuadratura

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \simeq f\left(\frac{-1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right),$$

que, sorprendentemente, es exacta para polinomios de grado ≤ 3 (nótese que sólo hay que evaluar la función dos veces, al igual que con la fórmula del Trapecio, pero esta última sin embargo sólo es exacta para polinomios de grado ≤ 1).

Pero cuando se considera un valor grande de n , la obtención directa de los valores de los pesos y de los nodos puede resultar muy dificultosa o casi imposible. El teorema que sigue justifica la introducción de los polinomios ortogonales, los cuales permitirán calcular los nodos y los pesos de una forma más cómoda a la vez que elegante.

Vimos que las fórmulas de cuadratura de tipo interpolatorio con $n + 1$ nodos tenían grado de precisión al menos n . ¿En qué condiciones podremos asegurar que el grado de precisión es mayor?.

Teorema 4.1.1 *Sea una fórmula de cuadratura dada por*

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

con n nodos y grado de precisión $\geq n - 1$.

El grado de precisión de la fórmula es $n + p$ si y sólo si

$$\int_a^b M(x) p(x) dx = 0 \tag{4.1}$$

para todo polinomio $p(x)$ de grado $\leq p$ y

$$\int_a^b M(x) u(x) dx \neq 0$$

para algún polinomio $u(x)$ de grado $p + 1$, donde $M(x)$ está dado por $M(x) = (x - x_1) \cdots (x - x_n)$.

Demostración

\Rightarrow) Sea $p(x)$ un polinomio cualquiera de grado $\leq p$. Se tiene que $M(x)p(x)$ es de grado $\leq n + p$, y como estamos suponiendo que el grado de precisión de la fórmula es $n + p$ entonces es

$$\int_a^b M(x)p(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i M(x_i)p(x_i) = 0.$$

Veamos ahora que existe algún polinomio $u(x)$ de grado $p + 1$ para el cual se tiene que $\int_a^b M(x)u(x) dx \neq 0$.

Por tener la fórmula grado de precisión $n + p$ existe algún polinomio $q(x)$ de grado $n + p + 1$ tal que

$$\int_a^b q(x) dx \neq \sum_{i=1}^n w_i q(x_i). \quad (4.2)$$

Dividiendo $q(x)$ entre $M(x)$ resulta

$$q(x) = M(x)u(x) + r(x)$$

donde el cociente $u(x)$ tiene grado $p + 1$ y el resto $r(x)$ es de grado $< n$. Veamos que se tiene que $\int_a^b M(x)u(x) dx \neq 0$, y por tanto este $u(x)$ será el polinomio buscado.

Supongamos que fuera $\int_a^b M(x)u(x) dx = 0$. En tal caso, como es $q(x_i) = r(x_i)$ para $i = 1, \dots, n$, y por ser la fórmula exacta para $r(x)$, se tendría que

$$\begin{aligned} \int_a^b q(x) dx &= \int_a^b M(x)u(x) dx + \int_a^b r(x) dx \\ &= 0 + \sum_{i=1}^n w_i r(x_i) = \sum_{i=1}^n w_i q(x_i) \end{aligned}$$

en contradicción con la condición expresada en (4.2).

\Leftarrow) Sea ahora $f(x)$ un polinomio cualquiera tal que $n \leq \text{grado}(f) \leq n + p$. Dividiendo f entre M podemos poner

$$f(x) = M(x)q(x) + r(x),$$

siendo $\text{grado}(q) \leq p$ y $\text{grado}(r) < n$. Se tiene que $f(x_i) = r(x_i)$, y entonces según la hipótesis podemos poner

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_a^b M(x) q(x) dx + \int_a^b r(x) dx = \\ &= 0 + \sum_{i=1}^n w_i r(x_i) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) \end{aligned}$$

y la fórmula tiene al menos grado de precisión $n + p$.

¿Este es el mayor grado de precisión que puede alcanzarse?.

Sea ahora un polinomio $u(x)$ de grado $p + 1$ tal que

$$\int_a^b M(x) u(x) dx \neq 0.$$

Entonces se tiene que $M(x) u(x)$ es de grado $n + p + 1$ y

$$\sum_{i=1}^n w_i M(x_i) u(x_i) = 0$$

por lo que la fórmula no tiene grado de precisión $n + p + 1$. \square

Ejercicio:

Pruebe que una fórmula de cuadratura del tipo

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

no puede tener grado de precisión $> 2n - 1$.

[Solución: considere el polinomio $M(x)$ dado por

$$M(x) = [(x - x_1) \cdots (x - x_n)]^2$$

Se tiene que $\int_a^b M(x) dx > 0$ pero $\sum_{i=1}^n w_i M(x_i) = 0$.]

4.2. Polinomios ortogonales.

El grado de precisión máximo que puede tener una fórmula del tipo

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

es $2n - 1$, así que para construir una fórmula de cuadratura de orden máximo bastará con encontrar un polinomio $M(x)$ de grado n que satisfaga la condición (4.1) cuando $p = n - 1$. Ahora bien, la condición (4.1) significa que $M(x)$ ha de ser ortogonal a todos los polinomios de grado $\leq n - 1$ para el producto interno

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_a^b f(x)g(x) dx.$$

Y generalizando, consideraremos una función de peso $w(x) : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$, continua y siendo $w(x) > 0$, de manera que se puede definir un producto interno en $\mathcal{C}[a, b]$ dado por $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathcal{C}[a, b] \times \mathcal{C}[a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ mediante la fórmula

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_a^b w(x)f(x)g(x) dx.$$

El concepto de ortogonalidad se define con respecto a este producto.

Definición 4.2.1 *Se dice que $f(x)$ y $g(x)$ son ortogonales respecto de la función de peso $w(x)$ si $\langle f(x), g(x) \rangle = 0$.*

Definición 4.2.2 *Dada una familia de polinomios $\{\phi_i(x)\}_{i=0,1,\dots}$ donde cada $\phi_i(x)$ es de grado i , se dice ortogonal en $[a, b]$ respecto a la función de peso $w(x)$ si*

$$\int_a^b w(x) \phi_k(x) \phi_j(x) dx = \begin{cases} 0 & k \neq j, \\ \neq 0 & k = j. \end{cases}$$

Un resultado básico sobre polinomios ortogonales queda recogido en el enunciado siguiente.

Teorema 4.2.1 *Dada una familia $\{\phi_i(x)\}_{i=0,1,\dots}$ de polinomios ortogonales respecto de una función de peso $w(x)$, se tiene que un polinomio $q_n(x)$ de grado n se puede expresar de manera única en la forma*

$$q_n(x) = \sum_{i=0}^n \gamma_i \phi_i(x)$$

para ciertas constantes γ_i .

Demostración

La familia de polinomios ortogonales se puede construir de manera recursiva. Suponiendo que se toma $\phi_0(x) = 1$ y que se ha determinado quienes son $\phi_1(x), \dots, \phi_n(x)$, se toma

$$\phi_{n+1}(x) = x^{n+1} - [a_0 \phi_0(x) + \dots + a_n \phi_n(x)]$$

y se impone la condición de ortogonalidad con $\phi_0(x), \dots, \phi_n(x)$, de donde resultan los coeficientes

$$a_j = \frac{\int_a^b w(x) x^{n+1} \phi_j(x) dx}{\int_a^b w(x) (\phi_j(x))^2 dx}, \quad j = 0, \dots, n.$$

Veamos la unicidad. Supongamos que $q_n(x)$ tuviera dos expresiones distintas de la forma señalada,

$$q_n(x) = \sum_{i=0}^n \gamma_i \phi_i(x), \quad q_n(x) = \sum_{i=0}^n \sigma_i \phi_i(x).$$

Se tiene que debido a la ortogonalidad, para cada $k = 0, \dots, n$ es

$$0 = \int_a^b w(x) \sum_{i=0}^n (\gamma_i - \sigma_i) \phi_i(x) \phi_k(x) dx = (\gamma_k - \sigma_k) \int_a^b w(x) (\phi_k(x))^2 dx$$

de donde se sigue que $\gamma_k = \sigma_k$. \square

Corolario 4.2.1 *Se tiene que $\langle \phi_n(x), q(x) \rangle = 0$ para cualquier polinomio $q(x)$ de grado $< n$.*

Se tiene además que todas las raíces de los polinomios ortogonales son reales y están en el intervalo (a, b) .

Teorema 4.2.2 *Siendo $\phi_n(x)$ un polinomio de grado n ortogonal con respecto a una función de peso $w(x)$ a los polinomios de grado menor que n , se tiene que las raíces de $\phi_n(x)$ son simples, reales, y están en (a, b) .*

Demostración

Primero veremos que todas las raíces están dentro de (a, b) . Denotamos por x_1, \dots, x_r las raíces reales de $\phi_n(x)$ en (a, b) que tienen multiplicidades respectivas m_1, \dots, m_r . Se tiene que $r \geq 1$ pues

$$0 = \int_a^b w(x) \phi_n(x) \phi_0(x) dx = \int_a^b w(x) \phi_n(x) dx$$

y siendo $w(x) > 0$, necesariamente $\phi_n(x)$ ha de cambiar de signo en (a, b) . Llamamos

$$q(x) = (x - x_1)^{m_1} \cdots (x - x_r)^{m_r},$$

de manera que $\phi_n(x) = q(x)u(x)$ siendo $u(x)$ un polinomio que tiene signo constante en (a, b) . Se tiene que

$$\int_a^b w(x) \phi_n(x) q(x) dx = \int_a^b w(x) u(x) (q(x))^2 dx \neq 0.$$

Pero entonces ha de ser necesariamente $\text{grado}(q) \geq n$ ya que $\phi_n(x)$ es ortogonal a todo polinomio de grado menor que n . Por otro lado $\text{grado}(q) \leq \text{grado}(\phi_n) = n$. Resulta entonces que $\text{grado}(q) = n$, y todas las raíces son reales y están en (a, b) .

Seguidamente veamos que todas las raíces son simples. Se procede razonando por reducción al absurdo. Supongamos que hubiera una raíz, x_j , de multiplicidad mayor que uno. Podemos poner

$$\phi_n(x) = (x - x_j)^2 q_{n-2}(x)$$

y tendríamos que

$$\int_a^b w(x) \phi_n(x) q_{n-2}(x) dx = \int_a^b w(x) (x - x_j)^2 (q_{n-2}(x))^2 dx > 0$$

en contradicción con que esta integral ha de ser cero por ser $\phi_n(x)$ ortogonal a todo polinomio de grado $< n$. \square

4.3. Fórmula de cuadratura de grado de precisión máximo.

Teorema 4.3.1 Si x_1, \dots, x_n son los ceros del polinomio ortogonal $\phi_n(x)$ respecto de la función de peso $w(x)$, y w_1, \dots, w_n es la solución del sistema de ecuaciones

dado por

$$\sum_{i=1}^n \phi_k(x_i) w_i = \begin{cases} \langle \phi_0(x), \phi_0(x) \rangle & \text{si } k = 0, \\ 0 & \text{si } k = 1, \dots, n-1, \end{cases}$$

entonces la fórmula de cuadratura dada por

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

tiene grado de precisión máximo $2n - 1$. Y además se tiene que $w_i > 0$ para $i = 1, \dots, n$.

Demostración

Sea $p(x)$ un polinomio cualquiera de grado $\leq 2n - 1$. Podemos poner

$$p(x) = \phi_n(x) q(x) + r(x),$$

siendo $q(x)$ y $r(x)$ polinomios de grados $\leq n - 1$, y que se pueden expresar en la forma

$$q(x) = \sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k \phi_k(x), \quad r(x) = \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k \phi_k(x).$$

Debido a la ortogonalidad resulta que

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x) p(x) dx &= \int_a^b w(x) \phi_n(x) q(x) dx + \int_a^b w(x) r(x) \phi_0(x) dx \\ &= 0 + \beta_0 \langle \phi_0(x), \phi_0(x) \rangle. \end{aligned}$$

Por otra parte, como $\phi_n(x_i) = 0$, se tiene que

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n w_i p(x_i) &= \sum_{i=1}^n w_i r(x_i) = \sum_{i=1}^n w_i \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k \phi_k(x_i) \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k \sum_{i=1}^n w_i \phi_k(x_i) = \beta_0 \langle \phi_0(x), \phi_0(x) \rangle, \end{aligned}$$

con lo que la fórmula tiene grado de precisión máximo.

Además, cogiendo el polinomio de grado $2n - 2$

$$q_j(x) = \prod_{k=1, k \neq j}^n (x - x_k)^2$$

resulta que

$$\begin{aligned} 0 < \int_a^b w(x) q_j(x) dx &= \sum_{i=1}^n w_i q_j(x_i) \\ &= \sum_{i=1}^n w_i \prod_{k=1, k \neq j}^n (x_i - x_k)^2 = w_j \prod_{k=1, k \neq j}^n (x_j - x_k)^2 \end{aligned}$$

luego $w_j > 0$. \square

NOTA: obsérvese que a partir de las igualdades últimas se obtiene otra forma de obtener los pesos, pues se puede poner

$$w_j = \int_a^b w(x) L_j(x)^2 dx.$$

Según el teorema anterior, para obtener una fórmula de orden máximo, $2n - 1$, habremos de encontrar un polinomio de grado n que sea ortogonal a todos los polinomios de grado $< n$. Para las distintas funciones de peso e intervalos el polinomio que cumple la condición anterior es el polinomio de grado n de cada familia ortogonal. Así pues, los nodos x_i que elegiremos en la fórmula de cuadratura serán los ceros de dicho polinomio ortogonal. Los pesos w_i se obtienen como la solución del sistema de ecuaciones que aparece en el teorema

$$\sum_{i=1}^n \phi_k(x_i) w_i = \begin{cases} \langle \phi_0(x), \phi_0(x) \rangle & \text{si } k = 0, \\ 0 & \text{si } k = 1, \dots, n-1, \end{cases}$$

o bien imponiendo que la fórmula sea exacta para las funciones $f(x) = x^k$, $k = 0, 1, \dots, n-1$, con lo que resulta un sistema equivalente de la forma

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & \dots & x_n^{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \\ \vdots \\ k_n \end{bmatrix},$$

siendo las constantes k_j las dadas por

$$k_j = \int_a^b w(x) x^{j-1} dx \quad j = 1, \dots, n$$

donde las incógnitas son precisamente las w_i , y por ser un sistema de Vandermonde tiene solución única (la matriz de Vandermonde tiene una inversa explícita que permite obtener unas fórmulas cerradas para las w_i en términos de las funciones simétricas elementales del conjunto $\{x_1, \dots, x_n\}$ [véase N. Higham, p.460]).

Proposición 4.3.1 *La fórmula de cuadratura de Gauss de la forma*

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

donde los x_i son los ceros del polinomio ortogonal $\phi_n(x)$ y los w_i se calculan como en el teorema anterior, es la única fórmula de cuadratura con n nodos que tiene grado de precisión $2n - 1$.

Demostración

Supongamos que hay una fórmula de cuadratura de la forma

$$\int_a^b w(x) f(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n c_i f(x_i),$$

que tiene grado de precisión $2n - 1$.

Sea $q(x)$ un polinomio de grado $\leq n - 1$. Se tiene que

$$\int_a^b w(x) q(x) \prod_{j=1}^n (x - x_j) dx = \sum_{i=1}^n c_i q(x_i) \prod_{j=1}^n (x_i - x_j) = 0,$$

luego $\prod_{j=1}^n (x - x_j)$ es un polinomio de grado n que es múltiplo del correspondiente polinomio ortogonal de grado n , $\phi_n(x)$, y los nodos x_j son los ceros del polinomio $\phi_n(x)$.

Por otro lado, si tomamos $f(x) = \phi_j(x)$ para $j = 0, \dots, n-1$, siendo la fórmula exacta para estos polinomios, resulta el sistema

$$\sum_{i=1}^n \phi_k(x_i) c_i = \begin{cases} \langle \phi_0(x), \phi_0(x) \rangle & \text{si } k = 0, \\ 0 & \text{si } k = 1 \dots, n-1, \end{cases}$$

es decir, el mismo sistema que aparecía en el teorema anterior, y por la unicidad de la solución del sistema, ha de ser $c_i = w_i$ para $i = 0, \dots, n-1$, así que la fórmula es única. \square

Ejemplo:

Considere una fórmula de cuadratura tipo Gauss para hallar una integral de la forma

$$\int_0^1 x f(x) dx = \sum_{i=1}^5 w_i f(x_i).$$

Tome como función de peso $w(x) = x$ y determine el polinomio ortogonal en $[0, 1]$ de grado 5 para esa función de peso. Las raíces serán los nodos, y los pesos o coeficientes se determinan resolviendo el sistema anterior. Aplíquelo para obtener el valor de

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

y compárelo con otros métodos.

Ejemplo:

Halle los nodos y pesos para que la fórmula

$$\int_{-1}^1 x^2 f(x) dx \simeq \sum_{i=1}^3 w_i f(x_i)$$

tenga el mayor grado de precisión posible.

Ejemplo:

Determine los valores de A, B y C para que la fórmula de cuadratura

$$\int_{-3h}^h f(x) dx \simeq h [A f(0) + B f(-h) + C f(-2h)]$$

tenga el mayor grado de precisión posible.

4.4. Error en las fórmulas de cuadratura gaussianas.

Teorema 4.4.1 *Siendo $f \in \mathcal{C}^{2n}[a, b]$ y $\{x_i\}_{i=1}^n, \{w_i\}_{i=1}^n$ los nodos y pesos respectivamente de una fórmula de cuadratura de Gauss respecto a una función de peso $w(x)$, existe $\eta \in (a, b)$ tal que*

$$\int_a^b w(x)f(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) + \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \int_a^b w(x) [(x - x_1) \cdots (x - x_n)]^2 dx.$$

Demostración

Llamemos $p(x)$ al polinomio de grado $\leq 2n - 1$ que es solución del problema de interpolación de Hermite dado por

$$p(x_i) = f(x_i), \quad p'(x_i) = f'(x_i), \quad i = 1, \dots, n,$$

por lo que según la fórmula de error del polinomio de interpolación de Hermite es

$$f(x) - p(x) = \frac{f^{(2n)}(\xi_x)}{(2n)!} (x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2.$$

Se tiene entonces que

$$\begin{aligned} & \int_a^b w(x) [f(x) - p(x)] dx \\ &= \frac{1}{(2n)!} \int_a^b w(x) f^{(2n)}(\xi_x) (x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2 dx \\ &= \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \int_a^b w(x) (x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2 dx. \end{aligned}$$

Por otro lado, como la fórmula de integración es exacta para $p(x)$, resulta

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x) [f(x) - p(x)] dx &= \int_a^b w(x) f(x) dx - \int_a^b w(x) p(x) dx \\ &= \int_a^b w(x) f(x) dx - \sum_{i=1}^n w_i p(x_i) \\ &= \int_a^b w(x) f(x) dx - \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) \end{aligned}$$

de donde, igualando las dos expresiones para la integral, resulta el enunciado.

□

La fórmula de error obtenida no resulta práctica cuando no es posible acotar o determinar la derivada que aparece en ella. Entonces, la aplicación de las fórmulas de Gauss se realiza para distintos valores de n y se comprueba que las diferencias entre dos cálculos sucesivos se corresponde con la exactitud requerida.

NOTA: Normalmente se consideran polinomios ortogonales mónicos, con lo que $\phi_n(x) = (x - x_1) \cdots (x - x_n)$ y la fórmula de error se puede expresar en la forma

$$\int_a^b w(x) f(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) + \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \langle \phi_n(x), \phi_n(x) \rangle.$$

Ejercicio:

Pruebe que la elección del coeficiente principal en el polinomio ortogonal $\phi_n(x)$ no afecta a los valores de los nodos o los pesos de la fórmula de cuadratura gaussiana.

Dado $[a, b]$ y la función de peso $w(x)$, para cada $n \in \mathbb{N}$ se tiene una fórmula de cuadratura gaussiana. Si denotamos por x_{ni} y w_{ni} los nodos y los pesos respectivamente, para indicar la dependencia de n , la fórmula de cuadratura se escribe

$$\int_a^b w(x) f(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n w_{ni} f(x_{ni}).$$

Teorema 4.4.2 Si f es continua en $[a, b]$ se tiene que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n w_{ni} f(x_{ni}) = \int_a^b w(x) f(x) dx.$$

Demostración

Dado $\epsilon > 0$ por el Teorema de Aproximación de Weierstrass existe un polinomio $p(x)$ tal que $|f(x) - p(x)| < \epsilon$. Si cogemos n tal que $\text{grado}(p) \leq 2n - 1$ entonces la fórmula de cuadratura con n sumandos será exacta al aplicarla a $p(x)$. Se tiene

$$\begin{aligned} & \left| \int_a^b w(x) f(x) dx - \sum_{i=1}^n w_{ni} f(x_{ni}) \right| \\ & \leq \left| \int_a^b w(x) f(x) dx - \int_a^b w(x) p(x) dx \right| + \left| \sum_{i=1}^n w_{ni} [p(x_{ni}) - f(x_{ni})] \right| \\ & \leq \int_a^b w(x) |f(x) - p(x)| dx + \sum_{i=1}^n w_{ni} |p(x_{ni}) - f(x_{ni})| \\ & \leq \epsilon \int_a^b w(x) dx + \epsilon \sum_{i=1}^n w_{ni} \\ & = 2\epsilon \int_a^b w(x) dx. \quad \square \end{aligned}$$

4.5. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Legendre.

Definición 4.5.1 Se define el polinomio de Legendre de grado n como

$$P_0(x) = 1, \quad P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n.$$

Los polinomios de Legendre son una familia ortogonal en el intervalo $[-1, 1]$ con respecto a la función de peso $w(x) = 1$, lo cual se deduce inmediatamente de la proposición siguiente.

Proposición 4.5.1 Para $0 \leq k < n$ se tiene que

$$\int_{-1}^1 x^k P_n(x) dx = 0.$$

Demostración

Se aplica integración por partes k veces y resulta

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^1 x^k P_n(x) dx &= \frac{1}{2^n n!} \int_{-1}^1 x^k \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n dx \\
 &= \frac{1}{2^n n!} x^k \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (x^2 - 1)^n \Big|_{-1}^1 \\
 &\quad - \frac{1}{2^n n!} \int_{-1}^1 k x^{k-1} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (x^2 - 1)^n dx \\
 &= \dots \\
 &= \frac{1}{2^n n!} (-1)^k k! \int_{-1}^1 \frac{d^{n-k}}{dx^{n-k}} (x^2 - 1)^n dx = 0. \quad \square
 \end{aligned}$$

Proposición 4.5.2 *Se tiene que*

$$\int_{-1}^1 x^n P_n(x) dx = \frac{2^{n+1} (n!)^2}{(2n+1)!}.$$

Demostración

A partir de lo visto en la proposición anterior podemos poner

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^1 x^n P_n(x) dx &= \frac{1}{2^n n!} (-1)^n n! \int_{-1}^1 (x^2 - 1)^n dx \\
 &= \frac{1}{2^n} \int_{-1}^1 (1 - x^2)^n dx = \frac{1}{2^n} 2 \int_0^1 (1 - x^2)^n dx \\
 &= \frac{1}{2^n} 2 \int_0^{\pi/2} \cos^{2n+1} t dt = \frac{1}{2^n} \beta\left(\frac{1}{2}, n+1\right) \\
 &= \frac{1}{2^n} \frac{\Gamma(1/2) \Gamma(n+1)}{\Gamma(1/2 + n+1)} \\
 &= \frac{2^{n+1} (n!)^2}{(2n+1)!}
 \end{aligned}$$

donde se han utilizado fórmulas de simplificación en términos de las funciones Gamma y Beta. \square

Proposición 4.5.3 *Se tiene que*

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{2}{2n+1}.$$

Demostración

Considerando sólo el término de mayor grado de $P_n(x)$, pues debido a la ortogonalidad, la contribución de los siguiente sumandos al valor de la integral será cero, podemos poner

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{(2n)!}{n!} x^n + \dots$$

y entonces se tiene que

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \int_{-1}^1 \frac{1}{2^n n!} \frac{(2n)!}{n!} x^n P_n(x) dx$$

y utilizando la proposición anterior resulta el enunciado. \square

Corolario 4.5.1 *Los pesos de la fórmula de cuadratura de Gauss-Legendre se pueden expresar en la forma*

$$w_k = \int_{-1}^1 \frac{P_n(x)}{(x-x_k) P_n'(x_k)} dx.$$

Demostración

Se sigue inmediatamente, pues poniendo $\Pi(x) = \prod_{i=1}^n (x-x_i)$, donde los x_i son los ceros de $P_n(x)$, se tiene que

$$w_k = \int_{-1}^1 L_k(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{\Pi(x)}{(x-x_k) \Pi'(x_k)} dx$$

y por otra parte, se desprende de lo visto en la proposición anterior que $\Pi(x)$ se puede poner como

$$\Pi(x) = \frac{2^n (n!)^2}{(2n)!} P_n(x).$$

Sustituyendo esta última expresión de $\Pi(x)$ en la integral resulta el enunciado.

□

Una vez que sabemos cómo obtener los nodos y pesos de la fórmula de cuadratura de Gauss-Legendre, ya podemos utilizarla.

Ejemplo:

Halle la integral $\int_{-1}^1 (x^{12} - x + 3) \text{sen}^2(x) dx$ utilizando la cuadratura de Gauss-Legendre.

NOTA 1. Se puede obtener una fórmula para calcular los pesos de la cuadratura anterior sin necesidad de utilizar integrales [Scheid, p. 133]. La expresión es

$$w_k = \frac{2}{n P_n'(x_k) P_{n-1}(x_k)}.$$

NOTA 2. Los polinomios de Legendre se pueden generar a partir de una recurrencia [Scheid, p. 132]

$$(n+1) P_{n+1}(x) = (2n+1)x P_n(x) - n P_{n-1}(x),$$

siendo $P_0(x) = 1$ y $P_1(x) = x$.

NOTA 3. A partir de los resultados anteriores y de la fórmula del error para la cuadratura de Gauss se tiene que el error en la cuadratura de Gauss-Legendre se puede expresar en la forma

$$\begin{aligned} E_{G-P} &= \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \int_{-1}^1 [(x-x_1) \cdots (x-x_n)]^2 dx \\ &= \frac{2^{2n+1} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^3} f^{(2n)}(\eta). \end{aligned}$$

4.6. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Chebyshev.

Los polinomios de Chebyshev vimos que constituían una familia ortogonal en el intervalo $[-1, 1]$ para la función de peso $w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$. En la correspondiente fórmula de integración gaussiana los ceros de $T_n(x)$ serán los nodos de integración, y son de la forma

$$x_i = \cos \left[\frac{(2i-1)\pi}{2n} \right], \quad i = 1, \dots, n. \quad (4.3)$$

Igual que ocurría con las fórmulas de Gauss-Legendre se tiene que

$$L_i(x) = \frac{\Pi(x)}{(x-x_i)\Pi'(x_i)} = \frac{T_n(x)}{(x-x_i)T_n'(x_i)}$$

de manera que los pesos se pueden obtener como

$$w_i = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} L_i(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{T_n(x)}{(x-x_i)T_n'(x_i)} dx.$$

Los pesos anteriores pueden ser calculados, y resultan ser todos iguales, $w_i = \pi/n$, con lo que la fórmula de cuadratura queda

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

donde los x_i tienen los valores señalados en (4.3).

Ejercicio:

Pruebe que los pesos de la fórmula de Gauss-Chebyshev son $w_i = \pi/n$.

La demostración utiliza la fórmula [véase Philips & Taylor p. 177]

$$\frac{1}{2} [T_n(x)T_{n-1}(y) - T_n(y)T_{n-1}(x)] = (x-y) \sum_{r=0}^{n-1} T_r(x)T_r(y).$$

Tomando en la fórmula anterior $y = x_i$, una de las raíces de $T_n(x)$, resulta

$$\frac{T_n(x)}{(x-x_i)T_n'(x_i)} = \frac{2}{T_{n-1}(x_i)T_n'(x_i)} \sum_{r=0}^{n-1} T_r(x)T_r(x_i).$$

Sustituyendo esta expresión en la fórmula para los w_i y teniendo en cuenta que sólo el primer sumando es distinto de cero debido a la ortogonalidad de los polinomios de Chebyshev, resulta

$$\begin{aligned}
w_i &= \frac{2}{T_{n-1}(x_i) T'_n(x_i)} \sum_{r=0}^{n-1'} T_r(x_i) \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_r(x) dx \\
&= \frac{T_0(x_i)}{T_{n-1}(x_i) T'_n(x_i)} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_0(x) dx \\
&= \frac{\pi}{T_{n-1}(x_i) T'_n(x_i)} = \frac{\pi}{n},
\end{aligned}$$

donde en la última igualdad se ha usado que siendo x_i una raíz de $T_n(x)$, utilizando la definición de los polinomios de Chebyshev resulta ser

$$T_{n-1}(x_i) T'_n(x_i) = n. \quad \square$$

NOTA 4. A partir de la fórmula del error para la cuadratura de Gauss y de las propiedades de los polinomios de Chebyshev se tiene que el error se puede expresar en la forma

$$\begin{aligned}
E_{G-C} &= \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} [(x-x_1) \cdots (x-x_n)]^2 dx \\
&= \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \left[\frac{T_n(x)}{2^{n-1}} \right]^2 dx \\
&= \frac{f^{(2n)}(\eta)}{2^{2n-2} (2n)!} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_n(x) T_n(x) dx \\
&= \frac{f^{(2n)}(\eta) \pi}{2^{2n-1} (2n)!}.
\end{aligned}$$

Ejemplo:

Halle la integral $\int_{-1}^1 (x^{12} - x + 3) \sin^2(x) dx$ utilizando la cuadratura de Gauss-Chebyshev.

Utilice la misma cuadratura para hallar la integral

$$\int_{-1}^1 \frac{x^{12} - x + 3}{\sqrt{1-x^2}} dx.$$

4.7. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Laguerre.

La deducción de las fórmulas de cuadratura de Gauss-Laguerre se obtiene de forma parecida a las de Gauss-Legendre.

Definición 4.7.1 *Se define el polinomio de Laguerre de grado n como*

$$\mathcal{L}_0(x) = 1, \quad \mathcal{L}_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} e^{-x} x^n.$$

Los polinomios de Laguerre son una familia ortogonal en el intervalo $(0, \infty)$ con respecto a la función de peso $w(x) = e^{-x}$, como se pone de manifiesto en el siguiente resultado.

Proposición 4.7.1 *Para $0 \leq k < n$ se tiene que*

$$\int_0^\infty e^{-x} x^k \mathcal{L}_n(x) dx = 0.$$

Demostración

Se aplica integración por partes k veces y resulta

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-x} x^k \mathcal{L}_n(x) dx &= \int_0^\infty e^{-x} x^k e^x \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n) dx \\ &= x^k \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (e^{-x} x^n) \Big|_0^\infty \\ &\quad - \int_0^\infty k x^{k-1} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (e^{-x} x^n) dx \\ &= \dots \\ &= (-1)^k k! \int_0^\infty \frac{d^{n-k}}{dx^{n-k}} (e^{-x} x^n) dx = 0. \quad \square \end{aligned}$$

Proposición 4.7.2 *Se tiene que*

$$\int_0^\infty e^{-x} x^n \mathcal{L}_n(x) dx = (-1)^n (n!)^2.$$

Demostración

A partir de lo visto en la proposición anterior podemos poner

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-x} x^n \mathcal{L}_n(x) dx &= (-1)^n n! \int_0^{\infty} e^{-x} x^n dx \\ &= (-1)^n n! \Gamma(n+1) \\ &= (-1)^n (n!)^2. \quad \square \end{aligned}$$

Proposición 4.7.3 *Se verifica que*

$$\int_0^{\infty} e^{-x} [\mathcal{L}_n(x)]^2 dx = (n!)^2.$$

Demostración

Considerando sólo el término de mayor grado de $\mathcal{L}_n(x)$, pues debido a la ortogonalidad, la contribución de los siguiente sumandos al valor de la integral será cero, podemos poner

$$\mathcal{L}_n(x) = (-1)^n x^n + \dots$$

y entonces se tiene según el resultado anterior que

$$\int_0^{\infty} e^{-x} [\mathcal{L}_n(x)]^2 dx = (-1)^n \int_0^{\infty} e^{-x} x^n \mathcal{L}_n(x) dx = (n!)^2. \quad \square$$

Corolario 4.7.1 *Los pesos de la fórmula de cuadratura de Gauss-Laguerre se pueden expresar en la forma*

$$w_k = \int_0^{\infty} e^{-x} \frac{\mathcal{L}_n(x)}{(x - x_k) \mathcal{L}'_n(x_k)} dx.$$

Demostración

Se sigue inmediatamente de lo ya visto, pues poniendo $\Pi(x) = \prod_{i=1}^n (x - x_i)$, donde los x_i son los ceros de $\mathcal{L}_n(x)$, se tiene que

$$w_k = \int_0^{\infty} e^{-x} L_k(x) dx = \int_0^{\infty} e^{-x} \frac{\Pi(x)}{(x - x_k) \Pi'(x_k)} dx$$

y por otra parte, se desprende de la proposición anterior que $\Pi(x)$ se puede poner como

$$\Pi(x) = (-1)^n \mathcal{L}_n(x).$$

Sustituyendo esta última expresión de $\Pi(x)$ en la integral resulta el enunciado.

□

La fórmula de cuadratura de Gauss-Laguerre se expresa en la forma

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

donde los x_i son los ceros del polinomio de Laguerre de grado n , y los pesos w_i vienen dados por la fórmula de la proposición anterior.

NOTA: Los pesos de la fórmula anterior también se pueden expresar como

$$w_i = \frac{(n!)^2}{x_i [\mathcal{L}'_n(x_i)]^2}.$$

Ejemplo:

Aplique la cuadratura anterior para obtener el valor de

$$\int_0^\infty e^{-x} \operatorname{sen}(x) dx$$

y compare el resultado con el obtenido mediante otras fórmulas de cuadratura.

Ejercicio:

Utilizando un procedimiento parecido al empleado con la cuadratura de Gauss-Legendre, obtenga la fórmula del error en la cuadratura de Gauss-Laguerre

$$E_{G-L} = \frac{(n!)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\eta).$$

[Demostración:

$$\begin{aligned} E_{G-L} &= \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \int_0^\infty e^{-x} [(x - x_1) \cdots (x - x_n)]^2 dx \\ &= \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \int_0^\infty e^{-x} [\mathcal{L}_n(x)]^2 dx \\ &= \frac{f^{(2n)}(\eta) (n!)^2}{(2n)!}. \quad \square \quad] \end{aligned}$$

4.8. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Hermite.

Definición 4.8.1 Se define el polinomio de Hermite de grado n como

$$H_0(x) = 1, \quad H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}.$$

Los polinomios de Hermite son una familia ortogonal en el intervalo $(-\infty, \infty)$ con respecto a la función de peso $w(x) = e^{-x^2}$, como se pone de manifiesto en la proposición siguiente.

Proposición 4.8.1 Para $0 \leq k < n$ se tiene que

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^k H_n(x) dx = 0.$$

Demostración

Se aplica integración por partes k veces y resulta

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^k H_n(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^k (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} dx \\ &= (-1)^n x^k \left. \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (e^{-x^2}) \right]_{-\infty}^{\infty} \\ &\quad - (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} k x^{k-1} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2} dx \\ &= \dots \\ &= (-1)^n (-1)^k k! \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^{n-k}}{dx^{n-k}} e^{-x^2} dx = 0. \quad \square \end{aligned}$$

Proposición 4.8.2 Se tiene que

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^n H_n(x) dx = n! \sqrt{\pi}.$$

Demostración

Tomando $k = n$ en la proposición anterior podemos poner

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^n H_n(x) dx &= n! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \\
 &= 2n! \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx \\
 &= 2n! \int_0^{\infty} \frac{1}{2} t^{-1/2} e^{-t} dt \\
 &= n! \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = n! \sqrt{\pi}. \quad \square
 \end{aligned}$$

Proposición 4.8.3 *Se verifica que*

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} [H_n(x)]^2 dx = 2^n n! \sqrt{\pi}.$$

Demostración

Considerando sólo el término de mayor grado de $H_n(x)$, pues debido a la ortogonalidad, la contribución de los siguientes sumandos al valor de la integral será cero, podemos poner

$$H_n(x) = 2^n x^n + \dots$$

y entonces se tiene según el resultado anterior que

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} [H_n(x)]^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} 2^n x^n H_n(x) dx = 2^n n! \sqrt{\pi}. \quad \square$$

Corolario 4.8.1 *Los pesos de la fórmula de cuadratura de Gauss-Hermite se pueden expresar en la forma*

$$w_k = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \frac{\mathcal{L}_n(x)}{(x - x_k) \mathcal{L}'_n(x_k)} dx.$$

Demostración

Se sigue inmediatamente de lo ya visto, pues poniendo $\Pi(x) = \prod_{i=1}^n (x - x_i)$, donde los x_i son los ceros de $H_n(x)$, se tiene que

$$w_k = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} L_k(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \frac{\Pi(x)}{(x - x_k) \Pi'(x_k)} dx$$

y por otra parte, se desprende de la proposición anterior que $\Pi(x)$ se puede poner como

$$\Pi(x) = 2^{-n} H_n(x).$$

Sustituyendo esta última expresión de $\Pi(x)$ en la integral resulta el enunciado.

□

La fórmula de cuadratura de Gauss-Hermite se expresa en la forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

donde los x_i son los ceros del polinomio de Hermite de grado n , y los pesos w_i vienen dados por la fórmula de la proposición anterior.

NOTA: Los pesos de la fórmula anterior también se pueden expresar como

$$w_i = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{[H_n'(x_i)]^2}.$$

Ejemplo:

Aplique la cuadratura de Gauss-Hermite para obtener el valor de

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \operatorname{sen}^2(x) dx$$

y compare el resultado con el obtenido mediante otras fórmulas de cuadratura.

Ejercicio:

Utilizando un procedimiento parecido al empleado con la cuadratura de Gauss-Legendre, obtenga la fórmula del error en la cuadratura de Gauss-Hermite

$$E_{G-H} = \frac{n! \sqrt{\pi}}{2^n (2n)!} f^{(2n)}(\eta).$$

[Demostración:

$$\begin{aligned}
 E_{G-H} &= \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} [(x-x_1)\cdots(x-x_n)]^2 dx \\
 &= \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} 2^{-2n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} [H_n(x)]^2 dx \\
 &= \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} 2^{-2n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} 2^n x^n H_n(x) dx \\
 &= \frac{f^{(2n)}(\eta) n! \sqrt{\pi}}{(2n)! 2^n}. \quad \square \quad]
 \end{aligned}$$

4.9. Cambio del intervalo de integración.

Dada una determinada fórmula de cuadratura extendida a un intervalo y con grado de precisión m , podemos deducir la expresión para otro intervalo cualquiera sin más que considerar una transformación lineal. En efecto, supongamos que se dispone de una fórmula de cuadratura con grado de precisión m dada por

$$\int_c^d f(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n c_i f(x_i),$$

(nótese que en el integrando no hemos incluido la función de peso intencionadamente), pero se quiere calcular la integral en otro intervalo $[a, b]$. Consideramos la transformación lineal

$$\Phi(t) = a + \frac{t-c}{d-c}(b-a),$$

y poniendo $x = \Phi(t)$, la fórmula de cambio de variable en la integral definida permite concluir que

$$\int_a^b f(x) dx = \int_c^d f(\Phi(t))\Phi'(t) dt \simeq \frac{b-a}{d-c} \sum_{i=1}^n c_i f\left(a + \frac{x_i-c}{d-c}(b-a)\right),$$

de manera que si $f(x)$ es un polinomio de grado $\leq m$, como $\Phi(t)$ es lineal, $f(\Phi(t))$ también será un polinomio de grado $\leq m$ y la nueva fórmula tendrá también grado de precisión m .

Ejemplo:

Halle el valor de la integral

$$\int_0^{\pi/2} \frac{\cos(x)}{1+x} dx$$

utilizando distintas fórmulas de cuadratura gaussiana, después de realizar los cambios de variable adecuados.

4.10. Actividades complementarias.

- Si una función tabulada $f(x)$ se supone que tiene un comportamiento exponencial, entonces se puede poner $f(x) = \lambda e^{\alpha x}$. A partir de los dos puntos extremos de la tabla, $(a, f(a))$, y $(b, f(b))$, se pueden determinar los valores de las constantes λ y α . La fórmula de Liday se utiliza entonces para aproximar la integral y se expresa en la forma

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \frac{(b-a)(f(b) - f(a))}{Ln(f(b)) - Ln(f(a))}.$$

Estudie el error que se comete con esta fórmula y aplíquela en casos concretos.

- La función $Ln(x)$ no está acotada cuando $x \rightarrow 0^+$, por lo que las fórmulas de Newton-Cotes pueden tener dificultades para aproximar el valor de la integral. Utilice otras aproximaciones para resolver una integral de la forma

$$\int_0^1 f(x) Ln(x) dx$$

- considere la función de peso $w(x) = -Ln(x)$ y obtenga una familia de polinomios ortogonales $\{\psi_i\}_{i=0}^n$ en $[0, 1]$ respecto de esta función de peso, y a partir de ellos, una fórmula de integración numérica.
- aproxime $f(x)$ por un polinomio de interpolación y luego utilice el hecho de que la integral $\int_0^1 x^m Ln(x) dx$ se puede obtener de forma exacta, para obtener una fórmula de integración.

Compare las aproximaciones anteriores con otras fórmulas aplicables como las fórmulas de Gauss o las fórmulas abiertas de Newton-Cotes. Aplíquelo para resolver ejemplos concretos, como $\int_0^1 \sin(x) Ln(x) dx$.

4.11. Bibliografía.

Bibliografía básica.

- [Aubanell, A., Benseny, A. y Delshams, A. : 1993]: un buen compendio de métodos numéricos.
- [Burden, R. L. y Faires, J. D. : 1998]: el capítulo 4 presenta un desarrollo del tema adecuado, junto con temas sobre integrales impropias y múltiples.
- [Gasca, M. : 1990]: un libro muy didáctico. Con problemas resueltos.
- [Gerald, C. F. and Wheatley, P. O. : 2000]: tratamiento básico del tema.
- [Infante, J. A. y Rey, J. M. : 2002]: el capítulo 7 contiene variados problemas sobre el tema incluyendo algunos de carácter teórico.
- [Phillips, G. M., Taylor, P. J. : 1996]: se ocupa poco de la integración gaussiana. Desarrolla particularmente la cuadratura de Gauss-Chebyshev.
- [Ralston, A. and Rabinowitz, P. : 2001]: el capítulo 4 detalla particularmente la cuadratura gaussiana.
- [Rodríguez, F. J. : 2003]: lo más interesante son los ejemplos numéricos desarrollados minuciosamente.
- [Scheid, F. : 1972]: un libro clásico que presenta los temas a través de problemas.
- [Scheid, F. y Constanzo, R. E.]: una versión del anterior con resúmenes didácticos.
- [Süli, E. : 2006]: una presentación adecuada del tema incluyendo las fórmulas de Radau y Lobatto.

Bibliografía complementaria.

- [Carnahan, B., Luther, H. A. and Wilkes, J. O. : 1979]: presenta numerosas fórmulas y ejemplos numéricos así como ejemplos de aplicaciones.
- [Davis, P. J. and Rabinowitz, P. : 1984]: un clásico sobre el tema.

Capítulo 5

Ecuaciones en diferencias.

5.1. Generalidades y motivación.

Las ecuaciones en diferencias aparecerán en los temas dedicados a la resolución numérica de ecuaciones diferenciales, por lo que es conveniente realizar un estudio de las mismas, y esa es la razón de dedicarles un capítulo. Naturalmente, tienen interés en sí mismas pero quizá su mayor utilidad es que permiten modelizar fenómenos dinámicos discretos, y en este sentido poseen aplicaciones en el estudio de procesos económicos, evolución de poblaciones, etcétera (recuérdese el famoso problema de los conejos de Fibonacci).

En estos problemas donde intervienen las ecuaciones en diferencias se analiza una situación dada y se expresa el resultado y_{k+n} asociado a un entero $k+n$ en relación con los resultados asociados a ciertos enteros menores que $k+n$, es decir, $k, k+1, \dots, k+n-1$, obteniendo así una relación de recurrencia.

Definición 5.1.1 *Una ecuación en la que aparece una función desconocida, y , evaluada en dos o más puntos x_j se llama una **ecuación en diferencias** (o ecuación de traslación) y una sucesión $\{y_k\}_{k \in \mathbb{Z}}$ que cumpla la ecuación se dice que es una **solución de la ecuación en diferencias**.*

Definición 5.1.2 *El **orden** de una ecuación en diferencias es la diferencia entre los valores de dos subíndices, el más grande y el más pequeño que aparecen en ella.*

NOTA. En general, los valores y_k consideraremos que son números complejos, y que la función y está definida sobre un conjunto discreto de argumentos x_k donde $k \in \mathbb{Z}$ (o bien $k \in \mathbb{N}$).

Ejemplo:

Obtenga las soluciones de la ecuación $y_{k+1} = y_k + 1$.

Así, una relación de la forma

$$F(y_k, y_{k+1}) = 0, \quad k \in \mathbb{Z} \quad (5.1)$$

se dice que es una ecuación en diferencias de orden uno, y una sucesión $\{y_k\}_{k \in \mathbb{Z}}$ que cumpla la relación (5.1) se dice que es una solución.

O bien, una relación de la forma

$$y_{k+n} = F(y_{k+n-1}, \dots, y_k), \quad k \in \mathbb{Z}$$

diremos que es una ecuación en diferencias de orden n .

Ejemplo:

La sucesión $y_n = n!$ es una solución de la ecuación en diferencias $y_{n+1} = (n + 1)y_n$. Pero también cualquier sucesión de la forma $y_n = \lambda n!$ es solución.

La naturaleza de las ecuaciones en diferencias permite que las sucesiones solución se calculen de manera recursiva. Así, dada la ecuación $y_{n+1} = a_n y_n + b_n$, donde $\{a_n\}$ y $\{b_n\}$ son sucesiones conocidas, si se conoce el valor y_1 se podrán calcular todos los demás. No obstante, resulta deseable encontrar fórmulas cerradas que expresen el estado y_k en términos de k y de los valores iniciales. Veremos sin embargo, que ello no es siempre posible, salvo en casos muy particulares.

Definición 5.1.3 *Para una ecuación de primer orden un problema de valores iniciales consiste en encontrar la solución tal que el primer valor de la misma, y_1 , sea un valor dado, que se llama la condición inicial (como en el caso de las ecuaciones diferenciales).*

En general, para una ecuación en diferencias de orden n un problema de valores iniciales necesitará conocer n condiciones iniciales.

Como vemos hay una gran analogía entre la terminología de las ecuaciones en diferencias y de las ecuaciones diferenciales. Y también ocurre en las cuestiones

teóricas.

Así por ejemplo, para la ecuación en diferencias lineal homogénea $y_{n+2} + a_1 y_{n+1} + a_2 y_n = 0$ si u_n, v_n son dos soluciones de la ecuación entonces la solución general es de la forma $y_n = c_1 u_n + c_2 v_n$ donde c_1, c_2 son dos constantes arbitrarias.

O bien se puede aplicar el principio de superposición (igual que en las ecuaciones diferenciales ordinarias) para obtener que si y_{1n} es una solución de la ecuación $y_{n+2} + a_1 y_{n+1} + a_2 y_n = b_1$ y si y_{2n} es solución de la ecuación $y_{n+2} + a_1 y_{n+1} + a_2 y_n = b_2$ entonces $y_{1n} + y_{2n}$ es solución de $y_{n+2} + a_1 y_{n+1} + a_2 y_n = b_1 + b_2$.

Pero, ¿dónde están las diferencias?. Veamos un ejemplo.

Ejemplo:

La ecuación $y_{n+1} = a_n y_n + b_n$ se puede escribir en la forma

$$\Delta y_n = (a_n - 1) y_n + b_n,$$

utilizando el operador en diferencias progresivas que hemos visto anteriormente.

En general, una ecuación de orden n puede escribirse utilizando $n + 1$ términos consecutivos, $y_m, y_{m+1}, \dots, y_{m+n}$, (nótese que no importa cómo llamemos a los subíndices), o bien, en términos de y_m y de las diferencias progresivas en ese valor, $\Delta y_m, \dots, \Delta^n y_m$. El nombre de ecuaciones en diferencias proviene de esta notación aunque no siempre se expresan en esta forma (pueden usarse otros operadores para tal propósito).

La proposición que sigue permite expresar los términos y_{m+k} utilizando las diferencias progresivas.

Proposición 5.1.1 *El término y_{m+k} con $k \in \mathbb{N}$ puede ponerse en la forma*

$$y_{m+k} = \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} \Delta^j y_m.$$

Demostración

Puede demostrarse por inducción sobre k , pero utilizaremos la teoría de operadores que vimos en el capítulo de la interpolación, con lo que se obtiene el resultado de manera inmediata.

$$\begin{aligned}
y_{m+k} &= E^k y_m = (Id + \Delta)^k y_m \\
&= \binom{k}{0} y_m + \binom{k}{1} \Delta y_m + \dots + \binom{k}{k} \Delta^k y_m \\
&= \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} \Delta^j y_m. \quad \square
\end{aligned}$$

No obstante, no siempre será conveniente expresar las ecuaciones con esta notación. Usualmente se escriben de manera directa en términos de los valores y_k, y_{k+1}, \dots

Ejemplo:

Expresa la sucesión de Fibonacci, dada por

$$y_{m+2} = y_m + y_{m+1}, \quad y_1 = 1, y_2 = 1,$$

utilizando el operador de diferencias progresivas.

[Solución: utilizando la proposición anterior se puede poner como $(\Delta^2 + \Delta - 1)y_m = 0$, junto con los valores iniciales.]

5.2. Independencia lineal de funciones.

Definición 5.2.1 Un conjunto de n funciones, $y_1(k), \dots, y_n(k)$, donde k toma valores en un conjunto discreto, se dice que son linealmente dependientes si existen n constantes $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ no todas nulas de manera que

$$\lambda_1 y_1(k) + \dots + \lambda_n y_n(k) = 0.$$

Si no son linealmente dependientes se dice que son linealmente independientes.

Definición 5.2.2 El determinante de Casorati de las n funciones anteriores está dado por

$$C(k) = \begin{vmatrix} y_1(k) & y_2(k) & \cdots & y_n(k) \\ y_1(k+1) & y_2(k+1) & \cdots & y_n(k+1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_1(k+n-1) & y_2(k+n-1) & \cdots & y_n(k+n-1) \end{vmatrix}.$$

Este determinante desempeña un importante papel en la independencia lineal, como se recoge en el siguiente teorema.

Teorema 5.2.1 *Dadas n funciones, $y_1(k), y_2(k), \dots, y_n(k)$, se tiene que son linealmente dependientes si y sólo si el determinante de Casorati es nulo para toda k .*

Demostración

\Rightarrow) Por ser linealmente dependientes existen constantes $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ no todas nulas tales que para todo k se tiene

$$\lambda_1 y_1(k) + \cdots + \lambda_n y_n(k) = 0.$$

Podemos poner entonces

$$\begin{aligned} \lambda_1 y_1(k) + \cdots + \lambda_n y_n(k) &= 0 \\ \lambda_1 y_1(k+1) + \cdots + \lambda_n y_n(k+1) &= 0 \\ &\vdots \\ \lambda_1 y_1(k+n-1) + \cdots + \lambda_n y_n(k+n-1) &= 0 \end{aligned}$$

y procedemos por reducción al absurdo.

Si hubiera algún valor \bar{k} tal que $C(\bar{k}) \neq 0$, entonces considerando el sistema homogéneo anterior con \bar{k} en lugar de k y siendo las incógnitas $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, tendría la solución nula

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n = 0$$

en contradicción con el hecho de que no todos los λ_i eran nulos. Así pues $C(k) = 0$ para todo k .

\Leftrightarrow) Como $C(k) = 0$ para todo k el sistema de ecuaciones homogéneo dado por

$$\begin{aligned}\lambda_1 y_1(k) + \cdots + \lambda_n y_n(k) &= 0 \\ \lambda_1 y_1(k+1) + \cdots + \lambda_n y_n(k+1) &= 0 \\ &\dots \\ \lambda_1 y_1(k+n-1) + \cdots + \lambda_n y_n(k+n-1) &= 0\end{aligned}$$

tiene determinante nulo, y por tanto existe alguna solución $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ no trivial, y en particular se sigue que $y_1(k), \dots, y_n(k)$ son linealmente dependientes. \square

Definición 5.2.3 Dada la ecuación en diferencias (lineal homogénea) de orden n

$$y_{m+n} + a_1(m)y_{m+n-1} + \cdots + a_n(m)y_m = 0$$

se llama un conjunto fundamental de soluciones a n funciones, $y_1(k), \dots, y_n(k)$, linealmente independientes que son solución de la ecuación.

5.3. Ecuaciones en diferencias lineales.

Las ecuaciones en diferencias que con más frecuencia se nos presentarán son las lineales.

Definición 5.3.1 Se dice que una ecuación en diferencias de orden n es **lineal** si es de la forma

$$y_{m+n} + a_1(m)y_{m+n-1} + \cdots + a_n(m)y_m = b_m, \quad (5.2)$$

donde las $a_1(m), \dots, a_n(m)$ son n sucesiones de coeficientes, y b_m es el término no homogéneo o término independiente.

Cuando $b_m = 0$ se dice que la ecuación es homogénea.

El conjunto de sucesiones de números complejos con las operaciones usuales de suma de sucesiones y producto por un escalar es un espacio vectorial que denotaremos por \mathcal{S} . Dada la ecuación en diferencias lineal de orden n en (5.2) se considera

el operador lineal \mathcal{L} que transforma cada sucesión $\{v_m\}$ de \mathcal{S} en otra sucesión cuyo término m -ésimo está dado por

$$\mathcal{L}(v_m) = v_{m+n} + a_1(m)v_{m+n-1} + \dots + a_n(m)v_m.$$

Entonces, si consideramos la ecuación homogénea asociada a la ecuación en (5.2), es decir, ponemos $b_m = 0$, tendremos que las soluciones de esta ecuación homogénea son el núcleo de \mathcal{L} , el cual constituye un subespacio vectorial de \mathcal{S} .

Ejercicio:[lo enunciaremos como un teorema más adelante]

Pruebe que si $\{v_m\}$ y $\{u_m\}$ son dos soluciones de la ecuación lineal de orden n

$$y_{m+n} + a_1(m)y_{m+n-1} + \dots + a_n(m)y_m = b_m$$

junto con las condiciones iniciales

$$y_1 = y_{10}, \dots, y_n = y_{n0}$$

entonces son iguales. Esto, es, la solución de un problema de valores iniciales lineal es única.

El siguiente teorema nos da la clave para hallar las soluciones de la ecuación homogénea.

Teorema 5.3.1 *Dada la ecuación en diferencias de orden n homogénea*

$$y_{m+n} + a_1(m)y_{m+n-1} + \dots + a_n(m)y_m = 0,$$

y n vectores de dimensión n linealmente independientes, las soluciones de la ecuación que los tiene como condiciones iniciales son una base del conjunto de soluciones.

Demostración

Consideramos n vectores linealmente independientes dados por

$$\begin{aligned} & \{y_{11}, y_{21}, \dots, y_{n1}\}^T, \\ & \{y_{12}, y_{22}, \dots, y_{n2}\}^T, \\ & \dots \\ & \{y_{1n}, y_{2n}, \dots, y_{nn}\}^T, \end{aligned} \tag{5.3}$$

y $\{y_{j1}\}_{j \in \mathbb{N}}, \dots, \{y_{jn}\}_{j \in \mathbb{N}}$ las respectivas soluciones de los problemas de valor inicial que tienen a los vectores anteriores como condiciones iniciales. Estas soluciones son linealmente independientes, pues cogiendo una combinación lineal nula

$$\lambda_1 \{y_{j1}\} + \dots + \lambda_n \{y_{jn}\} = \{0\}$$

si nos fijamos solamente en las primeras n componentes resulta una combinación lineal de los vectores anteriores, y como aquellos eran linealmente independientes, se sigue que los $\lambda_i = 0$ para todo i .

Veamos ahora que cualquier solución de la ecuación en diferencias, $\{u_j\}_{j \in \mathbb{N}}$, se puede escribir como combinación lineal de las anteriores. El vector formado por los primeros n términos de $\{u_j\}$ será combinación lineal de los vectores en (5.3), luego existen escalares λ_i para $i = 1, \dots, n$ tales que

$$u_j = \lambda_1 y_{j1} + \dots + \lambda_n y_{jn}, \quad j = 1, \dots, n.$$

Pero entonces las sucesiones $\{u_j\}$ y $\{\lambda_1 y_{j1} + \dots + \lambda_n y_{jn}\}$ son solución del mismo problema de valor inicial y por la unicidad han de ser iguales. Esto es,

$$\{u_j\} = \{\lambda_1 y_{j1} + \dots + \lambda_n y_{jn}\}$$

para todo j . \square

Entonces, como las soluciones de la ecuación homogénea forman un espacio de dimensión n , podremos encontrar todas las soluciones hallando n de ellas que sean independientes y formando la combinación lineal. Para comprobar que las n soluciones son linealmente independientes nos basta con comprobar que los n vectores de condiciones iniciales lo son.

Ejemplo:

Considere la ecuación $y_{n+2} = y_n + y_{n+1}$ y las soluciones correspondientes a los valores iniciales $y_0 = 0, y_1 = 1$ y $y_0 = 1, y_1 = 0$. Verifique que los términos de la solución correspondiente a los valores iniciales $y_0 = 2, y_1 = 3$ se obtienen como una combinación lineal de los términos de las dos soluciones anteriores.

Teorema 5.3.2 *Dada la ecuación en diferencias de orden n*

$$y_{m+n} + a_1(m) y_{m+n-1} + \dots + a_n(m) y_m = b_m,$$

y n valores c_0, c_1, \dots, c_{n-1} , existe una única solución de la ecuación anterior, y_k , tal que

$$y_0 = c_0, y_1 = c_1, \dots, y_{n-1} = c_{n-1}.$$

Demostración

Para $m = 0$ sustituyendo los valores iniciales dados se obtiene directamente el valor de y_n ,

$$y_n = b_0 - [a_1(0) c_{n-1} + \dots + a_n(0) c_0] = c_n.$$

Para $m = 1$ sustituimos en la ecuación los valores dados de y_1, \dots, y_{n-1} junto con el valor de y_n que acabamos de obtener. De esta forma se obtiene el valor de y_{n+1} ,

$$y_{n+1} = b_1 - [a_1(1) c_n + \dots + a_n(1) c_1].$$

Y procediendo sucesivamente de esta manera se obtienen todos los términos de la sucesión solución. \square

Corolario 5.3.1 *Si una solución de la ecuación lineal de orden n homogénea se anula en n valores consecutivos, entonces es la solución nula.*

Demostración

En efecto, pues procediendo en la forma anterior, sustituyendo hacia delante o hacia atrás se obtiene que todos los términos de la sucesión son nulos. \square

Teorema 5.3.3 *Si $y_1(k), \dots, y_n(k)$ es un sistema fundamental de soluciones de la ecuación lineal homogénea, entonces cualquier otra solución es combinación lineal de aquellas.*

Demostración

Sea $y(k)$ una solución de la ecuación lineal homogénea. Por ser $y_1(k), \dots, y_n(k)$ un sistema fundamental de soluciones, son linealmente independientes y se tiene que el determinante de Casorati es distinto de cero,

$$C(k) = \begin{vmatrix} y_1(k) & y_2(k) & \cdots & y_n(k) \\ y_1(k+1) & y_2(k+1) & \cdots & y_n(k+1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_1(k+n-1) & y_2(k+n-1) & \cdots & y_n(k+n-1) \end{vmatrix} \neq 0,$$

y por tanto el sistema lineal

$$\alpha_1 y_1(k) + \cdots + \alpha_n y_n(k) = y(k)$$

$$\alpha_1 y_1(k+1) + \cdots + \alpha_n y_n(k+1) = y(k+1)$$

$$\vdots$$

$$\alpha_1 y_1(k+n-1) + \cdots + \alpha_n y_n(k+n-1) = y(k+n-1)$$

tiene una solución no trivial, $\alpha_1, \dots, \alpha_n$.

Ahora bien, como $y(k)$ y $\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i(k)$ son soluciones de la ecuación lineal, se tiene que

$$y(k) - \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i(k)$$

también es solución, y como se anula en n valores consecutivos, ha de ser la solución nula, de donde se sigue que

$$y(k) = \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i(k). \quad \square$$

Ejemplo:

Escriba una ecuación en diferencias de primer orden que tenga como solución a la familia de sucesiones dada por

$$y_k = C e^{-2k}, \quad C \text{ constante.}$$

Ejercicio:

Obtenga una ecuación en diferencias que tenga como soluciones a

$$y_1(k) = 1, y_2(k) = 2^k, y_3(k) = k 2^k, y_4(k) = k^2 2^k.$$

[Solución: si llamamos $y(k)$ a otra solución, formando el determinante de Casorati de $y(k), y_1(k), y_2(k), y_3(k), y_4(k)$ e imponiendo que sea nulo resulta la ecuación

$$8y(k) - 20y(k+1) + 18y(k+2) - 7y(k+3) + y(k+4) = 0. \quad]$$

5.4. Solución general de la ecuación en diferencias lineal no homogénea.

Teorema 5.4.1 *La solución general de una ecuación no homogénea*

$$y_{m+n} + a_1(m)y_{m+n-1} + \dots + a_n(m)y_m = b_m$$

se puede poner como la suma de una solución particular de la ecuación no homogénea más la solución general de la ecuación homogénea.

Demostración

Es inmediata pues si llamamos $\{u_j\}$ a una solución particular de la no homogénea y $\{v_j\}$ a la solución general de la homogénea, se tiene que

$$\mathcal{L}(\{u_j + v_j\}) = \mathcal{L}(\{u_j\}) + \mathcal{L}(\{v_j\}) = \{b_j\} + \{0\} = \{b_j\}. \quad \square$$

5.5. Ecuación lineal de primer orden.

Consideremos la ecuación lineal de primer orden homogénea dada por

$$y_{k+1} = a_k y_k.$$

Podemos poner

$$y_1 = a_0 y_0$$

$$y_2 = a_1 y_1 = a_1 a_0 y_0$$

$$\vdots$$

$$y_k = a_{k-1} \cdots a_0 y_0 = \left(\prod_{j=0}^{k-1} a_j \right) y_0$$

con lo que obtenemos una expresión para la solución.

Además para la ecuación homogénea se verifica el resultado siguiente.

Proposición 5.5.1 *Si $y_1(k), y_2(k)$ son dos soluciones de la ecuación anterior, entonces la combinación lineal $c_1 y_1(k) + c_2 y_2(k)$ también es solución.*

Demostración

Basta sustituir $z_k = c_1 y_1(k) + c_2 y_2(k)$ y ver que se cumple la ecuación en diferencias. \square

Según vimos anteriormente, la solución de la ecuación lineal de primer orden completa

$$y_{k+1} = a_k y_k + b_k$$

se obtiene sumando la solución general de la ecuación homogénea y una solución particular de la no homogénea. A continuación veremos cómo determinar la solución particular en distintas situaciones.

5.6. Método de coeficientes indeterminados para la ecuación lineal de primer orden no homogénea con coeficiente constante.

1. $b(k)$ es un polinomio de grado 1: $y_{k+1} - a y_k = b_0 + b_1 k$

Se busca una solución particular de la forma $y_p(k) = B_0 + k B_1$. Sustituyendo en la ecuación se obtiene que

$$B_0 = \frac{b_0}{1-a} - \frac{b_1}{(1-a)^2}, \quad B_1 = \frac{b_1}{1-a}, \quad \text{si } a \neq 1.$$

Si $a = 1$ entonces no hay ninguna solución de la forma indicada, pues

$$y_{k+1} - y_k = B_0 + (k+1)B_1 - (B_0 + k B_1) = B_1$$

es constante, luego no puede ser un polinomio de grado 1. Se considera $y_p(k) = k(B_0 + k B_1)$ y al sustituir en la ecuación se obtiene que

$$B_0 = b_0 - \frac{b_1}{2}, \quad B_1 = \frac{b_1}{2}.$$

2. $b(k)$ es un polinomio de grado n : $y_{k+1} - a y_k = b_0 + \dots + b_n k^n$

Se procede de forma parecida y se obtiene que

$$y_p(k) = \begin{cases} B_0 + B_1 k + \dots + B_n k^n, & \text{si } a \neq 1, \\ k(B_0 + B_1 k + \dots + B_n k^n), & \text{si } a = 1. \end{cases}$$

Ejemplo:

Obtenga la solución general de $y_{k+1} - a y_k = b$.

Ejemplo:

Obtenga la solución general de $y_{k+1} - y_k = 3k + 3k^2$.

3. $b(k)$ es el producto de un polinomio de grado n por α^k :

$$y_{k+1} - a y_k = (b_0 + b_1 k + \dots + b_n k^n) \alpha^k$$

Se reduce al caso anterior mediante el cambio $y_k = \alpha^k u_k$. La ecuación resultante queda

$$u_{k+1} - \frac{a}{\alpha} u_k = \frac{1}{\alpha} (b_0 + b_1 k + \dots + b_n k^n),$$

y según el caso anterior la solución se puede poner en la forma

$$y_p(k) = \begin{cases} \alpha^k (B_0 + B_1 k + \dots + B_n k^n), & \text{si } \alpha \neq a, \\ \alpha^k k (B_0 + B_1 k + \dots + B_n k^n), & \text{si } \alpha = a. \end{cases}$$

4. $b(k)$ es de la forma:

$$b(k) = a_0 \cos(wk) + b_0 \sin(wk)$$

En este caso se busca una solución particular de la forma

$$y_p(k) = A \cos(wk) + B \sin(wk)$$

y si alguno de estos sumandos fuera solución de la homogénea se considera

$$y_p(k) = k(A \cos(wk) + B \sin(wk)).$$

5. $b(k)$ es de la forma:

$$b(k) = [P_n(k) \cos(wk) + Q_m(k) \sin(wk)] \alpha^k$$

En este caso, si $\alpha \neq a$ se busca una solución particular de la forma

$$y_p(k) = \left[\tilde{P}_r(k) \cos(wk) + \tilde{Q}_r(k) \sin(wk) \right] \alpha^k,$$

siendo $r = \max\{n, m\}$.

Si $\alpha = a$ se busca una solución particular de la forma

$$y_p(k) = k \left[\tilde{P}_r(k) \cos(w k) + \tilde{Q}_r(k) \operatorname{sen}(w k) \right] \alpha^k.$$

5.7. Método de variación de parámetros para la ecuación lineal de primer orden.

El método de coeficientes indeterminados visto en el apartado anterior es de limitada aplicación. En el caso más general se utiliza un método parecido al utilizado en la resolución de ecuaciones diferenciales, buscando una solución particular donde se considera variable la constante de la solución general de la ecuación homogénea asociada.

Dada la ecuación $y_{k+1} = a_k y_k + b_k$ vimos que la solución general de la homogénea asociada era de la forma

$$y_H(k) = C \prod_{j=0}^{k-1} a_j.$$

Buscaremos entonces una solución particular de la forma

$$y_P(k) = C(k) \prod_{j=0}^{k-1} a_j.$$

Sustituyendo la solución particular buscada en la ecuación resulta

$$C(k+1) \prod_{j=0}^k a_j = a_k C(k) \prod_{j=0}^{k-1} a_j + b_k = C(k) \prod_{j=0}^k a_j + b_k$$

de donde se obtiene la ecuación

$$C(k+1) = C(k) + \frac{b_k}{\prod_{j=0}^k a_j} = C(k) + r(k).$$

Esta última ecuación es una ecuación lineal de coeficientes constantes, que se puede abordar utilizando las técnicas ya vistas. O bien se puede proceder recursivamente y poner

$$C(1) = C(0) + r(0)$$

$$C(2) = C(1) + r(1) = C(0) + r(0) + r(1)$$

$$\vdots$$

$$C(k) = C(0) + r(0) + \dots + r(k-1) = C(0) + \sum_{i=0}^{k-1} r(i)$$

con lo que resulta

$$C(k) = C(0) + \sum_{i=0}^{k-1} \frac{b_i}{\prod_{j=0}^i a_j}.$$

Como sólo estamos interesados en una solución particular podemos tomar $C(0) = 0$, con lo que la solución buscada se puede poner como

$$y_P(k) = \left(\sum_{i=0}^{k-1} \frac{b_i}{\prod_{j=0}^i a_j} \right) \prod_{j=0}^{k-1} a_j = \sum_{i=0}^{k-1} \left(\prod_{j=i+1}^{k-1} a_j \right) b_i.$$

5.8. Ecuación lineal de coeficientes constantes.

Cuando las sucesiones de coeficientes de la ecuación lineal son constantes se habla de ecuación de coeficientes constantes. En el caso de la ecuación homogénea se pueden obtener explícitamente todas las soluciones.

Para una ecuación en diferencias lineal de orden m homogénea y con coeficientes constantes

$$a_0 y_n + a_1 y_{n+1} + \dots + a_m y_{n+m} = 0$$

se consideran posibles soluciones de la forma $y_n = z^n$, y entonces la solución general de esta ecuación se obtiene a partir de la **ecuación característica asociada**

$$a_0 + a_1 z + \dots + a_m z^m = 0.$$

De manera que, si z_1, z_2, \dots, z_m son las m raíces distintas de la ecuación característica, entonces la solución de la ecuación en diferencias resulta ser de la forma

$$y_n = c_1 z_1^n + c_2 z_2^n + \dots + c_m z_m^n,$$

siendo las c_i constantes arbitrarias.

Ejemplo:

Considerando de nuevo la ecuación $y_{n+2} = y_n + y_{n+1}$ se tiene que la ecuación característica es $1 + z - z^2 = 0$ cuyas raíces son

$$z_1 = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}, \quad z_2 = \frac{1 - \sqrt{5}}{2},$$

así que la solución general es

$$y_n = A z_1^n + B z_2^n = A \left(\frac{1 + \sqrt{5}}{2} \right)^n + B \left(\frac{1 - \sqrt{5}}{2} \right)^n.$$

Para obtener una solución concreta sólo es necesario indicar quienes son los valores iniciales.

5.9. Ecuación lineal de segundo orden con coeficientes constantes.

En el caso particular de la ecuación de segundo orden

$$y_{k+2} + a_1 y_{k+1} + a_2 y_k = 0$$

las soluciones de la ecuación característica $r^2 + a_1 r + a_2 = 0$ son

$$r = \frac{-a_1 \pm \sqrt{a_1^2 - 4a_2}}{2},$$

de manera que hay tres posibilidades.

1. $a_1^2 > 4a_2$:

En este caso hay dos soluciones reales, r_1, r_2 , y la solución general de la ecuación en diferencias se escribe

$$y_k = c_1 r_1^k + c_2 r_2^k.$$

2. $a_1^2 = 4 a_2$:

Ahora sólo hay una solución real doble, r . En este caso r^k y $k r^k$ son un conjunto fundamental de soluciones, y la solución general es

$$y_k = c_1 r^k + c_2 k r^k .$$

3. $a_1^2 < 4 a_2$:

Se tienen dos raíces complejas, $r e^{\pm i\theta}$, y un sistema fundamental de soluciones es el dado por

$$u_k = r^k \cos(k\theta), \quad v_k = r^k \operatorname{sen}(k\theta) .$$

La solución general está dada por

$$y_k = c_1 u_k + c_2 v_k .$$

5.10. Método de variación de parámetros para la ecuación lineal de orden n .

Conocido un sistema fundamental de soluciones de la ecuación homogénea

$$y_{m+n} + a_1(m)y_{m+n-1} + \dots + a_n(m)y_m = 0 ,$$

el método de variación de parámetros visto anteriormente también se puede utilizar para obtener una solución particular, $y_P(k)$, de la ecuación no homogénea

$$y_{m+n} + a_1(m)y_{m+n-1} + \dots + a_n(m)y_m = b_m .$$

Si denotamos por $y_1(k) \dots, y_n(k)$ un sistema fundamental de soluciones, buscaremos funciones $C_i(k)$ para que

$$y_P(k) = C_1(k) y_1(k) + C_2(k) y_2(k) + \dots + C_n(k) y_n(k)$$

sea solución de la ecuación no homogénea.

Imponiendo que

$$\sum_{i=1}^n \Delta C_i(k) y_i(k+j) = 0, \quad j = 1 \dots, n-1$$

y sustituyendo los valores resultantes de $y_P(k), y_P(k+1), \dots, y_P(k+n)$ en la ecuación lineal no homogénea resulta

$$\sum_{i=1}^n \Delta C_i(k) y_i(k+n) = b(k).$$

Se obtiene así un sistema de ecuaciones lineales en los $\Delta C_i(k)$

$$\begin{aligned} \Delta C_1(k) y_1(k+1) + \dots + \Delta C_n(k) y_n(k+1) &= 0 \\ &\vdots \\ \Delta C_1(k) y_1(k+n-1) + \dots + \Delta C_n(k) y_n(k+n-1) &= 0 \\ \Delta C_1(k) y_1(k+n) + \dots + \Delta C_n(k) y_n(k+n) &= b(k) \end{aligned}$$

que resuelto, conduce a un sistema lineal de ecuaciones en diferencias de primer orden, de donde se obtienen las funciones $C_i(k)$.

Ejemplo:

Dada la ecuación $y_{k+2} - 3y_{k+1} + 2y_k = 4^k + 3k^2$, un sistema fundamental de soluciones de la ecuación homogénea viene dado por $y_1(k) = 2^k, y_2(k) = 1$.

Se considera una solución particular de la forma $y_P(k) = C_1(k) 2^k + C_2(k)$ y se obtiene el sistema

$$\Delta C_1(k) 2^{k+1} + \Delta C_2(k) = 0$$

$$\Delta C_1(k) 2^{k+2} + \Delta C_2(k) = 4^k + 3k^2$$

de donde se obtiene que

$$\Delta C_1(k) = 2^{k-1} + 3 \frac{1}{2^{k+1}} k^2$$

$$\Delta C_2(k) = -4^k - 3k^2.$$

Y resolviendo estas últimas ecuaciones en diferencias se obtienen los valores de $C_1(k)$ y de $C_2(k)$.

5.11. Introducción a los sistemas de ecuaciones en diferencias lineales.

Un sistema de dos ecuaciones en diferencias lineal se puede expresar en la forma

$$X(k+1) = A(k)X(k) + B(k)$$

donde $A(k)$ es una matriz 2×2 de la forma

$$A(k) = \begin{pmatrix} a_{11}(k) & a_{12}(k) \\ a_{21}(k) & a_{22}(k) \end{pmatrix}$$

y $X(k), B(k)$ son vectores dados por

$$X(k) = \begin{pmatrix} x_1(k) \\ x_2(k) \end{pmatrix}, \quad B(k) = \begin{pmatrix} b_1(k) \\ b_2(k) \end{pmatrix}.$$

Las soluciones de esta ecuación son pues sucesiones de \mathbb{R}^2 .

Para la **ecuación homogénea**, $X(k+1) = A(k)X(k)$ se tiene que si $W(k)$ y $V(k)$ son soluciones, entonces cualquier elemento de la familia biparamétrica dada por

$$\alpha W(k) + \beta V(k)$$

también es solución. Además la solución se puede obtener de forma recursiva poniendo

$$\begin{aligned} X(1) &= A(0)X(0) \\ X(2) &= A(1)X(1) = A(1)A(0)X(0) \\ &\vdots \\ X(k) &= A(k-1) \cdots A(0)X(0). \end{aligned}$$

En el caso particular en que la matriz sea constante, $A(k) = A$, se tiene que la solución de la ecuación homogénea es $X(k) = A^k X(0)$.

Para obtener la potencia de la matriz con más facilidad ponemos $X(k) = PY(k)$, siendo P una matriz 2×2 no singular. Entonces la ecuación se puede expresar en la forma

$$PY(k+1) = APY(k)$$

de donde llamando $B = P^{-1}AP$, resulta

$$Y(k+1) = P^{-1}APY(k) = BY(k)$$

y por tanto la solución es $Y(k) = B^k Y(0)$, es decir,

$$X(k) = P B^k Y(0) = P B^k P^{-1} X(0).$$

Para las matrices 2×2 tenemos tres posibles casos según sean los valores propios.

1. Dos valores propios reales distintos.

Sean λ_1, λ_2 dos valores propios distintos de valores propios v_1, v_2 . Se puede poner

$$A = P B P^{-1}, \quad \text{siendo } B = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{pmatrix},$$

y la solución queda

$$X(k) = P \begin{pmatrix} \lambda_1^k & \\ & \lambda_2^k \end{pmatrix} P^{-1} X(0).$$

2. Un valor propio doble λ , siendo A no diagonal.

En este caso A es semejante a una matriz B de la forma

$$B = \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ & \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & \\ & \lambda \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ & 0 \end{pmatrix} = S + N,$$

y se tiene que

$$B^k = S^k + k S^{k-1} N = \begin{pmatrix} \lambda^k & k \lambda^{k-1} \\ 0 & \lambda^k \end{pmatrix}.$$

Así que la solución se expresa en la forma

$$X(k) = P \begin{pmatrix} \lambda^k & k \lambda^{k-1} \\ 0 & \lambda^k \end{pmatrix} P^{-1} X(0),$$

donde P es la matriz formada por los dos vectores columna V_1, V_2 , siendo V_2 un vector no nulo que no es vector propio de A , y V_1 otro vector tal que $V_1 = (A - \lambda Id) V_2$.

3. Dos valores propios complejos conjugados $\lambda = a \pm ib$.

En este caso se tiene que

$$P^{-1} A P = B = \begin{pmatrix} a & b \\ -b & a \end{pmatrix}$$

siendo $P = \begin{pmatrix} \operatorname{Rea}(W) & \operatorname{Img}(W) \end{pmatrix}$ donde W es un vector propio de valor propio $\lambda = a + ib = r \cos \theta + i \operatorname{sen} \theta$. Las potencias de B son de la forma

$$B^k = r^k \begin{pmatrix} \cos \theta & \operatorname{sen} \theta \\ -\operatorname{sen} \theta & \cos \theta \end{pmatrix}^k = r^k \begin{pmatrix} \cos(k\theta) & \operatorname{sen}(k\theta) \\ -\operatorname{sen}(k\theta) & \cos(k\theta) \end{pmatrix}.$$

La solución se puede poner en la forma

$$X(k) = P \begin{pmatrix} r^k \cos(k\theta) & r^k \operatorname{sen}(k\theta) \\ -r^k \operatorname{sen}(k\theta) & r^k \cos(k\theta) \end{pmatrix} P^{-1} X(0).$$

5.12. Actividades complementarias.

- El método de Horner permite obtener el valor de una función polinómica en un punto de una manera eficiente. Consiste en expresar el polinomio en la forma

$$c_n + x \left[c_{n-1} + x \left[c_{n-2} + x \left[\dots x(c_1 + x c_0) \dots \right] \right] \right],$$

con lo cual se requieren n operaciones de adición/sustracción y n multiplicaciones. Obtenga una ecuación en diferencias junto con un valor inicial de manera que al aplicar la recurrencia n veces se obtenga el valor del polinomio.

- Dada una ecuación polinómica

$$a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_n = 0, \quad (a_0 \neq 0),$$

que tiene las raíces distintas y una raíz única de módulo máximo, esta puede calcularse a partir de una ecuación en diferencias. Podemos considerar la ecuación en diferencias de orden n

$$a_0 y_{n+i} + a_1 y_{n+i-1} + \dots + a_n y_i = 0, \quad (a_0 \neq 0),$$

cuya ecuación característica es precisamente la ecuación polinómica anterior. Entonces, si x_1, x_2, \dots, x_n son las n raíces de la ecuación característica, y se verifica que

$$|x_1| > |x_2| \geq \dots \geq |x_n|$$

entonces se tiene que

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \frac{y_{i+1}}{y_i} = x_1.$$

Este método se conoce como método de Bernoulli. Estudie su aplicabilidad para hallar la raíz de menor módulo, o las raíces complejas. ¿Podría aplicarse para hallar la segunda raíz de módulo mayor, x_2 ? Estudie si los valores iniciales y_0, y_1, \dots, y_{n-1} pueden elegirse de alguna manera que resulte más idónea.

5.13. Bibliografía.

Bibliografía básica.

- [Gasca, M. : 1990]: dedica dos temas de la Unidad Didáctica 6 a las ecuaciones en diferencias, previos a los temas de resolución numérica de ODEs.
- [Isaacson, E. and Keller, H. B. : 1966]: en el capítulo 8 se aborda el tema con la profundidad necesaria.
- [Phillips, G. M., Taylor, P. J. : 1996]: el capítulo 13 presenta una introducción básica del tema.
- [Sanz-Serna, J. M. : 1998]: el capítulo 8 presenta una introducción adecuada del tema.
- [Smith, W. A. : 1988]: el capítulo 10 presenta una introducción

Bibliografía complementaria.

- [Fernández, C., Vázquez, F. J. y Vegas, J. M. : 2003]: aborda con cierta profundidad el tema.
- [Henrici, P. : 1962]: en distintas partes aborda cuestiones relativas al tema.
- [Mickens, R. : 1987]: un monográfico sobre el tema con numerosas aplicaciones.
- [Takahashi, T. : 1990]: un libro sobre el particular con aplicaciones diversas.

Capítulo 6

Problemas de valor inicial. El método de Euler.

6.1. El problema de Cauchy. Planteamiento de la resolución numérica.

Supondremos dada una ecuación diferencial en forma normal (escalar o vectorial) junto con una condición inicial, (**problema de valor inicial, P.V.I., o problema de Cauchy**) que tiene una solución única:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0. \end{cases} \quad (6.1)$$

Teorema 6.1.1 (*Teorema de existencia y unicidad de soluciones*): si f es continua en $\{(x, y) \mid a \leq x \leq b, y \in \mathbb{R}^n\}$ con a, b finitos y existe una constante L tal que

$$\|f(x, y_1) - f(x, y_2)\| \leq L \|y_1 - y_2\|$$

para todo $x \in [a, b]$ e $y_1, y_2 \in \mathbb{R}^n$, entonces para cada $x_0 \in [a, b]$ y cada $y_0 \in \mathbb{R}^n$ existe una sola función $y(x) \in C^1[a, b]$ que es solución del problema de valor inicial en (6.1).

Demostración

[véase Henrici, p. 15] □

Ejemplo: [solución única]

$$\begin{cases} y' = 1 - 2xy \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

Ejemplo: [más de una solución, $y_1(x) = 0$, $y_2(x) = \frac{x^2}{4}$]

$$\begin{cases} y' = \sqrt{|y|} \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

Ejemplo: [solución no acotada, $y(x) = \operatorname{tg}(x + \frac{\pi}{4})$]

$$\begin{cases} y' = 1 + y^2 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

Teorema 6.1.2 (*Dependencia continua del valor inicial*) *En las condiciones del teorema anterior, si $y(x; s)$ es la solución del P.V.I. en (6.1) con valor inicial $y(x_0) = s$, entonces para todo $x \in [a, b]$ se cumple que*

$$\|y(x; s_1) - y(x; s_2)\| \leq \|s_1 - s_2\| e^{L(x-x_0)}.$$

Demostración

$$\begin{aligned} \|y(x; s_1) - y(x; s_2)\| &= \left\| s_1 + \int_{x_0}^x f(t, y(t; s_1)) dt \right. \\ &\quad \left. - \left(s_2 + \int_{x_0}^x f(t, y(t; s_2)) dt \right) \right\| \\ &\leq \|s_1 - s_2\| + L \int_{x_0}^x \|y(t; s_1) - y(t; s_2)\| dt \end{aligned}$$

Si llamamos $g(x)$ a la parte derecha de la desigualdad, se tiene que $g'(x) = L \|y(x; s_1) - y(x; s_2)\|$, por lo que podemos poner

$$g'(x) \leq L g(x).$$

Multiplicando esta última desigualdad por $e^{-L(x-x_0)}$ se obtiene que

$$\frac{d}{dx} (g(x) e^{-L(x-x_0)}) \leq 0$$

así que la función decrece, y podemos poner

$$g(x) e^{-L(x-x_0)} \leq g(x_0)$$

es decir,

$$g(x) \leq g(x_0) e^{L(x-x_0)} = \|s_1 - s_2\| e^{L(x-x_0)}.$$

Combinando este último resultado con la desigualdad inicial resulta el enunciado.

□

NOTA:

Si en el teorema anterior cambiamos $y(x; s_1)$ por $y_1(x; s)$ e $y(x; s_2)$ por $y_2(x; s)$, procediendo de manera parecida, se puede demostrar la unicidad del problema de valor inicial en (6.1).

OBJETIVO:

Elegido un conjunto de puntos de la forma $x_n = a + nh$, $n = 0, \dots, N$ siendo $h = (b - a)/N$ la *longitud del paso*, que supondremos constante, pretendemos encontrar una sucesión de valores $\{y_n\}_{n=0}^N$ que aproximen a la solución $y(x)$ en los puntos $\{x_n\}_{n=0}^N$ (**solución discreta**).

Limitación de los métodos numéricos:

Además de exigir que el problema tenga solución única, podemos encontrar otras dificultades. Si el término $e^{L(x-x_0)}$ del teorema anterior se hace grande, una resolución numérica del problema de valor inicial puede propagar los errores de manera desastrosa amplificados por el factor exponencial.

Ejemplo:

$$\begin{cases} y' = 3(y - \operatorname{sen} x) + \cos x, & x \in [0, 2\pi] \\ y(0) = s, \end{cases}$$

Se tiene que

$$y(x; 0) = \operatorname{sen} x \quad y(x; \epsilon) = \operatorname{sen} x + \epsilon e^{3x},$$

pero

$$|y(2\pi; \epsilon) - y(2\pi; 0)| = |\epsilon| e^{6\pi} \simeq |\epsilon| 10^8.$$

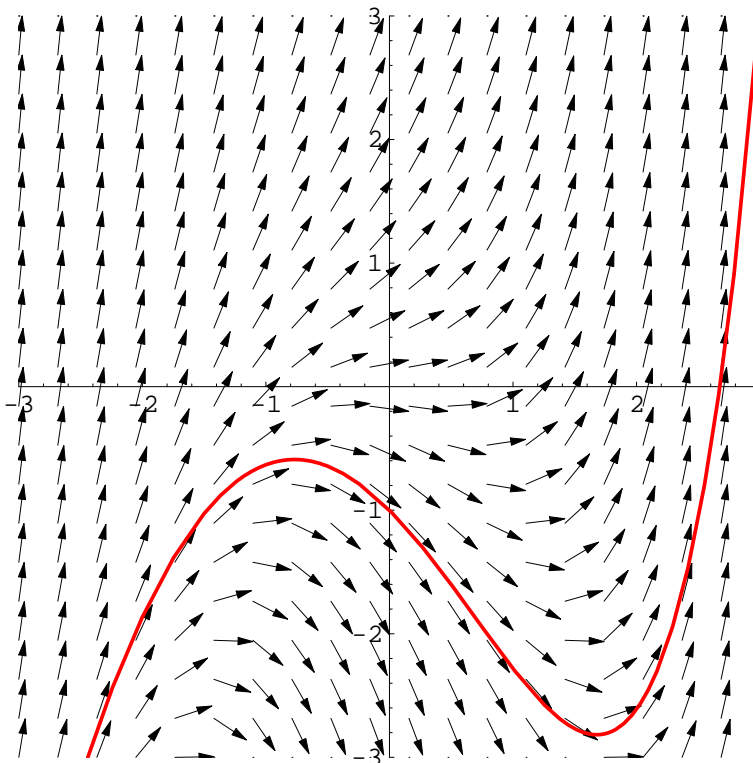
De manera, que aunque el método numérico fuese exacto, un error inicial de magnitud 10^{-8} daría lugar a una solución incorrecta.

6.2. El método de Euler y el campo de pendientes.

Si interpretamos la solución del P.V.I. en (6.1) como una función cuya gráfica pasa por el punto (x_0, y_0) y tiene una pendiente igual a $f(x_0, y_0)$ esto sugiere una aproximación gráfica a la solución del P.V.I.. Considerando un pequeño intervalo $[x_0, x_0 + h]$ y la pendiente en el punto de partida, una solución aproximada vendrá dada por

$$y_a(x) = y_0 + h f(x_0, y_0)$$

y si h es suficientemente pequeño esta solución no debería alejarse mucho de la solución exacta $y(x)$, puesto que localmente la recta tangente está cerca de la curva. Repitiendo el proceso a lo largo del intervalo de integración se obtiene una solución discreta del problema

Campo de pendientes $y' = y + x^2$.

6.3. El método de Euler.

Desarrollando $y(x_n + h)$ en serie de Taylor en torno a x_n resulta:

$$y(x_n + h) = y(x_n) + h y'(x_n) + \frac{h^2}{2} y''(\xi_n), \quad \xi_n \in (x_n, x_n + h).$$

Sustituyendo los valores $y(x_n + h)$, $y(x_n)$ por sus aproximaciones numéricas, teniendo en cuenta la ecuación diferencial en (6.1), y despreciando el término de error se obtiene el **Método de Euler**:

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n).$$

Geoméricamente y_{n+1} se obtiene cortando la recta que pasa por el punto (x_n, y_n) y que tiene pendiente $y'(x_n)$ con la recta vertical que pasa por x_{n+1} .

Hay otras formas de obtener el método, a partir de la aproximación de la derivada, o de la integral.

Ejemplo:

Aplíquese el método de Euler para obtener la solución en $[0, 5]$ del problema

$$\begin{cases} y' = 1 - 2xy \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

Ejemplo:

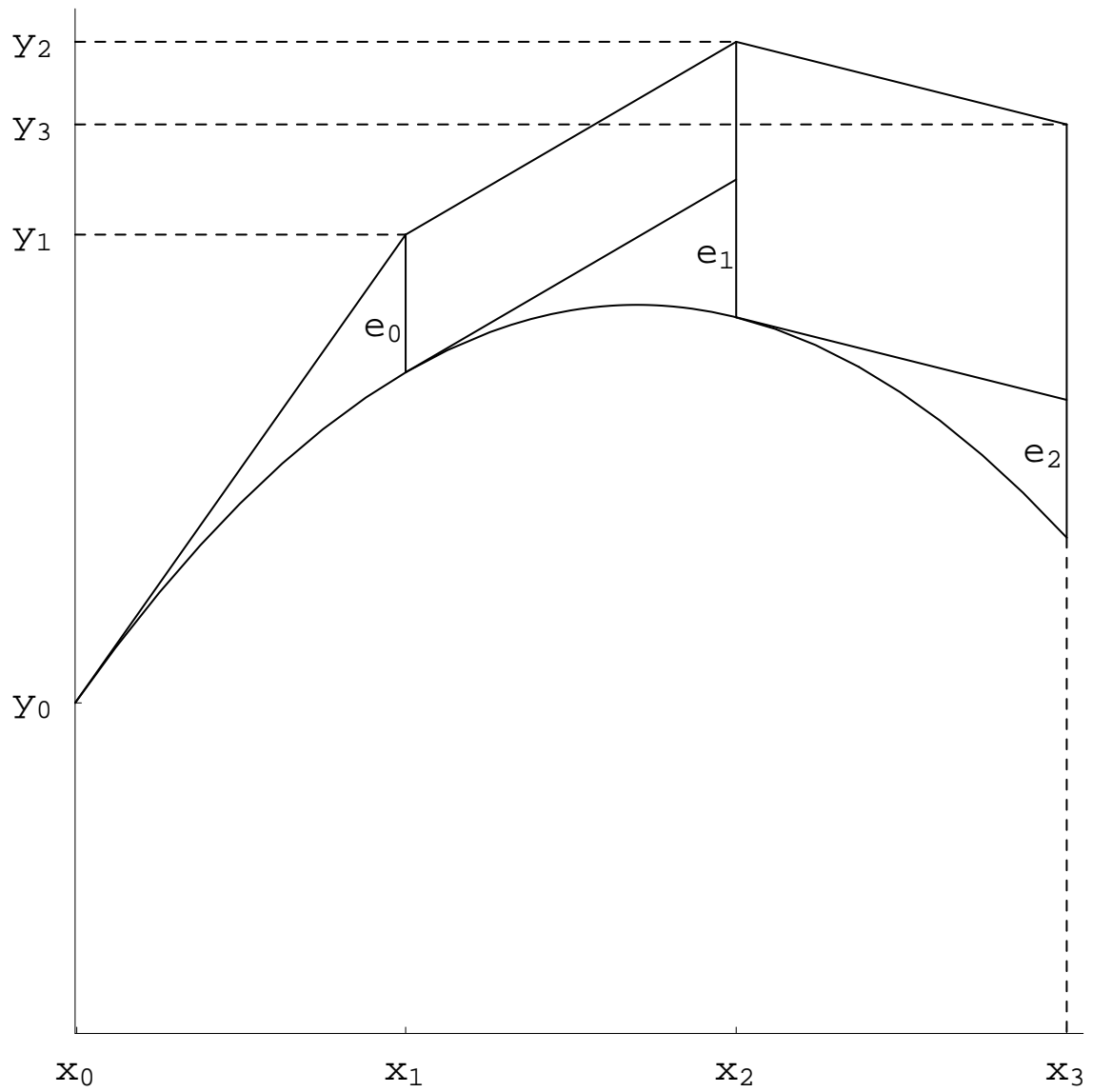
Aplíquese el método de Euler para obtener en $[0, 1]$ la solución del problema

$$\begin{cases} y' = -100y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

Ejemplo:

Aplíquese el método de Euler para obtener en $[0, 1/2]$ la solución del problema

$$\begin{cases} y' = x^2 + y^2 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$



Interpretación gráfica del Método de Euler

6.4. Estudio de los errores.

En general, un **método numérico de un paso** para resolver el P.V.I. en (6.1) se puede escribir por medio de la ecuación en diferencias

$$y_{n+1} = y_n + h \Phi_f(y_n; x_n, h),$$

donde Φ_f es una función continua que depende de las variables a través de f .

El **error global** del método en cada nodo de la red se define como la diferencia entre el valor real y el valor aproximado,

$$d_n = y(x_n) - y_n, \quad n = 0, 1, \dots, N.$$

El **error de truncamiento local** en el intervalo $[x_n, x_{n+1}]$ se define como

$$e_n = y(x_{n+1}) - [y(x_n) + h \Phi_f(y(x_n); x_n, h)].$$

Una medida de lo ajustado de la aproximación numérica obtenida nos la da el mayor error cometido

$$\max_{1 \leq n \leq N} \|y(x_n) - y_n\|.$$

Definición 6.4.1 *Se dice que el método numérico es **convergente de orden p** si para todo P.V.I. como en (6.1) con solución suficientemente regular, se tiene que*

$$\max_{1 \leq n \leq N} \|y(x_n) - y_n\| = \mathcal{O}(h^p)$$

para $h \rightarrow 0^+$ suponiendo que $\|y(x_0) - y_0\| = \mathcal{O}(h^p)$.

Los errores locales del método de Euler están dados por

$$e_n = y(x_{n+1}) - y(x_n) - h f(x_n, y(x_n)),$$

lo cual se puede expresar en la forma

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h f(x_n, y(x_n)) + e_n,$$

así que e_n se puede interpretar como el error con que la solución teórica satisface la ecuación aproximada de Euler (también se llama **error de discretización**), es decir, lo que le falta a la solución teórica para satisfacer la ecuación del método.

En el caso del método de Euler, desarrollando por Taylor en el punto x_n y teniendo en cuenta la ecuación diferencial podemos poner

$$\begin{aligned} y(x_{n+1}) &= y(x_n) + h y'(x_n) + \frac{h^2}{2} y''(\xi_n) \\ &= y(x_n) + h f(x_n, y(x_n)) + \frac{h^2}{2} y''(\xi_n) \end{aligned}$$

así que el error de truncamiento local verifica

$$\|e_n\| \leq \frac{h^2}{2} K,$$

siendo $K = \max_{x \in [x_0, x_N]} \|y''(x)\|$.

Ejemplo:

Resuelva en $[0, 1]$ utilizando el método de Euler con tamaño de paso $h = 0,25$ el problema

$$\begin{cases} y' = -y^2 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

y compare el error real con la estimación teórica sabiendo que la solución exacta es $y(x) = \frac{1}{1+x}$.

6.5. Análisis de la convergencia del método de Euler.

Teorema 6.5.1 (*Cota del error global*) Para el método de Euler se verifica que

$$\|y(x_n) - y_n\| \leq e^{(x_N - x_0)L} \|y(x_0) - y_0\| + \frac{C}{2L} (e^{(x_N - x_0)L} - 1) h,$$

siendo $C = \max_{x \in [x_0, x_N]} \|y''(x)\|$ y $L > 0$ una constante de Lipschitz para $f(x, y)$ con respecto a y .

Demostración

Por Taylor se tiene que

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h f(x_n, y(x_n)) + \frac{h^2}{2} y''(\xi_n), \quad \xi_n \in (x_n, x_n + h).$$

Restando a esta ecuación la ecuación del método resulta

$$\|d_{n+1}\| \leq \|d_n\| + h L \|d_n\| + \frac{h^2}{2} C.$$

Utilizando repetidamente esta desigualdad se llega a que

$$\begin{aligned} \|d_n\| &\leq (1 + h L)^n \|d_0\| + [(1 + h L)^{n-1} + \dots + (1 + h L) + 1] \frac{h^2}{2} C \\ &= (1 + h L)^n \|d_0\| + \frac{C h}{2 L} [(1 + h L)^n - 1]. \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta la desigualdad $1 + x < e^x$ para $x > 0$, resulta

$$\begin{aligned} \|d_n\| &\leq e^{n h L} \|d_0\| + \frac{C h}{2 L} (e^{n h L} - 1) \\ &\leq e^{(x_N - x_0) L} \|d_0\| + \frac{C h}{2 L} (e^{(x_N - x_0) L} - 1). \quad \square \end{aligned}$$

Corolario 6.5.1 *El método de Euler es convergente de orden uno siempre que sea $d_0 = e_0 = \mathcal{O}(h)$.*

Ejemplo:

Aplique el método de Euler para resolver el problema

$$y'(x) = x, \quad y(0) = 0$$

en el intervalo $[0, x_N]$.

Si tomamos como valor de arranque para el método, $y_0 = 0$, y siendo $x_j = j h$, tenemos que

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + h x_0 = 0 \\ y_2 &= y_1 + h x_1 = h^2 \\ y_3 &= y_2 + h x_2 = h^2(1 + 2) \\ &\vdots \\ y_n &= h^2(1 + \dots + (n - 1)) = h^2 \frac{n(n - 1)}{2}. \end{aligned}$$

Entonces podemos poner,

$$y_n = \frac{n^2 h^2}{2} - \frac{n h^2}{2} = \frac{x_n^2}{2} - \frac{x_n h}{2}$$

y como la solución exacta del problema es $y(x) = x^2/2$ finalmente se tiene

$$\max_{1 \leq n \leq N} \|y(x_n) - y_n\| = \max_{1 \leq n \leq N} \left\| \frac{x_n h}{2} \right\| = \frac{x_N h}{2}.$$

De manera que el error global tiende a cero cuando $h \rightarrow 0^+$, pero lo hace de manera proporcional a h y no a h^2 así que el método no puede tener orden mayor que 1.

6.6. Efecto de los errores de redondeo en el método de Euler.

Los valores y_n del método de Euler no se pueden calcular de manera exacta debido a los errores cometidos al efectuar las operaciones. Si llamamos \tilde{y}_n , $n = 0, 1, \dots, N$ a los valores realmente calculados, se verifica el siguiente teorema.

Teorema 6.6.1 *Siendo*

$$\begin{aligned} \tilde{y}_0 &= y_0 + \omega_0 \\ \tilde{y}_{n+1} &= \tilde{y}_n + h f(x_n, \tilde{y}_n) + \omega_{n+1} \end{aligned} \tag{6.2}$$

los valores calculados con el método de Euler para un P.V.I. como en (6.1) con $Nh = x_N - x_0$, entonces existen constantes K_1 y K_2 que dependen de la constante de Lipschitz L de f y de la longitud del intervalo de integración, tales que

$$K_2 \varphi_N(\omega) \leq \max_{0 \leq n \leq N} \|\tilde{y}_n - y_n\| \leq K_1 \varphi_N(\omega),$$

siendo $\varphi_N(\omega) = \max_{0 \leq n \leq N} \left\| \sum_{j=0}^n \omega_j \right\|.$

Demostración

Sean $\delta_j = \tilde{y}_j - y_j$ y $\Delta_j = f(x_j, \tilde{y}_j) - f(x_j, y_j)$. Restando la identidad en (6.2) de la ecuación del método de Euler resulta

$$\begin{aligned}\delta_0 &= \omega_0 \\ \delta_{n+1} &= \delta_n + h \Delta_n + \omega_{n+1}, \quad n = 0, \dots, N-1.\end{aligned}\tag{6.3}$$

Utilizando estas igualdades repetidamente se obtiene que

$$\delta_n = h \sum_{j=0}^{n-1} \Delta_j + \sum_{j=0}^n \omega_j,$$

de donde se sigue que, siendo L la constante de Lipschitz de $f(x, y)$ respecto de y , se tiene la acotación

$$\|\delta_n\| \leq hL \sum_{j=0}^{n-1} \|\delta_j\| + \left\| \sum_{j=0}^n \omega_j \right\|.\tag{6.4}$$

Utilizando esta desigualdad obtendremos las cotas requeridas. Por un lado se tiene que

$$\begin{aligned}\|\delta_n\| &\leq (1 + hL)^n \max_{0 \leq n \leq N} \left\| \sum_{j=0}^n \omega_j \right\| \\ &\leq e^{nhL} \max_{0 \leq n \leq N} \left\| \sum_{j=0}^n \omega_j \right\| \\ &= e^{(x_N - x_0)L} \max_{0 \leq n \leq N} \left\| \sum_{j=0}^n \omega_j \right\|,\end{aligned}$$

con lo que tenemos la primera acotación tomando $K_1 = e^{(x_N - x_0)L}$.

A partir de (6.4) también se sigue que

$$\begin{aligned}\max_{0 \leq n \leq N} \|\delta_n\| &\geq \max_{0 \leq n \leq N} \left\| \sum_{j=0}^n \omega_j \right\| - h \sum_{j=0}^{n-1} \|\Delta_j\| \\ &\geq \varphi_N(\omega) - hL \sum_{j=0}^{n-1} \|\delta_j\| \\ &\geq \varphi_N(\omega) - hLN \max_{0 \leq n \leq N} \|\delta_j\|,\end{aligned}$$

de donde se sigue la segunda acotación tomando

$$K_2 = \frac{1}{h L N} = \frac{1}{L(x_N - x_0)}. \quad \square$$

6.7. Acotación del error global en el método de Euler.

Si se considera que los errores de redondeo ω_i están acotados por ω , entonces se puede escribir

$$\max_{0 \leq n \leq N} \|\tilde{y}_n - y_n\| \leq K_1 (N + 1) \omega = K_1 \omega \left(\frac{x_N - x_0}{h} + 1 \right).$$

Por otro lado, a partir del hecho de que el método de Euler es de orden uno, podemos poner

$$\max_{0 \leq n \leq N} \|y(x_n) - y_n\| \leq K_3 h$$

para cierta constante K_3 .

Entonces, para los errores globales, a partir de las desigualdades anteriores se obtiene que

$$\begin{aligned} \max_{0 \leq n \leq N} \|y(x_n) - \tilde{y}_n\| &\leq \max_{0 \leq n \leq N} \|y(x_n) - y_n\| + \max_{0 \leq n \leq N} \|y_n - \tilde{y}_n\| \\ &\leq K_3 h + K_1 \omega \left(\frac{x_N - x_0}{h} + 1 \right) \end{aligned}$$

A pesar de que la expresión teórica del error nos pudiera indicar que haciendo $h \rightarrow 0$ podríamos conseguir que el error se haga tan pequeño como se quiera, la expresión anterior, que incluye los efectos del redondeo, nos indica que no es así, y de hecho si se toma h muy pequeño los errores de redondeo predominarán sobre los de discretización y harán que la aproximación sea peor aunque tengamos un número de pasos mayor.

6.8. Comportamiento asintótico del error global.

El proceso de extrapolación de Richardson permite mejorar ciertas aproximaciones cuando se dispone de un desarrollo asintótico. Supongamos ahora que $f \in \mathcal{C}^p[x_0, x_N]$ y por tanto $y(x) \in \mathcal{C}^{p+1}[x_0, x_N]$; en estas condiciones es inmediato observar que el error local admite un desarrollo en serie de la forma

$$e_n = \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_n) + \dots + \frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x_n) + \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}y^{(p+1)}(x_n + \theta_n h)$$

con $\theta_n \in (0, 1)$.

Para los errores globales en el método de Euler, bajo ciertas condiciones de diferenciabilidad se tiene un desarrollo de la forma

$$d_n = h \psi(x_n) + \mathcal{O}(h^2)$$

cuyo interés reside en que permite la aplicación del proceso de extrapolación de Richardson para obtener una solución de mayor orden. Este resultado se expresa en forma de teorema :

Teorema 6.8.1 *Sea la solución $y(x) \in \mathcal{C}^3[x_0, x_N]$ del problema de valor inicial en (6.1) y supongamos que $f_{yy}(x, y)$ es continua y acotada, siendo el error inicial $d_0 = \psi_0 h$ con ψ_0 independiente de h . Entonces se tiene que*

$$d_j = h \psi(x_j) + \mathcal{O}(h^2) \quad \text{para } j = 0, 1, \dots, N,$$

donde $\psi(x)$ es la solución del problema

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = f_y(x, y(x))\psi(x) + \frac{1}{2}y''(x), \quad \psi(x_0) = \psi_0.$$

Demostración

A partir del método de Euler

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n),$$

y de la fórmula del error de truncamiento,

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h f(x_n, y(x_n)) + e_n,$$

restando ambas se tiene

$$\begin{aligned} d_{n+1} &= d_n + h [f(x_n, y(x_n)) - f(x_n, y_n)] + e_n \\ &= d_n + h d_n f_y(x_n, y(x_n)) + \phi_n d_n + e_n \\ &= d_n [1 + h f_y(x_n, y(x_n)) + \phi_n] + e_n \\ &= d_n \alpha_n + e_n \end{aligned}$$

donde en virtud de las hipótesis α_n se puede poner como

$$\begin{aligned} \alpha_n &= 1 + h f_y(x_n, y(x_n)) + \phi_n d_n \\ &= 1 + h f_y(x_n, y(x_n)) + h f_{yy}(x_n, y(x_n)) + \phi'_n d_n \phi_n d_n \end{aligned}$$

siendo $0 < \phi_n, \phi'_n < 1$.

Por otro lado podemos poner

$$\begin{aligned} e_n &= y(x_{n+1}) - y(x_n) - h f(x_n, y(x_n)) \\ &= \frac{h^2}{2} y''(x_n + \theta_n h) \\ &= \frac{h^2}{2} y''(x_n) + \frac{h^2}{2} y'''(x_n + \theta'_n h) \theta_n h, \end{aligned}$$

siendo $0 < \theta_n, \theta'_n < 1$.

Sustituyendo las expresiones anteriores de α_n y de e_n en d_{n+1} y teniendo en cuenta que el método es de orden 1 y por tanto $|d_n| = \mathcal{O}(h)$, resulta

$$\begin{aligned} d_{n+1} &= d_n [1 + h f_y(x_n, y(x_n))] + h \mathcal{O}(d_n^2) + \frac{h^2}{2} y''(x_n) + h \mathcal{O}(h^2) \\ &= d_n [1 + h f_y(x_n, y(x_n))] + \frac{h^2}{2} y''(x_n) + \mathcal{O}(h^3). \end{aligned}$$

Además, como ψ es solución de la ecuación diferencial del enunciado podemos

poner

$$\begin{aligned}
 \psi(x_{n+1}) &= \psi(x_n) + h\psi'(x_n) + \frac{h^2}{2}\psi''(x_n + \varphi_n h) \\
 &= \psi(x_n) + h \left[f_y(x_n, y(x_n))\psi(x_n) + \frac{1}{2}y''(x_n) \right] \\
 &\quad + \frac{h^2}{2}\psi''(x_n + \varphi_n h) \\
 &= \psi(x_n) [1 + h f_y(x_n, y(x_n))] + \frac{h}{2}y''(x_n) + \mathcal{O}(h^2),
 \end{aligned}$$

siendo $0 < \varphi_n < 1$.

Si ahora llamamos $\delta_n = d_n - h\psi(x_n)$, a partir de las expresiones anteriores de d_{n+1} y de $\psi(x_{n+1})$ podemos poner

$$\begin{aligned}
 \delta_{n+1} &= d_{n+1} - h\psi(x_{n+1}) \\
 &= [1 + h f_y(x_n, y(x_n))] \delta_n + \mathcal{O}(h^3)
 \end{aligned}$$

y siendo K una cota de la $|f_y|$ resulta

$$|\delta_{n+1}| \leq (1 + hK) |\delta_n| + \mathcal{O}(h^3).$$

Aplicando reiteradamente esta última fórmula se tiene la acotación

$$\begin{aligned}
 |\delta_n| &\leq (1 + hK)^n |\delta_0| + [(1 + hK)^{n-1} + \dots + (1 + hK) + 1] \mathcal{O}(h^3) \\
 &= (1 + hK)^n |\delta_0| + \frac{(1 + hK)^n - 1}{hK} \mathcal{O}(h^3).
 \end{aligned}$$

Pero según la elección del valor inicial en el P.V.I. del enunciado se tiene que $\delta_0 = 0$ y por tanto

$$\begin{aligned}
 |\delta_n| &\leq \frac{(1 + hK)^n - 1}{K} \mathcal{O}(h^2) \\
 &\leq \frac{e^{hKn} - 1}{K} \mathcal{O}(h^2) \\
 &= \frac{e^{K(x_N - x_0)} - 1}{K} \mathcal{O}(h^2) = \mathcal{O}(h^2),
 \end{aligned}$$

de donde se concluye. \square

6.9. Método de Euler y extrapolación de Richardson.

Si consideramos un punto genérico $x_n = x_0 + n h$ y se introduce la notación $y_n = y_h(x_n)$ para indicar la dependencia de la solución numérica del tamaño del paso, el resultado del teorema anterior al utilizar el método de Euler dos veces, con pasos h y $2h$ respectivamente, permite poner

$$y(x_n) - y_h(x_n) = h \psi(x_n) + \mathcal{O}(h^2),$$

$$y(x_n) - y_{h/2}(x_n) = \frac{h}{2} \psi(x_n) + \mathcal{O}(h^2),$$

y restando a la segunda igualdad multiplicada por 2 la primera, resulta

$$y(x_n) - [2y_{h/2}(x_n) - y_h(x_n)] = \mathcal{O}(h^2),$$

con lo cual, tomando el valor

$$\bar{y}_n = 2y_{h/2}(x_n) - y_h(x_n)$$

como aproximación de $y(x_n)$ obtenemos que esta aproximación mejora en un orden.

Ejemplo:

Utilice el método de Euler junto con la extrapolación de Richardson para resolver en el intervalo $[0, 2]$ el problema

$$y'(x) = -2xy(x)^2, \quad y(0) = 10$$

y observe la mejora que se produce en el error.

6.10. Actividades complementarias.

- Sea $I = \int_{x_0}^{x_N} f(x) dx$ y S_N la suma inferior de Riemann para f correspondiente a la partición $x_0 < x_1 < \dots < x_N$ con $x_n = x_0 + h n$, $n = 1, \dots, N$,

siendo $h = (x_N - x_0)/N$. Pruebe a partir del método de Euler que S_N converge a I en el sentido de que $\lim_{h \rightarrow 0^+} |I - S_N| = 0$.

- Dado el problema

$$\begin{cases} y' = \lambda y, & \lambda < 0, & x \in [0, b] \\ y(0) = \mu, \end{cases}$$

cuya solución es

$$y(x) = \mu e^{\lambda x},$$

pruebe que el método de Euler es convergente para este problema y obtenga una estimación del error que se comete.

- El método de Euler se puede obtener a partir de la fórmula

$$y(x_n + h) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_n+h} f(z, y(z)) dz,$$

donde para calcular la integral se utiliza la fórmula del rectángulo izquierdo. Considere otras fórmulas de cuadratura y en consecuencia, obtenga otros métodos numéricos para resolver un P.V.I., que pueden considerarse variantes del método de Euler.

- Aplique el método de Euler para resolver el problema

$$\begin{cases} y' = y(1 - y), & x \in [0, b] \\ y(0) = y_0, \end{cases}$$

para distintos valores de y_0 y del punto final del intervalo de integración, b . ¿Se puede resolver bien el problema mediante el método de Euler independientemente del valor inicial y_0 elegido?.

6.11. Bibliografía.

Bibliografía básica.

- [Burden, R. L. y Faires, J. D. : 1998]: el capítulo 5 trata de manera simplificada el tema.
- [Fatunla, S. O. : 1988]: el capítulo 3 trata de manera simplificada el tema.
- [Gerald, C. F. and Wheatley, P. O. : 2000]: el capítulo 6 trata el tema de forma elemental.
- [Smith, W. A. : 1988]: se ocupa en el capítulo 10 de este tema.

Bibliografía complementaria.

- [Butcher, J. C. : 2003]: dedica la mayor parte del capítulo 2 a este tema.
- [Calvo, M., Montijano, J. y Rández, L. : 1985]: un tratamiento exhaustivo en el capítulo 1.
- [Crouzeix, M. et Mignot, A. L. : 1984]: presenta un tratamiento completo en el capítulo 4.