Cálculo Numérico en Una Variable

Eduardo Gambín Monserrat
Fernando Ballesta Yagüe

Aviso a navegantes

Estos apuntes sea han hecho basados en gran medida en los apuntes de clase de Fernando Ballesta Yagüe, basados a su vez en las anotaciones en la pizarra de las clases de la asignatura de Cálculo Numérico en Una Variable, impartida por la profesora Teresa Signes Signes en la universidad de Murcia. También se han consultado algunos libros y la wikipedia para aportar información extra. Estos apuntes no sustituyen las propias notas de clase y, en caso de que ambos difieran, se debería siempre hacer caso a estas últimas, puesto que es el profesor quien va a evaluar la asignatura al fin y al cabo.

El fin principal es estructurar un poco la asignatura, ya que de primeras puede parecer algo confusa y poco rigurosa (aunque esto no sea así). Algunas de las proposiciones que aparecen son reordenaciones de apuntes sin más, que quedaban mejor de esta forma. En algunos apartados se ha alterado el orden en el que fueron impartidos para mantener la coherencia entre los temas. En ningún caso esto es perjudicial y está pensado para ir más paso a paso. También aparecen algunas demostraciones que no se han visto en clase por la importancia que se ha considerado que tienen, así que hay que llevar cuidado con las que se dan y con las que no (estudiar algo que no entra siempre está de más). Es posible que además aparezca alguna broma de vez en cuando, que se ha conservado para el recuerdo. Estas aparecerán siempre entre comillas y no afectarán al rigor de los apuntes (son errores al escribir en la pizarra que merecía la pena conservar, la mayoría).

A modo de revisión, se han utilizado los apuntes de José Vegara Hernández, que han servido para completar definiciones o añadir datos que no estaban presentes en un primer momento. Gracias también a Carlos Durá Costa (Carlozzito) por sus correcciones.

Si se detecta algún fallo o errata o se quiere aportar algo para hacer de estos apuntes algo más completo (seamos sinceros, no os voy a regalar nada por hacerlo, pero haréis del mundo un lugar un poquito mejor) podéis avisarme a mí (Eduardo) sobre el asunto y lo intentaré arreglar lo antes posible (pero no prometo nada, es lo que hay).

Índice general

Capítulo 1

Números y errores

1.1. Introducción. Problemas numéricos

Definición 1.1. Un **problema numérico** es un problema matemático junto a la exigencia de resolverlo con un cierto grado de precisión. Un **método numérico** es un algoritmo que intenta resolver una operación matemática compleja.

Ejemplo 1.2. Sea $A \in M_n(\mathbb{R})$ y $b \in \mathbb{R}^n$. Encontrar un algoritmo que permita calcular $x \in \mathbb{R}^n$ de forma que $Ax = b$.

Solución. Existen varios algoritmos para esto. Los más comunes son:

- Calcular A^{-1} y obtener la solución de $x = A^{-1}b$.
- Usar la regla de Cramer.
- Usar el método de Gauss.

De entre estos tres, el más acertado es el método de Gauss, ya que es el más eficiente.

1.2. Tipos de errores

Definición 1.3. Se llama **error** a la diferencia entre el valor que se obtiene como resultado de aplicar un método numérico para resolver un problema y el valor real de la solución de dicho problema.

Más adelante definiremos el error de forma más precisa. Existen diferentes tipos de errores según su naturaleza:

- **Errores de modelo**: surgen de la simplificación en la construcción del modelo.
- **Errores en los datos de entrada**: son causados por la medida experimental de las magnitudes.
- **Errores de algoritmo o de modelo**: provienen de las operaciones que se realizan en el algoritmo.
- **Errores de redondeo**: se derivan del hecho de que un ordenador trabaja en aritmética finita o números máquina.

1.3. Números y su representación. Números máquina

Los ordenadores no pueden trabajar con las infinitas cifras de los números reales. Por ello, trabajan con **números máquina**, es decir, representaciones de ellos con una cantidad finita de cifras. Así, se pueden representar una gran cantidad de números reales con un conjunto relativamente pequeño de ellos.

Definición 1.4. Se llama **representación en coma flotante** en base b, precisión n y mantisa normalizada a la representación

$$0.a_0 a_1 \dots a_n \cdot b^m$$

donde $a_0 \neq 0$, n es el número de dígitos en base b y m es el exponente.

Para poder representar números reales se utiliza el estándar **IEEE 754**. En **precisión simple** se utilizan 32 bits por número, donde el primer bit indica signo, los 8 siguientes guardan el exponente y los 23 restantes la mantisa. En **precisión doble** se utilizan 64, donde el primer bit también indica el signo, los 11 siguientes indican el exponente y los 52 restantes la mantisa. Estas precisiones dan 6 y 15 cifras significativas respectivamente.

1.4. Errores de redondeo

Como ya hemos dicho, utilizar métodos numéricos puede generar errores de redondeo debido a la cantidad finita de cifras significativas que un número máquina puede tener.

Definición 1.5. Sea x_E la solución de un problema y sea x_A la solución que hemos obtenido de dicho problema mediante un método numérico. Se llama **error absoluto** y lo denominamos E_{abs} a la diferencia en valor absoluto entre estos valores.

$$E_{\text{abs}} = |x_E - x_A|$$

Se llama **error relativo** y lo denominamos E_{rel} al error absoluto entre el valor absoluto de x_E.

$$E_{\text{rel}} = \frac{|x_E - x_A|}{|x_E|}$$

Si el error relativo es menor que $5 \cdot 10^{-n}$ se dice que tiene n **cifras significativas exactas**.

El error relativo informa sobre la magnitud del error en relación con el tamaño de la solución, es decir, la relevancia que tiene este. Es importante ver, además, que aunque las denominemos "exactas", las cifras significativas de nuestra solución no tienen por qué coincidir con las de la solución real.

Existen diferentes tipos de redondeo. Los más significativos son:

- **Redondeo por corte** (n dígitos): se toman las cifras $0.a_0 a_1 \dots a_n$ y se descartan todas las demás.
- **Redondeo simétrico** (n dígitos): se toman las cifras $0.a_0 a_1 \dots a'_n$, donde

$$a'_n = \begin{cases} a_n & \text{si} \quad a_{n+1} < 5 \\ a_n + 1 & \text{si} \quad a_{n+1} \geq 5 \end{cases}$$

Definición 1.6. Llamamos **épsilon** de la máquina al menor número positivo que la máquina es capaz de representar.

En precisión simple, el épsilon de la máquina es del orden de $2^{-23} \approx 10^{-7}$, mientras que en precisión doble es del orden de $2^{-52} \approx 10^{-16}$. Esto nos garantiza 6 y 15 cifras significativas exactas, como ya hemos dicho.

1.5. Operaciones básicas en aritmética finita y propagación del error

Todas las operaciones máquina producen un error de redondeo que, sumado al error de los factores que se usen, pueden aumentar el error total del resultado obtenido. Cuando una operación no aumenta el error de forma significativa, se dice que la operación está **bien condicionada**. Cabe preguntarse si las cuatro operaciones básicas (es decir, suma, resta, producto y cociente) están bien condicionadas, por lo que vamos a comprobarlo.

1.5.1. Operaciones producto y cociente

Tomemos por ejemplo

$$x_A = x \cdot (1+\delta)\,, \quad y_A = y \cdot (1+\rho)$$

donde tanto δ como ρ son números cuyo valor absoluto es inferior al épsilon de la máquina forzosamente (puesto que si fuese superior, la máquina sería capaz de representarlo). En ambos casos, estos añadidos representan el error de redondeo que cometemos cuando introducimos datos. Al realizar operaciones también cometemos cierto error de redondeo, por lo que

$$x_A\,[*]\,y_A = x_A \cdot y_A \cdot (1+\sigma) = x \cdot y \cdot (1+\delta)\,(1+\rho)\,(1+\sigma) \approx x \cdot y \cdot (1+\beta)$$

donde, de nuevo, σ es menor en valor absoluto que el épsilon de la máquina y $\beta < |\delta| + |\rho| + |\sigma|$. En este caso vemos que el error total cometido es menor que la suma total de los errores, por lo que la propagación del error es pequeñas y se considera que el producto es una operación bien condicionada.

El caso del cociente es análogo (para comprobar $\frac{x_A}{y_A}$, basta tomar $y'_A = \frac{1}{y_A}$ y hacer el producto $x_A \cdot y'_A$), aunque en ocasiones hay que llevar cuidado cuando dividimos dos números que son cero (como puede ocurrir al intentar calcular $\lim_{x\to 0} \frac{\sin(x)}{x}$), pero en general esto no nos preocupa.

1.5.2. Operaciones suma y resta

Tomemos de nuevo x_A y y_A como en el apartado anterior. Al realizar una suma cometemos de nuevo un error de redondeo dado por cierto σ menor en valor absoluto que el épsilon de la máquina.

$$x_A\,[+]\,y_A = (x_A + y_A) \cdot (1+\sigma) = (x \cdot (1+\delta) + y \cdot (1+\rho)) \cdot (1+\sigma) = (x + y + x\delta + y\rho) \cdot (1+\sigma)$$

Tomamos

$$\phi = \frac{x\delta + y\rho}{x+y}$$

de forma que

$$(x + y + x\delta + y\rho) \cdot (1+\sigma) = (x + y + (x+y) \cdot \phi) \cdot (1+\sigma) = (x+y) \cdot (1+\phi) \cdot (1+\sigma) \approx (x+y) \cdot (1+\gamma)$$

donde $\gamma < |\phi|+|\sigma|$. Vemos que en general la operación está bien condicionada. Sin embargo, cuando tomamos x e y parecidos y de signos opuestos, el error que cometemos puede crecer muy rápidamente (ya que ϕ se hace muy grande). A este fenómeno lo denominamos **cancelación sustractiva**.

Ejemplo 1.7. Comprobar si se produce cancelación sustractiva en la fórmula de la ecuación de 2º grado.

Solución. Sea $ax^2 + by + c = 0$. Las soluciones de esta ecuación son de la forma

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

Si $b > 0$, la cancelación sustractiva aparece en x_1 (si $|4ac| \ll b^2$) mientras que si $b < 0$, aparece en x_2. Para solucionar esto, multiplicamos y dividimos por el conjugado.

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = \frac{\left(-b + \sqrt{b^2 - 4ac}\right)\left(-b - \sqrt{b^2 - 4ac}\right)}{2a\left(-b - \sqrt{b^2 - 4ac}\right)} = \frac{b^2 - \left(b^2 - 4ac\right)}{2a\left(-b - \sqrt{b^2 - 4ac}\right)} = \frac{2c}{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

$$x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = \frac{\left(-b - \sqrt{b^2 - 4ac}\right)\left(-b + \sqrt{b^2 - 4ac}\right)}{2a\left(-b + \sqrt{b^2 - 4ac}\right)} = \frac{b^2 - \left(b^2 - 4ac\right)}{2a\left(-b + \sqrt{b^2 - 4ac}\right)} = \frac{2c}{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

1.5.3. Propagación del error

Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ derivable. Por el Teorema del Valor Medio, existe ξ entre x_E y x_A tal que

$$f(x_E) - f(x_A) = f'(\xi)\,(x_E - x_A)$$

De esta forma, como $\xi \approx x_E$, tenemos que

$$\frac{|f(x_E) - f(x_A)|}{|f(x_E)|} \approx \frac{|f'(x_E)| \cdot |x_E|}{|f(x_E)|} \cdot \frac{|x_E - x_A|}{|x_E|}$$

siempre y cuando $x_E \neq 0$ o $f(x_E) \neq 0$, en cuyo caso habría que únicamente considerar valores absolutos.

Definición 1.8. Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función derivable y $x \in [a, b]$ tal que $f(x) \neq 0$. Llamamos **número de condición** de f para x a $k \in \mathbb{R}$ tal que

$$k = \left|\frac{f'(x) \cdot x}{f(x)}\right|$$

Proposición 1.9. *Sea k el número de condición de una función f y x_E y x_A valores parecidos. Si $k \approx 10$ y además*

$$\left|\frac{x_E - x_A}{x_E}\right| < 5 \cdot 10^{-6}$$

entonces

$$\frac{|f(x_E) - f(x_A)|}{|f(x_E)|} < 5 \cdot 10^{-5}$$

El número de condición de una función determina cuánto afecta al error al dato de entrada en el resultado final, ya que el error relativo del resultado es igual al número de condición multiplicado por el error relativo del dato de entrada.

1.5.4. Algoritmos estables e inestables

Definición 1.10. Un algoritmo se dice **inestable** cuando los errores que se van produciendo en las diversas etapas de este van aumentando y afectan a la exactitud del resultado.
Por el contrario, un algoritmo se dice **estable** cuando consigue resultados cercanos a los exactos cuando se parte de datos próximos a los verdaderos.

Ejemplo 1.11. Evaluar $\sqrt{12346} - \sqrt{12345}$ con 6 dígitos y redondeo simétrico.

Solución. Sea $f(x) = \sqrt{x+1} - \sqrt{x}$. Su derivada es

$$f'(x) = \frac{1}{2\sqrt{x+1}} - \frac{1}{2\sqrt{x}}$$

Calculamos ahora su número de condición.

$$k = \left|\frac{f'(x)\cdot x}{f(x)}\right| = \frac{1}{2}\left|\frac{\frac{1}{2\sqrt{x+1}} - \frac{1}{2\sqrt{x}}}{\sqrt{x+1}-\sqrt{x}}\right| \cdot |x| = \frac{1}{2}\left|\frac{\frac{\sqrt{x+1}-\sqrt{x}}{\sqrt{x+1}\cdot\sqrt{x}}}{\sqrt{x+1}-\sqrt{x}}\right| \cdot |x| = \frac{1}{2}\left|\frac{1}{\sqrt{x+1}\cdot\sqrt{x}}\right| \cdot |x| \approx \frac{1}{2}$$

La última aproximación mejora conforme aumenta x. Podemos afrontar el cálculo de la solución de varias formas. Si intentamos restar los términos directamente vamos a sufrir cancelación sustractiva, puesto que

$$\lim_{x\to\infty} \frac{\sqrt{x}}{\sqrt{x+1}} = 1$$

Por tanto debemos encontrar un método mejor. Si multiplicamos y dividimos por el conjugado de f, tenemos que

$$f(x) = \sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{x+1-x}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}} = \frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}$$

y la cancelación sustractiva desaparece. Este algoritmo es estable, puesto que los errores cometidos no son significativos.

Capítulo 2

Interpolación

2.1. Introducción. Polinomios interpoladores

El siguiente teorema justifica el uso de polinomios como método de aproximación para funciones continuas.

Teorema 2.1. (Aproximación de Weierstrass) *Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función continua. Dado $\varepsilon > 0$, existe un polinomio $P : [a, b] \to \mathbb{R}$ tal que para cualquier $x \in [a, b]$, se cumple que $|f(x) - P(x)| < \varepsilon$.*

Es decir, los polinomios aproximan funciones continuas de manera uniforme en intervalos cerrados y acotados. Además, el cálculo de sus derivadas e integrales es sencillo y dan lugar a otros polinomios. Es por ello que cuando hablamos de interpolación, nos referimos, por lo general, a encontrar un polinomio que cumpla ciertas propiedades y que además aproxime bien la función en su dominio.

2.1.1. Introducción a la interpolación

Teorema 2.2. *Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ y sean $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$ distintos. Entonces existe un único polinomio $P_n(x)$ de grado menor o igual que n tal que para cualquier $i = 0, \dots, n$, se tiene que $P_n(x_i) = f(x_i)$.*

Demostración. Sea el polinomio $P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i \cdot x_i^i$ con coeficientes reales. Tenemos entonces $n+1$ ecuaciones de la forma

$$\begin{cases} P_n(x_0) = a_0 + a_1 \cdot x_0 + \cdots + a_n \cdot x_0^n \\ \vdots \\ P_n(x_n) = a_0 + a_1 \cdot x_n + \cdots + a_n \cdot x_n^n \end{cases}$$

Si llamamos

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & x_0^n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & x_n^n \end{pmatrix}$$

vemos que haciendo su determinante de Vandermore tenemos que

$$\det(A) = \prod_{0 \le i < j \le n} \left(x_i - x_j\right) \neq 0$$

El determinante no es nulo, ya que los puntos son diferentes. Por tanto existe solución única de dicho sistema, lo que nos garantiza la existencia de los coeficientes $a_0, \dots, a_n$ de forma que para $0 \le i \le n$, $P_n(x_i) = f(x_i)$.

Otra forma de ver la unicidad es suponer que existen dos polinomios P_n y Q_n que cumplen $P_n(x_i) = Q_n(x_i) = f(x_i)$ y tomar $R_n(x) = P_n(x) - Q_n(x)$. No es difícil ver que para $0 \le i \le n$ se tiene que $R_n(x) = 0$, es decir, que tiene $n+1$ raíces y junto al hecho de que es un polinomio de grado n por ser resta de dos polinomios también de grado n, se tiene que $R_n \equiv 0$. □

Este teorema nos garantiza que dada una función y $n+1$ puntos (a los que se les denomina **nodos**) de los que conocemos su imagen, podemos construir un polinomio de grado menor o igual que n que aproxime a la función de forma aceptable. Por lo general, vamos a suponer que $x_0 < \cdots < x_n$ por comodidad.

Cuando evaluamos $x \in [x_0, x_n]$, decimos que estamos **interpolando**, mientras que si evaluamos puntos fuera de dicho intervalo, decimos que estamos **extrapolando** (lo cual no es recomendable, a menos que sean puntos cercanos a x_0 o x_n).

Ejemplo 2.3. Hallar el polinomio interpolador de cierta función f sabiendo que $f(1) = 1$ y $f(1.5) = 1.224$.

Solución. La función es $f(x) = \sqrt{x}$. Con dos puntos, podemos construir un polinomio de grado 1 de la forma $P_1(x) = a_0 + a_1 x$. Evaluando en los puntos conocidos, tenemos que

$$\begin{cases} P_1(1) = 1 \\ P_1(1.5) = 1.224 \end{cases} \implies a_0 = 0.552, \quad a_1 = 0.448$$

El polinomio es, por tanto, $P_1(x) = 0.552 + 0.448x$. Si tomamos un valor en el intervalo $[1, 1.5]$ como por ejemplo 1.3, tenemos que $P_1(1.3) = 1.1344$ y $\sqrt{1.3} = 1.14018$, por lo que el polinomio interpola razonablemente bien para tener solo dos nodos.

En los siguientes apartados veremos que hay diferentes formas de construir un polinomio interpolador. Algunas funcionan mejor que otras para cada situación, por lo que es importante conocer las diferencias entre ellas.

2.2. Forma de Lagrange

Sean dos puntos $(x_0, y_0), (x_1, y_1) \in \mathbb{R}^2$. Para encontrar un polinomio de grado 1 que pase por dichos puntos, podemos tomar una función f de forma que $f(x_0) = y_0$ y $f(x_1) = y_1$ e interpolarla. El polinomio

$$P(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1$$

cumple que

$$P(x_0) = y_0, \quad P(x_1) = y_1$$

Como vimos en el teorema del apartado anterior, este es el único polinomio que cumple las condiciones buscadas. Si llamamos

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}, \quad L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

tenemos que

$$P(x) = y_0 \cdot L_0(x) + y_1 \cdot L_1(x)$$

Si en lugar de dos puntos tenemos $n+1$, podemos razonar de forma parecida para intentar encontrar un polinomio de grado menor o igual que n.

Definición 2.4. Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función y sean $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ distintos de los que conocemos sus imágenes $f(x_0), \ldots, f(x_n)$. Llamamos polinomio interpolador en la **forma de Lagrange** a un polinomio de grado menor o igual que n tal que

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \cdot L_k(x)$$

donde

$$L_k(x) = \prod_{i=0,\, i\neq k}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i} = \frac{x - x_0}{x_k - x_0} \cdots \frac{x - x_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} \cdot \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} \cdots \frac{x - x_n}{x_k - x_n}$$

Veamos que los polinomios de esta forma cumplen lo que buscamos. Para $0 \leq k \leq n$ vemos que

$$L_k(x_k) = \prod_{i=0,\, i\neq k}^{n} \frac{x_k - x_i}{x_k - x_i} = 1$$

y para $h = 0, \ldots, n$ tal que $k \neq h$, que

$$L_k(x_h) \prod_{i=0,\, i\neq k}^{n} \frac{x_h - x_i}{x_k - x_i} = \frac{x_h - x_0}{x_k - x_0} \cdots \frac{x_h - x_h}{x_k - x_{k-1}} \cdots \frac{x_h - x_n}{x_k - x_n} = 0$$

Es decir que, para $i = 0, \ldots, n$, tenemos que $P_n(x_i) = f(x_i)$, que es exactamente lo que necesitamos.

Una interpretación de este método es que estamos realizando un cambio de base en el espacio vectorial de los polinomios de grado menor o igual que n. Es decir, que estamos cambiando desde la base usual $\{1, x, x^2, \ldots, x^n\}$ a una base cuyos coeficientes son los $f(x_0), \ldots, f(x_n)$. Esta nueva base viene dada por los $L_k(x)$ que hemos definido anteriormente.

Definición 2.5. Llamamos **polinomio nodal** y lo denominamos como $\Pi_n(x)$ al polinomio definido de la forma

$$\Pi_n(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

Proposición 2.6. *Sean los nodos $x_0, \ldots, x_n \in \mathbb{R}$ y $P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} c_i \cdot L_k(x)$ el polinomio interpolador de cierta función en forma de Lagrange. Entonces*

$$L_k(x) = \frac{\Pi_n(x)}{\Pi_n'(x_k) \cdot (x - x_k)}$$

Demostración. Basta con aplicar logaritmos sobre $\Pi_n(x)$ y luego derivar para ver que

$$\Pi_n'(x) = \sum_{k=0}^{n} \left(\prod_{i=0,\, i\neq k}^{n} (x - x_i) \right) = \sum_{k=0}^{n} (x - x_0) \cdots (x - x_{k-1}) \cdot (x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n)$$

Por tanto, tenemos que $\Pi_n'(x_k) = \prod_{i=0,\, i\neq k}^{n} (x - x_i)$ y sabiendo que x_k es una raíz de $\Pi_n(x)$, no es difícil ver que la fórmula se cumple. □

2.3. Error de interpolación

Una pregunta que nos puede surgir es qué error cometemos cuando aproximamos una cierta función $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ mediante un polinomio interpolador $P_n : [a, b] \to \mathbb{R}$ de grado menor o igual que n. Es decir, conocer el **error de interpolación** que cometemos al interpolar f en cierto punto $x \in [a, b]$.

$$E_n(x) = f(x) - P_n(x)$$

En general, nos interesará conocer el supremo de los $E_n(x)$ con $x \in [a, b]$. Notemos que si además f es continua, por el Teorema de Weierstrass, este supremo es en realidad un máximo por ser la función $E_n(x)$ continua sobre un compacto.

Teorema 2.7. *Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ de clase C^{n+1} y sean $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ distintos. Si $P_n : [a, b] \to \mathbb{R}$ es el polinomio interpolador de f en los nodos $x_0, \ldots, x_n$, $a' = \text{mín}\{x, x_0, \ldots, x_n\}$ y $b' = \text{máx}\{x, x_0, \ldots, x_n\}$, entonces existe $\xi_x \in [a', b']$ tal que*

$$E_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \cdot \Pi_n(x)$$

Demostración. Sea $x \in [a, b]$. Si $x = x_k$ para algún $k = 0, \ldots, n$, entonces es inmediato que

$$0 = f(x_k) - P_n(x_k) = \frac{f^{n+1)}(\xi_{x_k})}{(n+1)!} \cdot \Pi_n(x_k) = \frac{f^{n+1)}(\xi_{x_k})}{(n+1)!} \cdot 0 = 0$$

y la fórmula es cierta. Supongamos ahora que x no es ninguno de los nodos. Entonces definimos la función $F_{x,n} : [a, b] \to \mathbb{R}$ dada por

$$F_{x,n}(y) = E_n(y) \cdot \Pi_n(x) - E_n(x) \cdot \Pi_n(y)$$

Como los polinomios son de clase C^∞ y, por hipótesis, f es de clase C^{n+1}, entonces $F_{x,n}$ es también de clase C^{n+1}. Además, es inmediato que $F_{x,n}(x_k) = 0$ por lo que acabamos de ver. Como $F_{x,n}(x) = 0$, concluimos que $F_{x,n}$ tiene al menos $n+2$ raíces distintas (recordemos que $x \neq x_k$ para $0 \leq k \leq n$).

El teorema de Rolle nos garantiza que $F'_{x,n}$ tiene al menos $n+1$ raíces distintas en (a, b), $F''_{x,n}$ tiene al menos n raíces distintas en el intervalo correspondiente y así hasta $F^{n+1)}_{x,n}$, que tiene al menos una raíz. Sea ξ_x dicha raíz, que notemos se encuentra contenida entre el mínimo y el máximo de los nodos y x. Sabemos que

$$F^{n+1)}_{x,n}(y) = f^{n+1)}(y) - P^{n+1)}_n(y) \cdot \Pi_n(x) - E_n(x) \cdot \Pi^{n+1)}_n(y) = f^{n+1)}(y) \cdot \Pi_n(x) - E_n(x) \cdot (n+1)!$$

Esto es así porque la derivada $n+1$-ésima de P_n es nula por ser este un polinomio de grado menor o igual que n, y la de Π_n es $(n+1)!$ por ser Π_n un polinomio de grado $n+1$ cuyo término de grado $n+1$ es de la forma $1 \cdot y^{n+1}$.

Por tanto, tenemos que

$$0 = F^{n+1)}_{x,n}(\xi_x) = f^{n+1)}(\xi_x) \cdot \Pi_n(x) - E_n(x) \cdot (n+1)!$$

y despejando de esta ecuación, tenemos que

$$E_n(x) = \frac{f^{n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \cdot \Pi_n(x)$$

como queríamos probar. □

Este teorema resulta de gran utilidad, ya que podemos obtener una cota del error de interpolación para cualquier $x \in [a,b]$ cuando no conocemos ξ_x, que será lo que ocurra por lo general. Sin embargo, precisa que conozcamos una cota de la derivada $n+1$-ésima, lo cual a efectos prácticos no siempre es posible.

El principal problema que presenta el método de Lagrange es que, por lo general, no se sabe a priori qué grado de polinomio necesitamos para conseguir una precisión concreta. Necesitaríamos comprobar el error que producen varios polinomios para ver cuál aproxima mejor a la función en un punto[1]. Además, el trabajo que conlleva calcular un polinomio de grado $k < n$ no simplifica ni reduce el trabajo de calcular el polinomio de grado $k+1$., por lo que debemos encontrar métodos que nos ahorren cálculos y utilicen los resultados que ya conocemos para generar nuevos.

2.4. Interpolación anidada

Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función y sean $x_0, \ldots, x_n \in [a,b]$. Sean también $0 \leq m_1, \ldots, m_k \leq n$ enteros no negativos distintos. Denotamos como

$$P_{m_1,\ldots,m_k} : [a,b] \to \mathbb{R}$$

al polinomio de grado menor o igual que k que coincide con f en los puntos $x_{m_1}, \ldots, x_{m_k}$.

Teorema 2.8. *Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función y sean $x_0, \ldots, x_k \in [a,b]$. Tomando x_i y x_j tales que $0 \leq i, j \leq k$ y $i \neq j$, si*

$$P(x) = \frac{(x - x_j) \cdot P_{0,\ldots,j-1,j+1,\ldots,k}(x) - (x - x_i) \cdot P_{0,\ldots,i-1,i+1,\ldots,k}(x)}{x_i - x_j}$$

entonces P es el polinomio de grado menor o igual que k que interpola a f en $x_0, \ldots, x_k$.

Demostración. Para simplificar la notación, sean $Q = P_{0,\ldots,j-1,j+1,\ldots,k}$ y $Q' = P_{0,\ldots,i-1,i+1,\ldots,k}$. Por la forma en la que hemos definido este tipo de polinomios, son de grado menor o igual que k. Para $0 \leq r \leq k$, si $r \neq i, j$, entonces

$$P(x_r) = \frac{(x_r - x_j) \cdot Q(x_r) - (x_r - x_i) \cdot Q'(x_r)}{x_i - x_j} = \frac{f(x_r) \cdot (x_r - x_j - x_r + x_i)}{x_i - x_j} = f(x_r)$$

No es difícil ver que $P(x_i) = Q(x_i) = f(x_i)$ y que $P(x_j) = Q'(x_j) = f(x_j)$

Por tanto para $0 \leq i \leq k$, tenemos que $P(x_i) = f(x_i)$. Por la unicidad del polinomio interpolador para los nodos $x_0, \ldots, x_k$, P es el único polinomio de grado menor o igual que k que interpola a f en dichos nodos. □

Corolario 2.9. *Si P es el polinomio de grado menor o igual que n que interpola a una función f en ciertos puntos $x_0, \ldots, x_n$, entonces*

$$P_{0,\ldots,n}(x) = \frac{(x - x_0) \cdot P_{1,\ldots,n}(x) - (x - x_n) \cdot P_{0,\ldots,n-1}(x)}{x_n - x_0}$$

[1] Consultar páginas 106-107 en [1].

2.5. Fórmula de Newton del polinomio interpolador

Sea $P_n(x)$ el polinomio de grado menor o igual que n que interpola a una cierta función f en los puntos $x_0, \ldots, x_n \in \mathbb{R}$. Cabe preguntarse si existe alguna forma de escribir P_n a partir de P_{n-1} (polinomio interpolador de f en $x_0, \ldots, x_{n-1}$ de grado menor o igual que $n-1$) sumado a un cierto polinomio $h(x)$, de forma que

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

Como P_{n-1} es de grado a lo sumo $n-1$, h debe ser un polinomio de grado a lo sumo n. Además, para $k = 0, \ldots, n-1$, debe cumplirse que $h(x_k) = 0$, puesto que $P_n(x_k) = f(x_k) = P_{n-1}(x)$, es decir, que los nodos de interpolación son raíces de h. Por tanto, h debe ser de la forma

$$h(x) = a_n\,(x - x_0) \cdots (x - x_{n-1})$$

Notemos que a_n debe ser una constante, ya que de lo contrario h podría ser un polinomio de grado superior a n. Por tanto, P_n sería de la forma

$$P_n(x) = P_{n-1}(x) + a_n\,(x - x_0) \cdots (x - x_{n-1})$$

Definición 2.10. Sea f una función definida en ciertos puntos $x_0, \ldots, x_n \in \mathbb{R}$ y sea P_{n-1} el polinomio que interpola a f en los puntos $x_0, \ldots, x_{n-1}$. Llamamos **diferencia dividida** de orden n de f respecto a los puntos $x_0, \ldots, x_n$ a

$$f[x_0, \ldots, x_n] = \frac{f(x_n) - P_{n-1}(x_n)}{(x_n - x_0) \cdots (x_n - x_{n-1})}$$

Teorema 2.11. *Sea f una función definida en $x_0, \ldots, x_n \in \mathbb{R}$ y sea $\sigma : \mathbb{N} \to \mathbb{N}$ una permutación. Entonces $f\,[x_0, \ldots, x_n] = f\left[x_{\sigma(0)}, \ldots, x_{\sigma(n)}\right]$. Además, se cumple que*

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

Demostración. Lo primero es inmediato, ya que sabemos que el polinomio que interpola a f en los puntos $x_0, \ldots, x_n$ es único. Por tanto, el coeficiente a_n de x^n es el mismo independientemente del orden de los puntos.

Para la segunda parte, vimos en el último corolario que

$$P_{0,\ldots,n}(x) = \frac{(x - x_0) \cdot P_{1,\ldots n}(x) - (x - x_n) \cdot P_{0,\ldots,n-1}(x)}{x_n - x_0}$$

El coeficiente del término x^n de la parte izquierda es $f[x_0, \ldots, x_n]$, mientras que en el de la derecha es la diferencia entre los términos x^n de $P_{1,\ldots n}(x)$ y $P_{0,\ldots,n-1}(x)$ que son, respectivamente, $f[x_1, \ldots, x_n]$ y $f[x_0, \ldots, x_{n-1}]$. Por tanto, como deben coincidir debido a la unicidad del polinomio interpolador,

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

como queríamos ver. □

Este teorema nos permite construir polinomios de forma recursiva, ya que

$$
\begin{aligned}
P_0(x) &= f[x_0] = f(x_0) \\
P_1(x) &= f[x_0] + f[x_0, x_1] \cdot (x - x_0) \\
P_2(x) &= f[x_0] + f[x_0, x_1] \cdot (x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2] \cdot (x - x_0) \cdot (x - x_1) \\
&\vdots \\
P_n(x) &= f[x_0] + \sum_{k=1}^{n} f[x_0, \ldots, x_k] \cdot \prod_{i=0}^{k-1} (x - x_i)
\end{aligned}
$$

Este método de construcción de polinomios es lo que conocemos como **fórmula de Newton** para el polinomio interpolador. Si además sacamos factor común en esta última fórmula, entonces decimos que el polinomio viene dado en la **forma de Horner**.

Ejemplo 2.12. Hallar el polinomio interpolador de grado 3 de la función $\sin(x)$ en los puntos 0, $\frac{1}{4}\pi$, $\frac{3}{4}\pi$ y π. Dar una cota superior del error.

Solución. Tenemos la tabla

x	$\sin(x)$	$f[\,,\,]$	$f[\,,\,,\,]$	$f[\,,\,,\,,\,]$
0	0	-	-	-
$\frac{1}{4}\pi$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\pi}$	-	-
$\frac{3}{4}\pi$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	0	$\frac{-8\sqrt{2}}{3\pi^2}$	-
π	0	$\frac{-2\sqrt{2}}{\pi}$	$\frac{-8\sqrt{2}}{3\pi^2}$	0

$$
P_3(x) = 0 + \frac{2\sqrt{2}}{\pi}x - \frac{8\sqrt{2}}{3\pi^2}x \cdot \left(x - \frac{\pi}{4}\right) + 0 \cdot x \cdot \left(x - \frac{\pi}{4}\right) \cdot \left(x - \frac{3\pi}{4}\right) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi}x - \frac{8\sqrt{2}}{3\pi^2}x \cdot \left(x - \frac{\pi}{4}\right)
$$

Para la cota, tomamos $x_a = \min\{x_0, \ldots, x_n\}$ y $x_b = \max\{x_0, \ldots, x_n\}$ y utilizamos que

$$
|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{\max\left\{\left|f^{n+1)}(x)\right| : x \in [x_a, x_b]\right\}}{(n+1)!} \cdot |(x - x_0) \cdots (x - x_n)|
$$

y en particular, para $f(x) = \sin(x)$, tenemos que la derivada $n+1$-ésima en este caso es su derivada cuarta, es decir, $f^{4)}(x) = \sin(x)$. Por tanto

$$
\max\left\{\left|f^{4)}(x)\right| : x \in \left\{0, \frac{1}{4}\pi, \frac{3}{4}\pi, \pi\right\}\right\} = \left|\sin\left(\frac{1}{4}\pi\right)\right| = \frac{\sqrt{2}}{2}
$$

Finalmente, sustituyendo en la fórmula anterior, tenemos que

$$
|\sin(x) - P_n(x)| \leq \frac{\sqrt{2}}{2 \cdot 24} \cdot \left|x \cdot \left(x - \frac{\pi}{4}\right) \cdot \left(x - \frac{3\pi}{4}\right) \cdot (x - \pi)\right|
$$

y faltaría calcular los extremos del polinomio $g(x) = x \cdot \left(x - \frac{\pi}{4}\right) \cdot \left(x - \frac{3\pi}{4}\right) \cdot (x - \pi)$.

Como ya hemos visto, podemos calcular el error cometido al aproximar una función $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ de clase C^{n+1} por un polinomio de grado menor o igual que n en los nodos $x_0, \ldots, x_n$ mediante la fórmula

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \cdot \Pi_n(x)$$

Sin embargo, en muchas ocasiones no seremos capaces de saber si una función es $n+1$ veces derivable y mucho menos calcular dicha derivada de forma sencilla. Debemos buscar alguna forma más sencilla de expresar el error de interpolación sin necesidad de recurrir a la derivada.

Teorema 2.13. *Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función y sean $x_0, \ldots, x_n \in [a,b]$. Si $P_n : [a,b] \to \mathbb{R}$ es el polinomio que interpola a f en los nodos $x_0, \ldots, x_n$, entonces*

$$f(x) - P_n(x) = f[x_0, \ldots, x_n, x] \cdot \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

Demostración. Sea $t \in [a,b]$ un punto en el que queremos saber el error de interpolación. Si $t = x_k$, para algún $k = 0, \ldots, n$, entonces el error es cero, puesto que el polinomio coincide con la función en dichos puntos. Supongamos ahora que t no es ninguno de los nodos. Si tomamos el polinomio $P_{n+1} : [a,b] \to \mathbb{R}$ de grado menor o igual que $n+1$ que interpola a f en los nodos junto a t, entonces

$$P_{n+1}(x) = P_n(x) + f[x_0, \ldots, x_n, t] \cdot \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

Si evaluamos en $x = t$, dado que el polinomio P_{n+1} y la función coinciden nuevamente en los nodos, tenemos que

$$f(t) = P_{n+1}(t) = P_n(t) + f[x_0, \ldots, x_n, t] \cdot \prod_{i=0}^{n} (t - x_i)$$

y por tanto

$$f(t) - P_n(t) = f[x_0, \ldots, x_n, t] \cdot \prod_{i=0}^{n} (t - x_i)$$

como queríamos ver. □

Esta es otra forma de expresar el error a partir de las diferencias divididas, que a veces será más útil que calcular varias derivadas. Sin embargo, el error que representan es el mismo en ambos casos, como denota el siguiente teorema.

Teorema 2.14. *Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ de clase C^n y sean $x_0, \ldots, x_n \in [a,b]$ puntos distintos. Entonces existe un $\xi \in (a,b)$ tal que*

$$f\,[x_0, \ldots, x_n] = \frac{f^{n)}(\xi)}{n!}$$

Demostración. Utilizando la fórmula que acabamos de ver para calcular el error mediante las diferencias divididas, tenemos que

$$f(x_n) - P_{n-1}(x_n) = f[x_0, \ldots, x_{n-1}, x_n] \cdot \prod_{i=0}^{n-1} (x_n - x_i)$$

Sin embargo, como la función es de clase C^n, también podemos utilizar el teorema del cálculo del error a partir de las derivadas de la función en un cierto $\xi \in (a, b)$, mediante la cual tenemos que

$$f(x_n) - P_{n-1}(x_n) = \frac{f^{n)}(\xi)}{n!} \cdot \Pi_{n-1}(x_n)$$

De esta forma, tenemos que

$$f[x_0, \ldots, x_{n-1}, x_n] \cdot \prod_{i=0}^{n-1} (x_n - x_i) = \frac{f^{n)}(\xi)}{n!} \cdot \Pi_{n-1}(x_n)$$

Podemos cancelar los polinomios nodales en ambos lados, puesto que $x_n \neq x_0, \ldots, x_{n-1}$ por hipótesis. Finalmente tendríamos que

$$f[x_0, \ldots, x_n] = \frac{f^{n)}(\xi)}{n!}$$

como queríamos ver. □

2.6. Nodos igualmente espaciados

Definición 2.15. Dados n puntos $x_0, \ldots, x_n$ tales que $x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n$, decimos que están **equiespaciados** si existe $h > 0$ tal que, para cualquier $k = 1, \ldots, n$, se tiene que

$$x_k - x_{k-1} = h$$

Proposición 2.16. *Sean $x_0, \ldots, x_n$ puntos equiespaciados cuya distancia entre dos consecutivos es $h > 0$. Entonces para cualquier $k = 1, \ldots, n$, se tiene que*

$$x_k = x_0 + kh$$

Demostración. Inmediato de la definición. □

Definición 2.17. Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función y $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ puntos equiespaciados por $h > 0$. Definimos el **operador diferencia** de la siguiente forma:

$$\Delta^k f(x) = \begin{cases} f(x) & \text{si} \quad k = 0 \\ \Delta^{k-1} f(x + h) - \Delta^{k-1} f(x) & \text{si} \quad k > 0 \end{cases}$$

Que los nodos de interpolación estén equiespaciados resulta en fórmulas mucho más sencillas para calcular polinomios. En concreto, si los utilizamos para reescribir la fórmula de Newton para el polinomio interpolador, obtenemos lo que se suele llamar como la **fórmula de diferencia progresiva de Newton**, que viene detallada en la siguiente proposición.

Proposición 2.18. *Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función y $x_0, \ldots, x_n \in [a,b]$ puntos equiespaciados por $h > 0$. Si $P_n : [a,b] \to \mathbb{R}$ es el polinomio que interpola a f en los nodos $x_0, \ldots, x_n$, entonces para cualquier $x \in [x_0, x_n]$, existe $s \geq 0$ tal que $x = x_0 + sh$ y*

$$P_n(x) = f(x_0) + \sum_{k=1}^{n} \Delta^k f(x_0) \cdot \frac{s \cdot (s-1) \cdots (s-(k-1))}{k!}$$

Demostración. Que $x \in [x_0, x_n]$ se pueda expresar como $x_0 + sh$ es inmediato. Veamos cómo se expresan las diferencias divididas utilizando el operador diferencia. Sabemos que por ser nodos equiespaciados, para $0 \leq k \leq n$ se tiene que $x_k = x_0 + kh$. Entonces

$$\begin{aligned}
f[x_0] &= f(x_0) = \Delta^0 f(x_0) \\
f[x_0, x_1] &= f[x_0, x_0 + h] = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = \frac{\Delta^1 f(x_0)}{h} \\
f[x_0, x_1, x_2] &= \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = \frac{\Delta^1 f(x_1) - \Delta^1 f(x_0)}{2h^2} = \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2h^2} \\
&\vdots \\
f[x_0, \ldots, x_n] &= \cdots = \frac{\Delta^n f(x_0)}{n! \cdot h^n}
\end{aligned}$$

Sustituyendo en la fórmula de Newton del polinomio interpolador, tenemos que

$$P_n(x) = f[x_0] + \sum_{k=1}^{n} f[x_0, \ldots, x_k] \cdot \prod_{i=0}^{k-1} (x - x_i) = f[x_0] + \sum_{k=1}^{n} \frac{\Delta^k f(x_0)}{k! \cdot h^k} \cdot \prod_{i=0}^{k-1} (x - x_i)$$

y utilizando que $x = x_0 + sh$ y $x_i = x_0 + ih$, tenemos

$$\begin{aligned}
P_n(x) &= f[x_0] + \sum_{k=1}^{n} \frac{\Delta^k f(x_0)}{k! \cdot h^k} \cdot \prod_{i=0}^{k-1} (x_0 + sh - x_0 - ih) = f[x_0] + \sum_{k=1}^{n} \frac{\Delta^k f(x_0)}{k! \cdot h^k} \cdot h^k \cdot \prod_{i=0}^{k-1} (s - i) \\
&= f(x_0) + \sum_{k=1}^{n} \Delta^k f(x_0) \cdot \frac{s \cdot (s-1) \cdots (s-(k-1))}{k!}
\end{aligned}$$

como queríamos ver. □

2.7. Polinomios de Chebyshev

Sean $a \leq x_0 < \cdots < x_n \leq b$ puntos equiespaciados por una distancia $h > 0$. Sabemos que dada una función $f : [a,b] \to \mathbb{R}$, si es de clase C^{n+1}, entonces el error que cometemos al interpolarla mediante un polinomio $P_n : [a,b] \to \mathbb{R}$ de grado menor o igual que n está acotado de la forma

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{\sup\left\{\left|f^{n+1)}(x)\right| : x \in [a,b]\right\}}{(n+1)!} \cdot |\Pi_n(x)|$$

y utilizando la acotación

$$|\Pi_n(x)| \leq \frac{n!}{4} h^{n+1}$$

vista en el ejercicio 1 de la hoja 2, tenemos que

$$\begin{aligned} |f(x) - P_n(x)| &\leq \frac{\sup\{\left|f^{n+1)}(x)\right| : x \in [a,b]\}}{(n+1)!} \cdot |\Pi_n(x)| \leq \frac{\sup\{\left|f^{n+1)}(x)\right| : x \in [a,b]\}}{(n+1)!} \cdot \frac{n!}{4} h^{n+1} \\ &\leq \frac{\sup\{\left|f^{n+1)}(x)\right| : x \in [a,b]\}}{4\,(n+1)} \cdot h^{n+1} \end{aligned}$$

La pregunta que nos hacemos es si este polinomio siempre converge de forma uniforme a la función cuando n tiende a infinito (spoiler, no).

En 1900, el matemático alemán Carl Runge demostró que dada la función $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$ y dados ciertos puntos equiespaciados $x_0, \ldots, x_n$, los polinomios interpoladores convergen uniformemente hacia la función cuando $n \to \infty$ para $|x| < 3.63$. Sin embargo, en el resto de puntos no solo no converge uniformemente, sino que no converge en absoluto. Del mismo modo, para la función valor absoluto, los polinomios interpoladores no convergen en ningún intervalo de $[-1, 1]$.

Esto se debe a que, aunque estemos aumentando la precisión en los puntos que tomamos como nodos a medida que el grado del polinomio aumenta, los extremos se alejan cada vez más de los valores de la función. Este efecto es lo que conocemos como **fenómeno de Runge**.

Sin embargo, vimos que para cualquier función, podemos encontrar un polinomio que converja de forma uniforme a la función en intervalos cerrados y acotados (Teorema 2.1), por lo que debe existir, aunque no sabemos cuál es.

Vimos que el error cometido al aproximar una función mediante su polinomio interpolador de grado menor o igual que n está acotado por el máximo de la derivada $n+1$-ésima multiplicado por el polinomio nodal de orden n (Teorema 2.7). Con respecto a la derivada poco se puede hacer, puesto que la función es la que es. Sin embargo, quizá exista un modo de tomar los nodos de interpolación de forma que el polinomio nodal sea mínimo.

Definición 2.19. Llamamos **polinomios de Chebyshev** a la sucesión de funciones $T_n : [-1, 1] \to \mathbb{R}$ definidas de la forma

$$T_n(x) = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad n = 0 \\ x & \text{si} \quad n = 1 \\ 2x \cdot T_{n-1}(x) - T_{n-2}(x) & \text{si} \quad n \geq 2 \end{cases}$$

Como veremos más adelante, las raíces de estos polinomios resultarán fundamentales para reducir el tamaño del polinomio nodal y, consecuentemente, el error al interpolar. Veamos antes de nada algunas propiedades de de los polinomios definidos de esta forma.

Proposición 2.20. *Sea $x \in [-1,1]$ y n un entero no negativo. Entonces*

1. *Para cualquier $\theta \in \mathbb{R}$ se cumple que $T_n(\cos(\theta)) = \cos(n\theta)$ o, equivalentemente, que $T_n(x) = \cos(\arccos(x) \cdot n)$.*
2. *$T_n(x)$ tiene grado n y como coeficiente director[a], 2^{n-1}.*
3. *Las raíces de $T_n(x)$ son los puntos*
$$\eta_{k,n} = \cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right)$$
donde $k = 1, \dots, n$.
4. *$T_n(x)$ tiene extremos relativos en el intervalo $[-1,1]$ y son de la forma $z_{k,n} = \cos\left(\frac{k\pi}{n}\right)$, donde $0 \leq k \leq n$ y, por tanto,*
$$\text{máx}\{|T_n(x)| : x \in [-1,1]\} = 1$$
5. *Son ortogonales con respecto a la función $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ (función peso), es decir, que*
$$\int_{-1}^{1} \frac{T_n(x) \cdot T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,dx = \begin{cases} 0 & \text{si } m \neq n \\ \frac{\pi}{2} & \text{si } m = n \end{cases}$$

[a] El coeficiente director es el que acompaña al término de mayor grado del polinomio.

Demostración. Vamos paso a paso:

1. Es claro que para $n = 0$ y $n = 1$ se cumple. Razonemos por inducción. Supongamos que se cumple hasta cierto $n \geq 2$ y nos preguntamos si para $n + 1$ sigue cumpliéndose.
$$T_{n+1}(\cos(\theta)) = 2 \cdot \cos(\theta) \cdot T_n(\cos(\theta)) - T_{n-1}(\cos(\theta)) = 2 \cdot \cos(\theta) \cdot \cos(n\theta) - \cos((n-1)\,\theta)$$
Utilizando las propiedades de la suma de ángulos, tenemos que
$$\cos((n-1)\,\theta) = \cos(n\theta - \theta) = \cos(n\theta) \cdot \cos(\theta) - \sin(n\theta) \cdot \sin(\theta)$$
y al sustituir y cancelar los $(\cos(\theta)) \cdot \cos(n\theta)$, tenemos que
$$(\cos(\theta)) \cdot \cos(n\theta) + \sin(n\theta) \cdot \sin(\theta) = \cos(n\theta + \theta) = \cos((n+1)\,\theta)$$
como queríamos probar. La otra igualdad sale al hacer el cambio $x = \cos(\theta)$.
2. Es inmediato utilizando inducción sobre n.
3. Lo comprobamos.
$$T_n\left(\cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right)\right) = \cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi n\right) = \cos\left(\frac{2k-1}{2}\pi\right) = \cos\left((2k-1)\,\frac{\pi}{2}\right) = 0$$
donde la última igualdad es consecuencia de que $2k-1$ es siempre un número entero impar.
4. Sabemos que
$$T_n(x) = \cos(\arccos(x) \cdot n)$$

y sustituyendo con $x = z_{k,n}$, como $\frac{k\pi}{n} \geq 0$[2], tenemos que

$$T_n(z_{k,n}) = \cos\left(\arc\cos\left(\cos\left(\frac{k\pi}{n}\right)\right) \cdot n\right) = \cos\left(\frac{k\pi}{n} n\right) = \cos(k\pi) = (-1)^k$$

así que deben ser máximos y mínimos, puesto que la función coseno está acotada entre -1 y 1. Veamos ahora que son los únicos. Supongamos $x_0 \in [-1,1]$ tal que $T_n(x_0) = 1$. Entonces

$$1 = T_n(x_0) = \cos(\arc\cos(x_0) \cdot n)$$

es decir, que con $k \in \mathbb{Z}$,

$$2k\pi = \arc\cos(x_0) \cdot n \iff \frac{2k\pi}{n} = \arc\cos(x_0)$$

y como $\cos(\arc\cos(x)) = x$ para $x \in [-1,1]$[3], al aplicarlo en ambos lados tenemos que

$$x_0 = \cos\left(\frac{2k}{n}\pi\right)$$

como queríamos ver. Un argumento similar se puede utilizar si $T_n(x_0) = -1$.

$\square$

Debido a las propiedades que tienen estos polinomios, resultan muy convenientes para elegir los nodos de interpolación (que van a ser las raíces de estos polinomios). De hecho, vamos a ver que nos los proporcionan de manera óptima, de forma que el error cometido se minimiza.

Proposición 2.21. *Sea $Q_n(x)$ un polinomio mónico*[a] *de grado n. Entonces*

$$\text{máx}\left\{\left|\frac{T_n(x)}{2^{n-1}}\right| : x \in [-1,1]\right\} \leq \text{máx}\{|Q_n(x)| : x \in [-1,1]\}$$

[a] Es decir, que su coeficiente director es 1.

Demostración. Vamos a razonar por reducción al absurdo. Supongamos que

$$\text{máx}\{|Q_n(x)| : x \in [-1,1]\} < \frac{1}{2^{n-1}} = \text{máx}\left\{\left|\frac{T_n(x)}{2^{n-1}}\right| : x \in [-1,1]\right\}$$

y sea

$$R(x) = \frac{T_n(x)}{2^{n-1}} - Q_n(x)$$

de grado $n-1$. Sean además $z_{0,n}, \ldots, z_{n,n}$ puntos de la forma

$$z_{k,n} = \cos\left(\frac{k\pi}{n}\right), \quad 0 \leq k \leq n$$

[2] Esto se utiliza para poder cancelar el coseno con el arco coseno.
[3] Esto se debe a que $\arc\cos(x) \in [0,\pi]$ y la función coseno es inyectiva en dicho intervalo.

Entonces $T_n(z_{k,n}) = (-1)^k$ y, en particular, $T_n(\cos(0)) = 1$ y $T_n(\cos(\pi)) = \cos(n\pi) = (-1)^n$. Tenemos que

$$
\begin{aligned}
R(z_{0,n}) &= \frac{1}{2^{n-1}} - Q(z_{0,n}) > 0 \\
R(z_{1,n}) &= \frac{-1}{2^{n-1}} - Q(z_{1,n}) < 0 \\
R(z_{2,n}) &= \frac{1}{2^{n-1}} - Q(z_{2,n}) > 0 \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

De esta forma comprobamos que R cambia de signo n veces y por tel Teorema de Bolzano, debe tener n raíces, pero al ser un polinomio de grado $n-1$, esto es imposible. Así, tenemos que

$$\text{máx}\left\{\left|\frac{T_n(x)}{2^{n-1}}\right| : x \in [-1,1]\right\} \leq \text{máx}\{|Q_n(x)| : x \in [-1,1]\}$$

como queríamos ver □

Teorema 2.22. *Sea $f : [-1,1] \to \mathbb{R}$ una función de clase C^{n+1} y $P_n : [-1,1] \to \mathbb{R}$ su polinomio interpolador de grado menor o igual que n respecto a $n+1$ raíces del polinomio de Chebyshev de orden $n+1$. Entonces*

$$\text{máx}\{|f(x) - P_n(x)| : x \in [-1,1]\} \leq \frac{1}{2^n\,(n+1)!} \cdot \text{máx}\left\{\left|f^{n+1)}(x)\right| : x \in [-1,1]\right\}$$

Si en lugar de tener una función definida en el intervalo $[-1,1]$ tenemos $f : [a,b] \to \mathbb{R}$, podemos seguir utilizando los nodos de Chebyshev aplicando el cambio de variable dado por

$$x \in [-1,1] \mapsto y = \frac{b-a}{2}x + \frac{b+a}{2} \in [a,b]$$

que deja los nodos de la forma

$$z_{k,n} = \frac{b-a}{2} \cdot \cos\left(\frac{(2k+1)}{2\,(n+1)!}\pi\right) + \frac{b+a}{2}$$

2.8. Interpolación de Hermite

Hasta ahora, cuando interpolamos, solo tomamos en cuenta el valor de la función en ciertos puntos concretos y construimos un polinomio a partir de las imágenes de la función en dichos puntos. Sin embargo, si tenemos más información de la función, podemos construir un polinomio que interpole mejor. En particular, si conocemos el valor de las derivadas de la función en los nodos, podemos intentar forzar que las derivadas del mismo orden del polinomio tengan el mismo valor. Introducimos así la **interpolación de Hermite**, llamada así en honor al matemático francés Charles Hermite.

Teorema 2.23. *Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función y sean $x_0, \ldots, x_n \in [a,b]$. Supongamos que conocemos $f(x_k), f'(x_k), \ldots, f^{m_k)}(x_k)$. Entonces existe un único polinomio de grado n tal que, para cualesquiera $0 \leq k \leq n$ y $0 \leq r \leq m_k$, se cumple que*

$$P_n^{r)}(x_k) = f^{r)}(x_k)$$

Demostración. Consultar las páginas 126-128 de [1]. □

Ejemplo 2.24. Sea la función $f(x) = \sqrt{x}$ y los nodos $x_0 = 1$ y $x_1 = 2$. Demostrar que existe un único polinomio $P_2(x)$ tal que

$$P_2(1) = f(1), \quad P_2(2) = f(2), \quad P_2'(1) = f'(1)$$

Solución. Tomemos $P_2(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ y su derivada $P_2'(x) = a_1 + 2a_2x$. Al plantear un sistema de tres ecuaciones con los datos que tenemos, no es difícil ver que existe solución única, que en este caso es $P_2(x) = 0.414 + 0.672x - 0.086x^2$.

2.8.1. Forma de Newton con interpolación de Hermite

Recordemos que

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

donde ξ pertenece al interior del menor intervalo que forman los nodos. Sin embargo, si $x_0 = x_n$ entonces $\xi = x_0$ forzosamente. Esto nos es útil para dar la siguiente definición.

Definición 2.25. Llamamos **diferencias divididas generalizadas** a

$$f[x_0, \dots, x_k] = \begin{cases} \frac{f[x_1,\dots,x_k] - f[x_0,\dots,x_{k-1}]}{x_k - x_0} & \text{si} \quad x_k \neq x_0 \\ \\ \frac{f^{k)}(x_0)}{k!} & \text{si} \quad x_k = x_0 \end{cases}$$

Esta definición completa la que vimos de diferencias divididas. En el siguiente teorema, veremos que podemos utilizar estas nuevas diferencias divididas para reescribir el polinomio interpolador en la forma de Newton.

Teorema 2.26. *Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función lo suficientemente derivable[a] y sean $y_0, \dots, y_k \in [a, b]$ no necesariamente distintos. Supongamos que, para cada $i = 0, \dots, n$, conocemos hasta la derivada m_i-ésima de f en el punto x_i. Entonces el polinomio interpolador $P_n : [a, b] \to \mathbb{R}$ de grado n se obtiene de la forma*

$$P_n(x) = f[y_0] + \sum_{i=1}^{n} f[y_0, \dots, y_k] \cdot \prod_{j=0}^{i-1} (x - y_j)$$

[a]Necesitamos garantizar la existencia de las derivadas $m_1, \dots, m_k$, por lo que esta condición es equivalente a decir que dado $M = \text{máx}\{m_0, \dots, m_k\}$, f es de clase C^{M+1}.

Si del punto x_k conocemos hasta la derivada m_k-ésima, esto nos brinda m_k condiciones para construir el polinomio, por lo que vamos a necesitar menos nodos de interpolación, pero a cambio vamos a requerir conocer todas esas derivadas.

2.9. Interpolación por splines

En general, aproximar funciones mediante polinomios es muy útil en muchos casos. Sin embargo, cuando queremos ganar cierta precisión al interpolar y elevamos el grado del polinomio, este se vuelve mucho más propenso a sufrir cambios muy bruscos cuando se altera. Por tanto, no siempre vamos a poder utilizarlos para interpolar.

Un enfoque alternativo para aproximar funciones es dividir el intervalo en el que queremos interpolar la función en subintervalos y construir un polinomio para cada uno de estos subintervalos. Esta idea es la que da lugar a la interpolación mediante splines.

Definición 2.27. Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función y sean los puntos $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_k = b$. Llamamos **spline** (polinomial) interpolante de f de grado n en los nodos anteriores a una función $S : [a, b] \to \mathbb{R}$ que cumple:

1. $S\restriction_{[x_i x_{i+1}]}(x)$ es un polinomio de grado n.
2. $S \in C^{n-1}([a, b])$.

Por lo general, denotaremos como $S_i : [x_{i-1}, x_i] \to \mathbb{R}$ con $1i = 1, \ldots, n$ al polinomio del spline que actúa en el intervalo i-ésimo.

2.9.1. Splines cúbicos

De entre todos los grados posibles para los splines, hay uno que se utiliza con más frecuencia que el resto.

Definición 2.28. Un spline se dice **cúbico** si es de grado 3 en cada subintervalo y de clase C^2.

Pese a que los polinomios son infinitamente derivables, puede darse el caso de que en los extremos de los subintervalos haya problemas si derivamos muchas veces. Esto nos lleva a dar las siguientes condiciones.

Proposición 2.29. *Sea $S : [a, b] \to \mathbb{R}$ un spline cúbico que interpola a cierta función $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ respecto a ciertos nodos $x_0, \ldots, x_n$. Se cumplen:*

1. *$S(x_k) = f(x_k)$ para cada $k = 0, \ldots, n$ (es decir, interpola a f en los nodos).*
2. *$S_k(x_k) = S_{k+1}(x_k)$ para cada $k = 0, \ldots, n$ (es decir, que las gráficas en cada trozo se pegan).*
3. *Las derivadas primera y segunda coinciden en los extremos de los subintervalos, es decir,*

$$S_k'(x_k) = S_{k+1}'(x_k), \quad S_k''(x_k) = S_{k+1}''(x_k)$$

   para cada $k = 1, \ldots, n-1$ (es decir, la transición entre intervalos es suave).

Cada subintervalo i-ésimo de un spline cúbico vendrá dado por un polinomio de grado 3, es decir, que será de la forma

$$A_i x^3 + B_i x^2 + C_i x + D_i = 0$$

Tenemos por tanto 4 incógnitas por cada intervalo, y como hay n intervalos, tenemos un total de $4n$ incógnitas. Para poder despejar todas ellas, tenemos que hacer uso de algunas ecuaciones que nos vienen dadas:

1. Del hecho de que $S(x_k) = f(x_k)$ para cada $0 \leq k \leq n$, tenemos $n + 1$ ecuaciones.
2. Dado que $S_k(x_k) = S_{k+1}(x_k)$ para cada $1 \leq k \leq n-1$, obtenemos $n - 1$ ecuaciones.
3. Como las derivadas primera y segunda coinciden en los nodos, tenemos $2(n-1)$ ecuaciones.

Esto nos da un total de $4n-2$ ecuaciones, así que necesitamos dos extra para poder obtenerlo de forma unívoca. Estas dos últimas condiciones que se le imponen vienen dadas por el tipo de spline que sea. Vamos a definir los más comunes.

Definición 2.30. Sea $S:[a,b]\to\mathbb{R}$ un spline cúbico. Decimos que es un **spline (cúbico) natural** (o de tipo 1) si la derivada segunda se anula en x_0 y en x_n, es decir,

$$S''(x_0)=S''(x_n)=0$$

Definición 2.31. Sea $S:[a,b]\to\mathbb{R}$ un spline cúbico y $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ la función a la que interpola. Decimos que es un **spline (cúbico) de frontera sujeta** (o de tipo 2) si su derivada primera coincide con la de f en x_0 y x_n, es decir,

$$S'(x_0)=f'(x_0)\,,\quad S'(x_n)=f'(x_n)$$

A modo de curiosidad, lo splines naturales reciben este nombre por el comportamiento que tenían las varillas de madera que se utilizaban para dibujar las gráficas.

El modo de construir estos splines es sencillo, pero puede resultar algo costoso. La mejor estrategia es armarse de paciencia e ir despejando poco a poco cada una de las incógnitas de cada uno de los polinomios. **Existen otros métodos para calcularlos que sí se han visto en clase**, despejando las incógnitas en función de la distancia entre los nodos (puesto que si se toman equiespaciados, la distancia entre ellos es constante en cada intervalo), pero que no merece la pena explicar, ya que es más sencillo este método, tanto de recordar como de llevar a cabo.

El siguiente teorema resume de forma apropiada todo lo visto anteriormente.

Teorema 2.32. (Existencia y unicidad) *Sean $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ y sea $f:[a,b]\to\mathbb{R}$. Existe un único spline cúbico que, para $i=0,\dots,n$, satisface que $S(x_i)=f(x_i)$ y una de las condiciones siguientes:*

1. *$S''(a)=S''(b)=0$, es decir, un spline natural.*
2. *$S'(a)=f'(a)$ y $S'(b)=f'(b)$, es decir, un spline cúbico.*

Demostración. Se deduce de la construcción dada. □

2.9.2. Propiedades de los splines cúbicos.

Teorema 2.33. *Sean $a=x_0<\cdots<x_n=b$ y sea $f\in C^2([a,b])$. Si $S:[a,b]\to\mathbb{R}$ es un spline natural o sujeto que interpola a f en los nodos x_i, entonces*

$$\int_a^b (S''(x))^2\,dx \le \int_a^b (f''(x))^2\,dx$$

Demostración. Sea $g(x)=f(x)-S(x)$. Es claro que, para cualquier $i=0,\dots,n$, tenemos que $g(x_i)=0$. Además, tenemos que

$$g=f-S \implies g''=f''-S'' \implies (g'')^2=(f'')^2+(S'')^2-2f''\cdot S''$$

luego tenemos que

$$\int_a^b (f''(x))^2\ \mathrm{d}x = \int_a^b (S''(x))^2\ \mathrm{d}x + \int_a^b (g''(x))^2\ \mathrm{d}x + 2\int_a^b S''(x)\,g''(x)\ \mathrm{d}x$$

La integral $\int_a^b (g''(x))^2$ es mayor o igual que cero, por lo que basta comprobar que $2\int_a^b S''(x)\,g''(x)\ \mathrm{d}x \geq 0$.

$$\int_a^b S''(x)\,g''(x)\ \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} S''(x)\,g''(x)\ \mathrm{d}x$$

e integrando por partes con $u = S''(x)$ y $\mathrm{d}v = g''(x)\ \mathrm{d}x$, tenemos

$$\sum_{i=0}^{n-1}\left(S''(x_{i+1})\cdot g'(x_{i+1}) - S''(x_i)\,g'(x_i) - \int_{x_i}^{x_{i+1}} S'''(x)\,g'(x)\ \mathrm{d}x\right) = S''(x_n)\,g'(x_n) - S''(x_0)\,g'(x_0) - \sum_{i=0}^{n-1} c_i \int_{x_i}^{x_{i+1}} g'(x)\ \mathrm{d}x$$

Si S es un spline natural,

$$S''(x_0) = S''(x_n) = 0$$

y si S es un spline sujeto,

$$S'(x_0) = f'(x_0)\,, \quad S'(x_n) = f'(x_n) \implies g'(x_0) = g'(x_n) = 0$$

En cualquier caso, tenemos que

$$S''(x_n)\,g'(x_n) - S''(x_0)\,g'(x_0) = 0$$

y como cada S_i es un polinomio de grado 3, la derivada tercera de S debe ser una constante diferente en cada uno de los intervalos. Si denominamos como C_i a la constante en el intervalo i-ésimo, tenemos que

$$2\int_a^b S''(x)\,g''(x)\ \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n-1} C_i \int_{x_i}^{x_{i+1}} g'(x)\ \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n-1} C_i\cdot(g(x_{i+1}) - g(x_i)) = 0$$

donde la última igualdad es consecuencia de que, para cada $k = 0,\ldots,n$, tenemos $S(x_k) = f(x_k)$. Por tanto, tenemos que

$$\int_a^b (f''(x))^2\ \mathrm{d}x = \int_a^b (S''(x))^2\ \mathrm{d}x + \int_a^b (g''(x))^2\ \mathrm{d}x + 0 \geq \int_a^b (S''(x))^2\ \mathrm{d}x$$

como queríamos probar. □

Capítulo 3

Diferenciación e integración numérica

El cálculo de derivadas e integrales tienen como base el cálculo de límites, puesto que la primera es el límite de un cociente y la segunda es el límite de una suma. Los ordenadores no son capaces de calcularlas de forma exacta, puesto que el término “infinito” no tiene sentido en computación. Por tanto, si queremos calcular derivadas o integrales de forma computacional, debemos encontrar procesos finitos que nos las calculen con cierta precisión.

3.1. Diferenciación numérica

Si recordamos la definición de derivada, decíamos que una función $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ era derivable en $x_0 \in [a,b]$ si existía cierto $L \in \mathbb{R}$ tal que

$$\lim_{h\to 0} \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} = L$$

El problema de calcular derivadas de forma numérica es que en muchas ocasiones nos vamos a encontrar el problema de la cancelación sustractiva, puesto que estamos restando números muy parecidos. Los algoritmos para calcularlas no son estables por lo general, por lo que no interesa demasiado calcularlas numéricamente.

Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función de clase C^2 y sea $h > 0$. Utilizando el polinomio de Taylor con resto de Lagrange, existe $\xi \in (x, x+h)$ tal que

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

y despejando de esta ecuación, tenemos que

$$f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} - \frac{f''(\xi)}{2!}h$$

Así, obtenemos una manera de aproximar derivadas con un error absoluto de la forma

$$E_{\text{abs}} = \left|\frac{f''(\xi)}{2!}h\right|$$

que es una función $o(h)$. Para $h < 0$ el resultado es análogo.

Supongamos ahora que $f \in C^3([a,b])$. Entonces dado $h > 0$, de nuevo existe $\xi \in (x, x+h)$ (que no tiene por qué coincidir con el de antes) tal que

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)\,h + \frac{f''(x)}{2!}h^2 + \frac{f'''(\xi)}{3!}h^3$$

y de forma análoga, existe $\eta \in (x-h, x)$ tal que

$$f(x-h) = f(x) + f'(x)\,(-h) + \frac{f''(x)}{2!}\,(-h)^2 + \frac{f'''(\eta)}{3!}\,(-h)^3$$

Si restamos ambas ecuaciones y despejamos, tenemos que

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(\xi) + f'''(\eta)}{2} \cdot \frac{h^2}{3!}$$

De esta forma, obtenemos un error tal que

$$E_{\text{abs}} = \left| \frac{f'''(\xi) + f'''(\eta)}{2} \cdot \frac{h^2}{3!} \right|$$

que es una función $o(h^2)$. Como

$$f'''(\eta) \leq \frac{f'''(\xi) + f'''(\eta)}{2} \leq f'''(\xi)$$

y f''' es continua, por el Teorema de los valores intermedios, existe $\theta \in (\eta, \xi)$ tal que

$$f'''(\theta) = \frac{f'''(\xi) + f'''(\eta)}{2}$$

por lo que

$$E_{\text{abs}} = \left| f'''(\theta) \cdot \frac{h^2}{3!} \right|$$

Si suponemos que $f \in C^4([a,b])$ y hacemos un proceso análogo, tenemos que

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{f^{\,iv)}(\xi) - f^{\,iv)}(\eta)}{2} \cdot \frac{h^2}{12}$$

y por tanto su error será

$$E_{\text{abs}} = \left| \frac{f^{\,iv)}(\xi) - f^{\,iv)}(\eta)}{2} \cdot \frac{h^2}{12} \right|$$

Aplicando nuevamente el Teorema de los valores intermedios, existe $\theta \in (\eta, \xi)$ (que no tiene por qué coincidir con el anterior) tal que

$$f^{\,iv)}(\theta) = \frac{f^{\,iv)}(\xi) - f^{\,iv)}(\eta)}{2}$$

y por tanto tenemos que

$$E_{\text{abs}} = \left| f^{\,iv)}(\theta) \cdot \frac{h^2}{12} \right|$$

3.1.1. Análisis de errores

Ejemplo 3.1. Sea $f(x) = x^4$. Calcular de forma aproximada $f'(2)$.

Solución. Llamamos

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

y entonces utilizando la fórmula del error, tenemos la siguiente tabla:

h	$Df(x)$	Error
10^{-1}	32.08	0.08
10^{-2}	32.0008	0.0008
10^{-3}	32.000008	0.000008
10^{-4}	32.00000008	0.00000008
10^{-5}	$32 + 0.8 \cdot 10^{-12}$	0.00000001
10^{-6}	$32 + 0.8 \cdot 10^{-15}$	0.00000000008
10^{-7}	31.999999	0.0001
10^{-8}	31.999222	0.0001

Hasta $h = 10^{-6}$, el error se va reduciendo. Esto se debe a que al calcular

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

estamos en realidad trabajando con aproximaciones de dicha función, por lo que estamos calculando

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

donde para ε_1 y ε_2 pequeños, son

$$\bar{f}(x+h) = f(x+h)(1+\varepsilon_1), \quad \bar{f}(x-h) = f(x-h)(1+\varepsilon_2)$$

Sea $\varepsilon = \text{mín}\{\varepsilon_1, \varepsilon_2\}$. Tenemos que

$$\left| f'(x) - \frac{\bar{f}(x+h) - \bar{f}(x-h)}{2h} \right| = \left| f'(x) - \frac{f(x+h)(1+\varepsilon_1) - f(x-h)(1+\varepsilon_2)}{2h} \right| =$$

$$= \left| f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f(x+h)\varepsilon_1 - f(x-h)\varepsilon_2}{2h} \right| \leq$$

$$\leq \left| f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \right| + \left| \frac{f(x+h)\varepsilon_1 - f(x-h)\varepsilon_2}{2h} \right| \leq$$

$$\leq \text{máx}\{|f'''(y)| : y \in [x-h, x+h]\} \cdot \frac{h^2}{9} + \text{máx}\{|f(y)| : y \in [x-h, x+h]\} \cdot \frac{\varepsilon}{h} \leq$$

$$\leq \frac{M_3}{6}h^2 + M_0\frac{\varepsilon}{h}$$

donde M_0 y M_3 son constantes.

Sea ahora

$$E(h) = M_0\frac{\varepsilon}{h} + \frac{M_3}{6}h^2$$

Queremos calcular el mínimo de esta función, así que calculamos su derivada

$$E'(h) = \frac{-M_0\varepsilon}{h^2} + \frac{2M_3}{6}h$$

que se anula cuando $h = \sqrt[3]{\frac{3M_0}{M_3}\varepsilon} \approx C \cdot \sqrt[3]{\varepsilon}$, donde C es una constante.

3.1.2. Otras fórmulas de derivación

Veamos una fórmula para la derivada quinta. Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ y supongamos que $f \in C^5([a,b])$. Entonces tomando $x \in (a,b)$, $h > 0$ y utilizando el Teorema de los valores intermedios en $f^{v)}$, tenemos que existe $\xi \in (x-h, x+h)$ tal que

$$-f'(x) = \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h} + \frac{f^{v)}(\xi)}{30}h^4$$

Veamos ahora otra fórmula un poco más general. Sean $x_0, \dots, x_n \in [a,b]$. Entonces existe cierto $\xi_x \in [a,b]$ tal que

$$f(x) = P_n(x) + \frac{f^{n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \cdot \Pi_n(x)$$

y utilizando que

$$\frac{f^{n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} = f[x_0, \dots, x_n, x]$$

tenemos que

$$f(x) = P_n(x) + f[x_0, \dots, x_n, x] \cdot \Pi_n(x)$$

Notemos que la diferencia dividida $f[x_0, \dots, x_n, x]$ es una función que depende de x. Derivando esta expresión, tenemos que

$$f'(x) = P_n'(x) + (f[x_0, \dots, x_n, x])' \cdot \Pi_n(x) + f[x_0, \dots, x_n, x] \cdot (\Pi_n)'(x)$$

Sabiendo que

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

podemos calcular su derivada

$$P_n'(x) = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2]\,(x - x_0 + x - x_1) + \cdots$$

Si $f \in C^{n+2}([a,b])$ se puede demostrar[1] que para cualquier $x \in [a,b]$, existe η_x tal que

$$(f[x_0, \dots, x_n, x])' = \frac{f^{n+2)}(\eta_x)}{(n+2)!}$$

Por último, utilizando las propiedades que ya conocemos de Π_n, tenemos que para cualquier $i \in \{0, \dots, n\}$, se cumple que $\Pi_n(x_i) = 0$ y que

$$(\Pi_n)'(x_i) = \prod_{j=0,\, j\neq i}^{n} \left(x_i - x_j\right)$$

Juntando todas estas ideas, tenemos que

$$f'(x_i) = P_n'(x_i) + f[x_0, \dots, x_n, x] \cdot (\Pi_n)'(x_i) = P_n'(x_i) + \frac{f^{n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \cdot \prod_{j=0,\, j\neq i}^{n} \left(x_i - x_j\right)$$

En el caso $n = 1$ y tomando los nodos $\{x_0, x_0 + h\}$ tenemos

$$P_1'(x) = f[x_0, x_0 + h] = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

[1]Pero no se ha demostrado.

3.2. Integración numérica

Cuando una función carece de primitiva o es difícil de calcular, recurrimos a métodos numéricos para calcularlas. Existen diferentes métodos para calcularlas, algunos más sencillos y otros más efectivos, pero todos se basan en la suma de cantidades finitas de la forma

$$\int_a^b f(x) \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \cdot a_i$$

donde f es una función definida, al menos, en los puntos $x_0, \ldots, x_n$ y $a_0, \ldots, a_n \in \mathbb{R}$.

3.2.1. Método de los trapecios

Definición 3.2. Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función integrable y sean $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$. El **método de los trapecios** para aproximar su integral en $[a, b]$ consiste en tomar trapecios bajo la función cuyos vértices coincidan con los puntos y las imágenes antes tomadas y sumar sus áreas.

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} \cdot \frac{(x_{i+1} - x_i)}{n}$$

Se dice que es **simple** si $n = 1$ (y por tanto los únicos puntos son a y b), y se dice que es **compuesto** si $n > 1$ (es decir, si tomamos más de dos puntos).

Calcular integrales utilizando este método es muy sencillo, por lo que en general tendrá resultados mediocres. No obstante, veamos cómo se desarrolla.

En primer lugar, vamos a ver que cuando tomamos $n = 1$, lo que hacemos en realidad es calcular la integral del polinomio interpolador de grado 1 que interpola a la función en a y en b.

3.2.1.1. Algoritmo de aproximación simple

Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$. Su polinomio interpolador de grado uno será entonces

$$P_1(x) = f(a) + f[a, b]\,(x - a)$$

En el tema anterior vimos que el error que cometíamos al interpolar la función en $[a, b]$ podía expresarse en función de la derivada segunda, si es que esta existía y era continua. Supongamos ambas cosas. Para cualquier $x \in [a, b]$, existe entonces $\xi_x \in (a, b)$ tal que

$$f(x) = P_1(x) + \frac{f''(\xi_x)}{2}\,(x - a)\,(x - b)$$

Como P_1 es un polinomio y la derivada segunda de f es continua, son ambas funciones integrables y

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \int_a^b P_1(x)\ \mathrm{d}x + \int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2}\,(x - a)\,(x - b)\ \mathrm{d}x$$

Solo nos interesa la primera integral, que es la que nos da una aproximación de la integral de f en $[a, b]$ (la segunda parte servirá para calcular el error). Tenemos que la integral es

$$\int_a^b P_1(x)\ \mathrm{d}x = \int_a^b f(a) + f[a, b]\,(x - a)\ \mathrm{d}x = f(a) \cdot (b - a) + \frac{f[a, b] \cdot (b - a)^2}{2}$$

y sustituyendo en la ecuación de la integral de f eliminando el error, tenemos que

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \approx \int_a^b P_1(x)\ \mathrm{d}x = f(a)\cdot(b-a) + \frac{f[a,b]\cdot(b-a)^2}{2} = f(a)\cdot(b-a) + \frac{\frac{f(b)-f(a)}{b-a}\,(b-a)^2}{2}$$
$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \approx \frac{2f(a)\cdot(b-a)+(f(b)-f(a))\cdot(b-a)}{2} = \frac{f(b)+f(a)}{2}\,(b-a)$$

como queríamos ver.

Para calcular el error que cometemos al aproximar la integral de esta forma, tenemos primero que ver un teorema que utilizaremos.

Teorema 3.3. (Valor medio generalizado del cálculo integral) *Sean $f, g : [a,b] \to \mathbb{R}$ continuas y supongamos que g no cambia de signo. Entonces existe $t \in [a,b]$ tal que*

$$\int_a^b f(x)\cdot g(x)\ \mathrm{d}x = f(t)\cdot\int_a^b g(x)\ \mathrm{d}x$$

Demostración. Si $g \equiv 0$ el resultado es inmediato, por lo que supongamos que no lo es. Como f es continua en un cerrado, alcanza su máximo y su mínimo en el intervalo. Llamemos a estos dos valores M y m respectivamente. Por comodidad vamos a suponer que para cualquier $x \in [a,b]$ se tiene que $g(x) \geq 0$, puesto que el otro caso es análogo. Entonces

$$g(x)\cdot m \leq g(x)\cdot f(x) \leq g(x)\cdot M$$

luego por las propiedades de la integral, tenemos que

$$\int_a^b g(x)\cdot m\,\mathrm{d}x \leq \int_a^b g(x)\cdot f(x)\ \mathrm{d}x \leq \int_a^b g(x)\cdot M\,\mathrm{d}x$$

Dado que g no es idénticamente nula, su integral en $[a,b]$ tampoco lo será (puesto que hemos supuesto que no cambia de signo y en algún punto es positiva), así que

$$m \leq \frac{\int_a^b g(x)\cdot f(x)\ \mathrm{d}x}{\int_a^b g(x)\ \mathrm{d}x} \leq M$$

Utilizando el Teorema fundamental del cálculo, tenemos que por ser f y g continuas su integral es derivable y continua, así que el centro de la inecuación anterior siempre existe. Utilizando el Teorema de los valores intermedios, debe existir cierto $t \in [a,b]$ tal que

$$f(t) = \frac{\int_a^b g(x)\cdot f(x)\ \mathrm{d}x}{\int_a^b g(x)\ \mathrm{d}x}$$

como queríamos ver. □

Una vez visto este teorema, pasemos a calcular el error. Sabemos que

$$\left|\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x - \int_a^b P_1(x)\ \mathrm{d}x\right| = \left|\int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2}\,(x-a)\,(x-b)\ \mathrm{d}x\right|$$

y utilizando el teorema anterior, existe $\theta \in [a, b]$ tal que

$$\left|\int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2}\,(x-a)\,(x-b)\ \mathrm{d}x\right| = \left|\frac{f''(\theta)}{2}\int_a^b (x-a)\,(x-b)\ \mathrm{d}x\right| = \left|-\frac{f''(\theta)}{2}\cdot\frac{(b-a)^3}{6}\right|$$

Por tanto, el máximo error cometido será

$$E_{\text{abs}} = \text{máx}\{|f''(x)| : x \in [a, b]\} \cdot \frac{(b-a)^3}{12}$$

3.2.1.2. Algoritmo de aproximación compuesto

Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ y sean $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ equiespaciados por una distancia $h = \frac{b-a}{n}$. Entonces, utilizando las propiedades de la integral, tenemos que

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\ \mathrm{d}x$$

Aplicando el algoritmo simple a cada uno de estos intervalos, tenemos que, para cualquier $i = 0, \ldots, n-1$, existen $\theta_i \in [x_i, x_{i+1}]$ tales que

$$\sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\ \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n-1}\frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2}\cdot h - \frac{f''(\theta_i)}{12}\cdot h^3$$

Como $h = \frac{b-a}{n}$ y $\frac{1}{n}\cdot f''(\theta_i)$ es la media aritmética de las imágenes de los θ_i, por el teorema de los valores intermedios existe cierto $\theta \in [a, b]$ tal que

$$\sum_{i=0}^{n-1}\frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2}\cdot h - \frac{f''(\theta_i)}{12}\cdot h^3 = \frac{h}{2}\cdot\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1}) + f(x_i) - \frac{h^2}{12}\,(b-a)\cdot f''(\theta)$$

es decir, que

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \frac{h}{2}\cdot\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1}) + f(x_i) - \frac{h^2}{12}\,(b-a)\cdot f''(\theta)$$

Notemos que no estamos aumentando el grado del polinomio interpolador (siempre es 1), sino que estamos tomando intervalos cada vez más pequeños e interpolando por separado en ellos.

Ejemplo 3.4. Calcular mediante el método de los trapecios (simple y compuesto) la integral $\int_0^1 f(x)\ \mathrm{d}x$, donde $f(x) = e^{-x^2}$. Determinar cuántas veces hay que componer la regla de los trapecios para obtener un error absoluto menos que $5 \cdot 10^{-3}$.

Solución. Veamos los dos métodos. Para el simple, como $f \in C^2([a, b])$, existe $\xi \in [a, b]$ tal que

$$\int_0^1 e^{-x^2}\,\mathrm{d}x = (1-0)\left[\frac{e^{-1} + e^0}{2}\right] - \frac{f''(\xi)}{12}\,(1-0)^3$$

La aproximación que obtenemos de la integral es, por tanto,

$$\int_0^1 e^{-x^2}\,\mathrm{d}x \approx \frac{1 + e^{-1}}{2}$$

Para ver el error, basta ver el máximo de la derivada segunda en el intervalo $[0,1]$, es decir,

$$\left|\int_0^1 e^{-x^2} - \frac{1+e^{-1}}{2}\right| \leq \frac{1}{12}\cdot \text{máx}\{|f''(\xi)| : 0 \leq \xi \leq 1\} = \frac{1}{12}\cdot \text{máx}\left\{\left|e^{-x^2}\left(4x^2-2\right)\right| : 0 \leq x \leq 1\right\} = \frac{1}{6}$$

Para el compuesto procedemos de igual forma y obtenemos que el error es menor que $\frac{1}{6n^2}$, donde $n+1$ es el número de puntos que hemos tomado.

3.2.2. Regla de Simpson

El método de los trapecios puede resultar poco exacto, puesto que el polinomio interpolador de grado 1 no se parece demasiado a la función que pretende interpolar en muchas funciones. Quizá si aumentásemos el grado del polinomio la aproximación mejoraría.

Definición 3.5. Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función y sea $P_2 : [a,b] \to \mathbb{R}$ el polinomio de grado menor o igual que dos que interpola a f respecto a los nodos a, $\frac{a+b}{2}$ y b. Decimos que calculamos la integral de f utilizando la **regla de Simpson** si aproximamos su integral en $[a,b]$ mediante la de este polinomio, es decir,

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \approx \int_a^b P_2(x)\ \mathrm{d}x$$

Como en el método de los trapecios, debemos diferenciar entre el caso simple y el compuesto dependiendo del número de subintervalos en los que dividamos el intervalo principal. Notemos que cuando tomamos más subintervalos, no estamos aumentando el grado del polinomio, únicamente tomando intervalos cada vez más pequeños para intentar mejorar la precisión.

Simple: Tomamos únicamente dos subintervalos de $[a,b]$ (en concreto $\left[a,\frac{a+b}{2}\right]$ y $\left[\frac{a+b}{2},b\right]$).

Compuesto: Tomamos un número par n de subintervalos de $[a,b]$ tal que $n > 2$. Los puntos en este caso serán de la forma

$$a + \frac{b-a}{n}\cdot k, \quad k = 0,\dots,n$$

Veamos primero cómo funciona el método simple.

Proposición 3.6. *Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función y sea $P_2 : [a,b] \to \mathbb{R}$ el polinomio de grado menor o igual que dos que interpola a f respecto a los nodos a, $\frac{a+b}{2}$ y b. Sea $h = \frac{b-a}{2}$. Entonces*

$$\int_a^b P_2(x)\ dx = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4\cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$$

Demostración. Sabemos que

$$P_2(x) = f[a] + f\left[a, \frac{a+b}{2}\right](x-a) + f\left[a, \frac{a+b}{2}, b\right](x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)$$

Veamos primero de todo lo que valen estas diferencias divididas. Claramente $f[a] = f(a)$. Para el resto utilizamos la fórmula de

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

vista en el tema anterior, lo que nos deja con

$$f\left[a, \frac{a+b}{2}\right] = \frac{f(a) - f\left(\frac{a+b}{2}\right)}{\frac{a+b}{2} - a} = 2\frac{f\left(\frac{a+b}{2}\right) - f(a)}{b-a}$$

$$f\left[\frac{a+b}{2}, b\right] = \frac{f\left(\frac{a+b}{2}\right) - f(a)}{b - \frac{a+b}{2}}$$

$$f\left[a, \frac{a+b}{2}, b\right] = \frac{f\left[\frac{a+b}{2}, b\right] - f\left[a, \frac{a+b}{2}\right]}{b-a} = \cdots = 2\frac{f(b) - 2f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(a)}{(b-a)^2}$$

Vemos que en ningún caso dependen de x, por lo que podemos sacarlas como constantes de las integrales.

$$\begin{aligned}\int_a^b P_2(x)\ \mathrm{d}x &= \int_a^b f[a] + f\left[a, \frac{a+b}{2}\right](x-a) + f\left[a, \frac{a+b}{2}, b\right](x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)\mathrm{d}x \\ &= f(a)(b-a) + f\left[a, \frac{a+b}{2}\right]\frac{(b-a)^2}{2} + f\left[a, \frac{a+b}{2}, b\right]\frac{(b-a)^3}{12} \\ &= \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right) = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4\cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)\end{aligned}$$

como queríamos ver. Se han omitido los cálculos por resultar pesados de escribir y para simplificar la notación, aunque siempre pueden comprobarse que son correctos. □

El cálculo del error es similar al del método de los trapecios. Lo vemos en la siguiente proposición.

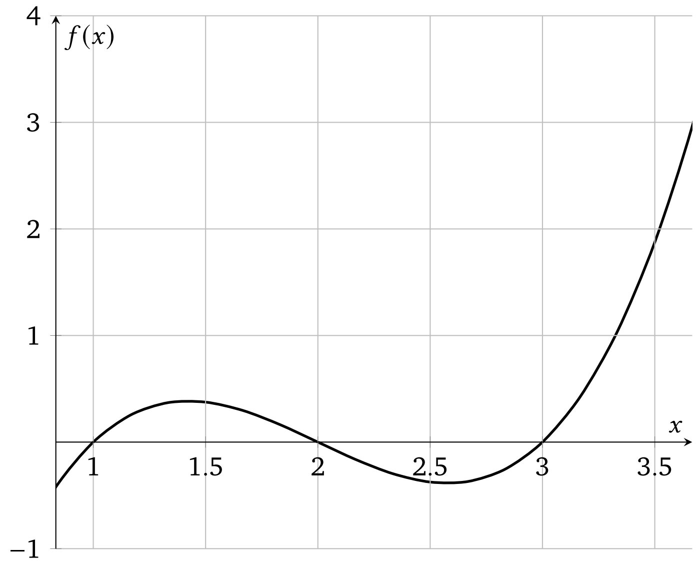
Proposición 3.7. *Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función de clase C^4 y sea $P_2 : [a,b] \to \mathbb{R}$ el polinomio de grado menor o igual que dos que interpola a f respecto a los nodos a, $\frac{a+b}{2}$ y b. Sea $h = \frac{b-a}{2}$. Entonces existe cierto $\theta \in [a,b]$ tal que*

$$\int_a^b f(x)\ dx - \int_a^b P_2(x)\ dx = -\frac{f^{iv)}(\theta)}{90}h^5$$

Demostración. Recordemos que en el tema anterior vimos que el error que cometíamos al interpolar una función de clase C^{n+1} por un polinomio de grado n podía ser expresado en términos de su derivada $n+1$-ésima. En particular, tenemos que

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x - \int_a^b P_2(x)\ \mathrm{d}x = \int_a^b f(x) - P_2(x)\ \mathrm{d}x = \int_a^b \frac{f'''(\xi_x)}{6}(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)(x-b)\ \mathrm{d}x$$

Llamemos $w(x) = \int_a^x (t-a)\left(t - \frac{a+b}{2}\right)(t-b)\ \mathrm{d}t$. Esta función es mayor o igual que cero para cualquier $x \in [a,b]$, dado que el polinomio que estamos integrando es impar con respecto al punto $\frac{a+b}{2}$ (se puede ver más claro a continuación en la gráfica). Fijémonos además que $w(a) = w(b) = 0$ por esto mismo.



Gráfica de la función $f(x) = (x-1)(x-2)(x-3)$, que es impar respecto a $x = 2$.

Integrando ahora por partes con

$$u = \frac{f'''(\xi_x)}{6}, \quad dv = (x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)(x-b)$$

tenemos que

$$\int_a^b \frac{f'''(\xi_x)}{6}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)\ dx = \left[\frac{f'''(\xi_x)}{6}\cdot w(x)\right]_a^b - \int_a^b w(x)\cdot \frac{d}{dx}\left(\frac{f'''(\xi_x)}{6}\right) dx$$

Sea $h > 0$. Tenemos que para $x_0, \ldots, x_n \in [a,b]$ se cumple que

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{f'''(\xi_x)}{6}\right) = \frac{d}{dx} f[x_0,\ldots,x_n,x] = \lim_{h\to 0}\frac{f[x_0,\ldots,x_n,x+h] - f[x_0,\ldots,x_n,x]}{h} = f[x_0,\ldots,x_n,x,x]$$

por lo que aplicándoselo a la fórmula anterior y teniendo en cuenta $w(a) = w(b) = 0$, tenemos que

$$\left[\frac{f'''(\xi_x)}{6}\cdot w(x)\right]_a^b - \int_a^b w(x)\cdot\frac{d}{dx}\left(\frac{f'''(\xi_x)}{6}\right) dx = 0 - \int_a^b w(x)\cdot f\left[a, \frac{a+b}{2}, b, x, x\right] dx$$

Por el teorema del valor medio de la integral, tenemos que existe cierto $\xi \in [a,b]$ tal que

$$-\int_a^b w(x)\cdot f\left[a,\frac{a+b}{2},b,x,x\right] dx = -f\left[a,\frac{a+b}{2},b,\xi,\xi\right]\cdot\int_a^b w(x)\ dx$$

Desarrollando la última integral que nos queda con el cambio

$$u = t - \frac{a+b}{2}, \quad du = dt$$

y utilizando $h = \frac{a+b}{2}$, tenemos que

$$\int_a^b w(x)\ dx = \int_a^b\int_a^x (t-a)\left(t-\frac{a+b}{2}\right)(t-b)\ dt\, dx = \int_a^b\int_{-h}^{x-a-h}(u+h)(u)(u-h)\ du\, dx = \frac{4h^5}{15}$$

al sustituir en lo anterior y tomar $\theta \in [a, b]$ adecuado, nos queda que

$$-f\left[a, \frac{a+b}{2}, b, \xi, \xi\right] \cdot \int_a^b w(x)\, \mathrm{d}x = -\frac{f^{iv)}(\theta)}{4!} \cdot \frac{4h^5}{15} = -\frac{f^{iv)}(\theta)}{90} h^5$$

como queríamos probar. □

Supongamos ahora que tomamos $n > 2$ subintervalos (recordemos que este número debe ser siempre par) y sea $h = \frac{b-a}{n}$. Los puntos son de la forma $x_i = a + ih$ donde $i = 0, \ldots, n$. Vamos a aplicar el algoritmo simple a cada uno de estos subintervalos. Llamemos $m = \frac{n}{2}$, que es un número natural por ser n un número par. Entonces

$$\int_a^b f(x)\, \mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{m} \int_{x_{2(i-1)}}^{x_{2i}} f(x)\, \mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{m} \frac{h}{3} \left[f\left(x_{2(i-1)}\right) + 4f\left(x_{2(i-1)}\right) + f(x_{2i})\right] - \sum_{i=1}^{m} \frac{h^5}{90} f^{iv)}(\theta_i) =$$
$$= \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + f(x_n)\right] - \frac{h^5}{90} \sum_{i=1}^{m} f^{iv)}(\theta_i)$$

Vamos a deshacer uno de los cambios de h. Tenemos entonces $\frac{1}{n} f^{iv)}(\theta_i)$ con $i = 0, \ldots, n$, que es la media aritmética de todos los valores, por lo que por el Teorema de los valores intermedios, existe cierto $\theta \in [a, b]$ tal que

$$\int_a^b f(x)\, \mathrm{d}x = \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + f(x_n)\right] - \frac{b-a}{90} h^4 \cdot f^{iv)}(\theta)$$

Notemos que en la fórmula, los nodos impares[2] se suman 4 veces, los extremos a y b una única vez y el resto 2 veces por estar en dos subintervalos a la vez.

3.2.3. Otras fórmulas

El método de los trapecios y la regla de Simpson entran en el grupo de las denominadas **fórmulas de Newton-Cotes**, que incluyen, aparte de estas que ya hemos visto, las siguientes fórmulas para calcular integrales aproximadas.

Definición 3.8. Decimos que integramos la función $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ utilizando la **regla (de Simpson) tres octavos** y los puntos $x_0, \ldots, x_3 \in [a, b]$ (equiespaciados por una distancia $h > 0$) si aproximamos su integral en $[a, b]$ de la forma

$$\int_a^b f(x)\, \mathrm{d}x \approx \frac{3}{8} h \left(f(x_0) + 3f(x_1) + f(x_2) + f(x_3)\right)$$

El error que cometemos al integrar así es de la forma

$$-\frac{3\,(b-a)^5}{80} f^{iv)}(\xi)$$

donde $\xi \in [a, b]$.

[2]Es decir, los “puntos medios” de las parábolas que estamos construyendo (en el caso $n = 2$ sería $\frac{a+b}{2}$).

Definición 3.9. Decimos que integramos la función $f : [a,b] \to \mathbb{R}$utilizando la **regla de Boole** y los puntos $x_0, \ldots, x_4 \in [a,b]$ (equiespaciados por una distancia $h > 0$) si aproximamos su integral en $[a,b]$ de la forma

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \approx \frac{2}{45}h\left(7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)\right)$$

El error que cometemos al integrar así es de la forma

$$-\frac{(b-a)^7}{1935360} f^{vi)}(\xi)$$

donde $\xi \in [a,b]$.

Aunque las fórmulas anteriores son útiles para polinomios de grado bajo, no parece sencillo obtener fórmulas para grados elevados. En el siguiente apartado veremos las reglas de cuadraturas de Gauss, que precisamente intentan resolver este problema.

3.2.4. Reglas de cuadratura de Gauss

Gauss demostró que tomando $n+1$ nodos y utilizando un polinomio interpolador de grado n, se pueden dar fórmulas de integración exactas para polinomios de grado $2n+1$, es decir, de un grado mucho mayor. La **cuadratura gaussiana** se preocupa de escoger dichos nodos de forma que la aproximación de la integral de **cualquier función** sea óptima. Para ello, queremos obtener nodos $x_0, \ldots, x_n \in [a,b]$ y coeficientes $c_0, \ldots, c_n \in \mathbb{R}$ de forma que, para cualquier función $f : [a,b] \to \mathbb{R}$, se tenga

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

En general, calcular nodos y constantes a lo bruto es algo pesado y no resulta nada práctico hacerlo para cada n y para cada intervalo. Necesitamos definir polinomios que sean cómodos de utilizar para obtener los nodos.

3.2.4.1. Polinomios ortogonales

Este tipo de polinomios son fundamentales para la cuadratura de Gauss que veremos en el siguiente apartado. Por el momento, vamos a ver cómo son y más adelante resaltaremos su importancia.

Definición 3.10. Una familia de polinomios $\{P_0, \ldots, P_m\}$ (no necesariamente finita) se llaman **polinomios ortogonales** en el intervalo $[a,b]$ con respecto a cierta función continua $w : [a,b] \to (0, +\infty)$ llamada **función peso** si:

1. Para cualquier $k = 0, \ldots, m$, el grado del polinomio P_k es k.
2. Si $i \neq j$, entonces $\int w(x) \cdot P_i(x) \cdot P_j(x)\ \mathrm{d}x = 0$.

Proposición 3.11. *Sea* $\{P_0, \ldots, P_m, \ldots\}$ *una familia de polinomios ortogonales. Se cumple:*

1. *Las raíces de los polinomios son todas reales y distintas.*
2. *Los polinomios están unívocamente determinados salvo constantes multiplicativas.*
3. *La familia es una base del espacio vectorial de los polinomios de grado menor o igual que* m[a]. *En particular, dado cualquier polinomio* $P(x)$ *de grado menor o igual que* m, *existen*

$$\alpha_i = \frac{\int_a^b w(x) \cdot P(x) \cdot P_i(x)\ dx}{\int_a^b w(x) \cdot P_i^2(x)\ dx}, \quad i = 0, \ldots, m$$

tales que

$$P(x) = \sum_{i=0}^{m} \alpha_i \cdot P_i(x)$$

[a]Ya que los polinomios son linealmente independientes

Veamos ahora algunas de las familias de polinomios más comunes.

3.2.4.2. Polinomios de Legendre

Definición 3.12. Se definen los **polinomios de Legendre** de la forma

$$P_k(x) = \begin{cases} 1 & k = 0 \\ \frac{1}{2^k \cdot k!} \cdot \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}\left(\left(x^2 - 1\right)^k\right) & k \geq 1 \end{cases}$$

o, equivalentemente, de forma recursiva

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_{k+1}(x) &= \frac{2k+1}{k+1} x \cdot P_k(x) - \frac{k}{k+1} \cdot P_{k-1}(x) \end{aligned}$$

Proposición 3.13. *Los polinomios de Legendre son ortogonales en* $[-1, 1]$ *con respecto al peso* $w(x) = 1$. *Además, se tiene que*

$$\int_{-1}^{1} (P_k(x))^2\ dx = \frac{2}{2k+1}$$

3.2.4.3. Polinomios de Chebyshev

Vimos en el tema anterior que los polinomios de Chebyshev eran ortogonales en $[-1, 1]$ con respecto al peso $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$[3].

[3]Consultar las propiedades de estos polinomios en el apartado 2.7.

3.2.4.4. Polinomios de Laguerre

Definición 3.14. Definimos los **polinomios de Laguerre** de la forma

$$L_k(x) = e^x \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}\left(e^{-x}x^k\right)$$

Proposición 3.15. *Los polinomios de Laguerre son ortogonales con respecto al peso $w(x) = e^{-x}$ en el intervalo $[0, +\infty)$.*

3.2.4.5. Polinomios de Hermite

Definición 3.16. Definimos los **polinomios de Hermite** de la forma

$$H_k(x) = (-1)^k e^{x^2} \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}\left(e^{-x^2}\right)$$

Proposición 3.17. *Los polinomios de Hermite son ortogonales con respecto al peso $w(x) = e^{-x^2}$ en todo $\mathbb{R}$.*

3.2.4.6. Integración con polinomios ortogonales

Vamos a introducir un teorema que, aunque parezca un poco confuso al principio, resulta de gran importancia para el cálculo de integrales mediante el método de Gauss.

Teorema 3.18. *Sea $\{P_0, P_1, \ldots, P_m\}$ una familia de polinomios ortogonales en $[a, b]$ con respecto a un peso $w(x)$ y sea P_{n+1} el polinomio $n+1$-ésimo de dicha familia. Sean también los puntos $x_0, \ldots, x_n \in [a, b]$ y las constantes no nulas $c_0, \ldots, c_n \in \mathbb{R}^*$ Son equivalentes:*

1. Para cualquier polinomio de grado menor o igual que $2n + 1$ se verifica que

$$\int_a^b w(x) \cdot P_{2n+1}(x)\ \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} c_i \cdot P_{2n+1}(x_i)$$

2. Los puntos $x_0, \ldots, x_n$ son las raíces de $P_{n+1}(x)$ y

$$c_i = \frac{1}{P'_{n+1}(x_i)} \cdot \int_a^b w(x) \cdot \frac{P_{n+1}(x)}{x - x_i}\,\mathrm{d}x, \quad i = 0, \ldots, n$$

Demostración. Veamos en primer lugar que $x_0, \ldots, x_n$ tienen que ser las raíces de P_{n+1}. Sea $Q : [a, b] \to \mathbb{R}$ un polinomio cualquiera de grado n. Entonces $Q \cdot P_{n+1}$ es un polinomio de grado $2n + 1$. Por hipótesis,

$$\int_a^b w(x) \cdot Q(x) \cdot P_{n+1}(x)\ \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} c_i \cdot Q(x_i) \cdot P_{n+1}(x_i)$$

y sabemos que $\{P_0, \ldots, P_n\}$ es una base del espacio vectorial de los polinomios de grado menor o igual que n, por lo que podemos escribir $Q(x) = \sum_{i=0}^{n} b_j \cdot P_j(x)$, para ciertos $b_1, \ldots, b_n \in \mathbb{R}$. Entonces

$$\int_a^b w(x) \cdot Q(x) \cdot P_{n+1}(x) \, \mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{n} b_j \cdot \int_a^b w(x) \cdot P_j(x) \cdot P_{n+1}(x) \, \mathrm{d}x = 0$$

y en consecuencia,

$$\sum_{j=0}^{n} c_j \cdot Q(x_j) \cdot P_{n+1}(x_j) = 0$$

de lo que se deduce que $P_{n+1}(x_i) = 0$, donde $i = 0, \ldots, n$, ya que los c_i son distintos de cero por hipótesis y $Q(x)$ es un polinomio cualquiera.

Ya tenemos que los $x_0, \ldots, x_n$ son las raíces de P_{n+1}, así que nos queda ver que las constantes c_i son, efectivamente, las que hemos visto. Sea $P_{2n+1}(x)$ un polinomio cualquiera de grado $2n+1$. Existen C, R polinomios de grado n tales que

$$P_{2n+1}(x) = C(x) \cdot P_{n+1}(x) + R(x)$$

y como para $i = 0, \ldots, n$ se tiene que $P_{n+1}(x_i) = 0$ por lo que acabamos de ver, tenemos que $P_{2n+1}(x_i) = R(x_i)$. Antes hemos visto que

$$\int_a^b w(x) \cdot C(x) \cdot P_{n+1}(x) \, \mathrm{d}x = 0$$

así que

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x) \cdot P_{2n+1}(x) \, \mathrm{d}x &= \int_a^b w(x) \cdot C(x) \cdot P_{n+1}(x) \, \mathrm{d}x + \int_a^b w(x) \cdot R(x) \, \mathrm{d}x \\ &= \int_a^b w(x) \cdot R(x) \, \mathrm{d}x \end{aligned}$$

Como $R(x)$ es un polinomio de grado menor o igual que n, coincide con su polinomio interpolador en $x_0, \ldots, x_n$ (sabemos que el polinomio interpolador es único) y, utilizando la fórmula de interpolación de Lagrange, tenemos que

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

y así

$$\int_a^b w(x)\, P_{2n+1}(x) \, \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} R(x_i) \int_a^b w(x) \prod_{j=0,\, j \neq i}^{n} \frac{x - x_i}{x_i - x_j} = \sum_{i=0}^{n} c_i P_{2n+1}(x_i)$$

vamos a denominar

$$c_i =$$

donde (utilizando $L_i(x) = \frac{P_{n+1}(x)}{(x-x_i)P'_{n+1}(x_i)}$)

$$c_i := \int_a^b w(x)\, L_i(x) \, \mathrm{d}x = \int_a^b w(x)$$

TERMINAR

Para la segunda implicación, tomamos $P_{2n+1}(x) = C(x)\,P_{n+1}(x) + R(x)$. Sabemos que $P_{2n+1}(x_i) = R(x_i)$ y

$$\int_a^b w(x)\,P_{2n+1}(x)\;\mathrm{d}x = \cdots = \sum_{i=1}^{n} c_i P_{2n+1}(x_i)$$

y entonces

$$c_i = \frac{1}{P'_{n+1}(x_i)} \int_a^b \frac{w(x)\,P_{n+1}(x)}{x - x_i}\,\mathrm{d}x$$

Veamos que $c_i \neq 0$. Para $i = 0$, $\int_a^b w(x)\,f(x)\;\mathrm{d}x \approx c_0 f(x_0) + c_1 f(x_1) + \cdots$. Sea $Q_0(x) = (x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2$ polinomio de grado $2n$.

$$\int w(x)\,Q_0(x)\;\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} c_i Q_0(x_i) = c_0 Q_0(x_0)$$

y como $Q_0(x)\,, w(x) > 0$, tenemos que $c_0 > 0$. Para el resto de índices es igual.

TERMINAR □

Este teorema nos garantiza que utilizando las raíces de los polinomios ortogonales, podemos obtener nodos muy convenientes para obtener la integral de funciones difíciles de forma numérica. Es por ello que es tan importante. Veamos un ejemplo de su uso.

Ejemplo 3.19. Aproximar $\int_{-1}^{1} e^{-x^2}\,\mathrm{d}x$ mediante la fórmula de Gauss-Legendre con $n = 2$ (es decir, usando la fórmula de Gauss con polinomios de Legendre).

Solución. Una vez obtengamos la fórmula, esta va a ser exacta para polinomios de grado 5. Recordemos que los polinomios de Legendre son ortogonales en $[-1, 1]$ con respecto al peso $w(x) = 1$. Sabemos que

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_3(x) = \frac{x\left(5x^2 - 3\right)}{2}$$

Sus raíces son

$$x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \quad x_1 = 0, \quad x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}$$

La derivada del tercer polinomio es

$$P_3'(x) = \frac{15}{2}x^2 - \frac{3}{2}$$

y los coeficientes los obtenemos utilizando la fórmula

$$c_k = \frac{1}{P_3'(x_k)} \cdot \int_{-1}^{1} \frac{P_3(x)}{x - x_k}\,\mathrm{d}x$$

Veamos cuales son:

$$c_0 = \frac{1}{\frac{15}{2}\frac{3}{5} - \frac{3}{2}} \cdot \int_{-1}^{1} \frac{\frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x}{x + \sqrt{\frac{3}{5}}}\,\mathrm{d}x = \frac{5}{9}$$

$$c_1 = \frac{1}{-3} \int_{-1}^{1} 5x^2 - 3\,\mathrm{d}x = \frac{8}{9}$$

$$c_2 = \frac{1}{3} \int_{-1}^{1} \frac{5}{2}\left(x^2 + \sqrt{\frac{3}{5}}x\right)\,\mathrm{d}x = \frac{5}{9}$$

Por tanto

$$\int_{-1}^{1} f(x)\ \mathrm{d}x \approx \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

para cualquier función. En particular, tenemos que

$$\int_{-1}^{1} e^{-x^2}\ \mathrm{d}x = 1.498679$$

El siguiente corolario nos permite saber el error cometido al calcular la integral de una función mediante la cuadratura de Gauss.

Corolario 3.20. *Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función de clase C^{2n+2}, P_{n+1} su polinomio de grado menor o igual que $n+1$ y $x_0, \ldots, x_n \in [a,b]$ las raíces de dicho polinomio. Sean además $c_0, \ldots, c_n \in \mathbb{R}$ definidos de la forma*

$$c_i = \frac{1}{P'_{n+1}(x_i)} \cdot \int_a^b w(x) \cdot \frac{P_{n+1}(x)}{x - x_i}\, dx, \quad i = 0, \ldots, n$$

Entonces existe $\theta \in (a,b)$ tal que

$$\int_a^b w(x) \cdot f(x)\ dx = \sum_{i=0}^{n} c_i \cdot f(x_i) + \frac{f^{2n+2)}(\theta)}{(2n+2)!} \cdot \int_a^b w(x) \cdot P_{n+1}^2(x)\ dx$$

Notemos además que para polinomios de grado $2n+1$ la fórmula es exacta, pues su derivada $2n+2$-ésima es idénticamente nula.

Por último, es importante darnos cuenta de que algunos de los polinomios que hemos tomado son ortogonales en el intervalo $[-1,1]$. En el caso de querer utilizar funciones fuera de este intervalo, debemos realizar un **cambio de variable** para poder hacerlo. En concreto, si queremos integrar cierta función $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ en $[a,b]$, tenemos que

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} f\left(\frac{(b-a)\,t + b + a}{2}\right) \cdot \frac{b-a}{2}\, \mathrm{d}t$$

El cambio dado por

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

es estrictamente creciente (basta ver que su derivada es positiva), por lo que es estrictamente monótona y por tanto biyectiva, así que conserva bien las propiedades.

Capítulo 4

Resolución numérica de ecuaciones no lineales

En ocasiones necesitaremos conocer las raíces de funciones nada sencillas, de forma que los métodos algebraicos no son viables por ser muy costosos o directamente no funcionar. Para ello, existen métodos numéricos para aproximar dichas raíces con un cierto grado de precisión. En este tema veremos algunos ejemplos de dichos métodos.

Supongamos una ecuación de la que queremos obtener solución de forma numérica. Debemos seguir ciertos pasos:

1. Escribir la ecuación de forma adecuada: $f(x) = 0$.
2. Localizar las raíces, es decir, encontrar intervalos que contengan a cada una de las raíces de la función. Utilizar el teorema de Bolzano.
3. Separar las raíces.
4. Aproximar las raíces mediante algún método numérico. Para ello se construye una sucesión $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ de forma que $\lim_{n\to\infty} x_n = x$ es la raíz buscada. Hay algunos métodos comunes, como la **bisección**, el **algoritmo del punto fijo**, el método de **Newton**, el método de la **secante** y el de método de la ***regula-falsi*** (regla falsa).

4.1. Método de bisección

Es un método sencillo. Supongamos que $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ es continua y $f(a) \cdot f(b) < 0$, es decir, que por el teorema de Bolzano, existe $\xi \in (a, b)$ tal que $f(\xi) = 0$. Llamamos $a_1 = a$, $b_1 = b$ y procedemos de la siguiente forma.

1. Para $i \geq 1$, tomamos $x_i = \frac{a_i+b_i}{2}$ de forma que obtengamos dos intervalos $[a_i, x_i]$ y $[x_i, b_i]$.
2. Si $x_i = \xi$, el algoritmo termina.
3. Si $f(a_i) \cdot f(x_i) < 0$, tomamos $a_{i+1} = a_i$ y $b_{i+1} = x_i$ y volvemos al paso 1 (notemos que $\xi \in [a_{i+1}, b_{i+1}]$ o de lo contrario no podríamos volver a aplicar este algoritmo).
4. Si $f(x_i) \cdot f(b_i) < 0$, tomamos $a_{i+1} = x_i$ y $b_{i+1} = b_i$ y volvemos al paso 1 (notemos que $\xi \in [a_{i+1}, b_{i+1}]$ o de lo contrario no podríamos volver a aplicar este algoritmo).

De esta forma, o alcanzamos un $x_i = \xi$ para cierto o encontramos unas sucesiones $\{a_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ creciente y acotada, $\{b_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ decreciente y acotada y $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$. Utilizando que

$$\lim_{n\to\infty} b_n - a_n = \lim_{n\to\infty} \frac{b-a}{2^{n-1}} = 0$$

y la regla del sándwich ($a_n \leq x_n \leq b_n$ para cualquier $n \in \mathbb{N}$), tenemos que los límites de las tres sucesiones coinciden en cierto $x \in \mathbb{R}$. Sin embargo, $\xi \in [a_n, b_n]$ para cualquier $n \in \mathbb{N}$, por lo que $x = \xi$, dado que sabemos que el punto debe ser único.

Ejemplo 4.1. Calcular las soluciones de la ecuación $xe^{-x} + 1 = 0$ con un error absoluto menor que $\frac{1}{2^5}$.

$f(x) = xe^{-x} + 1$, que es continua en $[-1, 0]$. $f(0) = 1$ y $f(-1) = 1 - e < 0$. Además $f'(x) = e^{-x} - xe^{-x} = e^{-x}(1-x) > 0$ por lo que f es estrictamente creciente. Aplicando ahora Bolzano vemos que debe existir un punto en $(-1, 0)$ en el que la función se anula, y el hecho de que sea estrictamente creciente nos garantiza que este punto será único.

Vamos a intentar aproximar la raíz mediante el método de bisección. Para una función $f : [a, b] \to \mathbb{R}$, el error absoluto que cometemos es menor que $\frac{b-a}{2^n}$ donde n son las iteraciones que hemos realizado. En este caso, para obtener un error menor que $\frac{1}{2^5}$ debemos realizar 5 iteraciones. Los $x_n$obtenidos son:

$$x_1 = -0.5, \quad x_2 = -0.75, \quad x_3 = -0.625, \quad x_4 = -0.5625, \quad x_5 = -0.59375$$

4.2. Método del punto fijo

Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$. Este método se basa en la idea

$$f(x) = 0 \iff f(x) + x = x$$

Llamando $g(x) = f(x) + x$, buscamos el punto x_0 tal que $g(x_0) = x$. Por ejemplo, sea $f(x) = e^x - 3x$.

$$e^x - 3x = 0 \iff e^x = 3x \iff \frac{e^x}{3} = x$$

Podemos despejar x de varias maneras. Definimos tres formas válidas

$$g_1(x) = \frac{e^x}{3}, \quad g_2(x) = \log(3x), \quad g_3(x) = \frac{e^x - x}{2}$$

Las tres funciones cortan a la recta $y = x$, por lo que existen puntos en los que f se anula.

Definición 4.2. Sea $g : [a, b] \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una función. Decimos que cierto $x_0 \in [a, b]$ es un **punto fijo** de g si $g(x_0) = x_0$.

Vamos a definir un tipo de funciones que serán de utilidad más adelante.

Definición 4.3. Sea $g : [a, b] \to \mathbb{R}$. Decimos que g es **contractiva** en $[a, b]$ si existe $0 \leq K < 1$ tal que para $x, y \in [a, b]$, se cumple que

$$|g(x) - g(y)| \leq K|x - y|$$

en este caso llamamos **constante de contractividad** al menor valor que puede tomar K verificando la desigualdad anterior.

Esta definición recuerda en gran medida a la de función Lipschitz y, de hecho, las funciones contractivas son lipschitzianas dado que cumplen su definición (notemos que el caso $K = 0$ solo puede ocurrir si $g \equiv 0$). La siguiente proposición es inmediata de este hecho.

Proposición 4.4. *Las funciones contractivas son uniformemente continuas.*

Demostración. Inmediato de la definición de continuidad uniforme. □

Comparten algunas otras similitudes con las funciones Lipschitz, como denota la siguiente proposición.

Proposición 4.5. *Sea $g : [a, b] \to \mathbb{R}$ continua y derivable en (a, b). Supongamos que existe $0 \leq K < 1$ tal que para cualquier $x \in (a, b)$ se tiene que $|g'(x)| \leq K$. Entonces g es contractiva en $[a, b]$.*

Demostración. Inmediato utilizando el teorema del valor medio de Lagrange. □

Corolario 4.6. *Sea $g : [a, b] \to \mathbb{R}$ de clase C^1 y supongamos que $|g'(x)| < 1$ para cualquier $x \in [a, b]$. Entonces g es contractiva y*

$$K = \|g'(x)\|_\infty = \max\{|g'(x)| : a \leq x \leq b\}$$

Introducimos ahora el que va a ser el teorema fundamental del método del punto fijo.

Teorema 4.7. (Teorema del punto fijo de Banach) *Sea $g : [a, b] \to [a, b]$ una función contractiva. Entonces g tiene un único punto fijo $\xi \in [a, b]$. Además, ξ es el límite de la sucesión definida por*

$$x_n = \begin{cases} x_0 & n = 0 \\ g(x_{n-1}) & n \geq 1 \end{cases}$$

Demostración. Como $g([a, b]) \subset [a, b]$, para la sucesión $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$, se tiene que $g(x_n) \in [a, b]$. Tenemos

$$|x_{n+1} - x_n| = |g(x_n) - g(x_{n-1})| \leq K |x_n - x_{n-1}|$$

(la desigualdad es consecuencia de que sea contractiva) y aplicándolo n veces tenemos que

$$|x_{n+1} - x_n| \leq K^n \cdot |x_1 - x_0|$$

Sean ahora $n, m \in \mathbb{N}$ y vamos a suponer $m = n + p$, con $p \in \mathbb{N}$. Entonces

$$|x_m - x_n| = \left|x_{n+p} - x_n\right| \leq \left(\sum_{i=0}^{p-1} K^{n+i}\right) |x_1 - x_0| = \left(\sum_{i=0}^{p-1} K^i\right) K^n |x_1 - x_0| = \frac{K^n}{1-K} |x_0 - x_1|$$

ya que la primera desigualdad es consecuencia de lo anterior y la última igualdad de que $0 \leq K < 1$. Es fácil ver que para cualquier $\varepsilon > 0$, va a existir cierto n_0 tal que si $n, m > n_0$, vamos a tener que $|x_m - x_n| < \varepsilon$ y por tanto la sucesión es de Cauchy y convergente. Además, como g es contractiva, es uniformemente continua y

$$g(\xi) = g\left(\lim_{n\to\infty} x_n\right) = \lim_{n\to\infty} g(x_n) = \lim_{n\to\infty} x_{n+1} = \xi$$

Supongamos ahora que existen ξ_1 y ξ_2 puntos fijos. Entonces

$$|\xi_1 - \xi_2| = |g(\xi_1) - g(\xi_2)| \leq K\,|\xi_1 - \xi_2|$$

y por tanto como $K < 1$,

$$(1 - K)\,|\xi_1 - \xi_2| \leq 0$$

tenemos que necesariamente $\xi_1 = \xi_2$. □

Notemos que el error cometido por aproximar el punto ξ es de la forma

$$|\xi - x_n| \leq \frac{K^n}{1 - K}\,|x_1 - x_0|$$

Ejemplo 4.8. Sea $f(x) = e^x - 3x$. Probar que f tiene un único cero en $[0, 1]$.

Solución. Si queremos calcular el cero mediante un proceso iterativo de punto fijo, ¿cuál de las siguientes funciones es la más adecuada?

$$g_1(x) = \frac{e^x}{3}, \quad g_2(x) = \log(3x), \quad g_3(x) = \frac{e^x - x}{2}$$

Es claro que f es continua. Además, $f(0) = 1 > 0$ y $f(1) = e - 3 < 0$ por lo que el teorema de Bolzano nos garantiza que exista al menos un punto en $(0, 1)$ en el que la función se anula. Además, como la función es estrictamente decreciente (la derivada es siempre menor que cero), este punto es único. Las derivadas de las tres funciones son:

$$g_1'(x) = \frac{e^x}{3}, \quad g_2'(x) = \frac{1}{x}, \quad g_3'(x) = \frac{e^x - 1}{2}$$

La primera y la tercera están acotadas en valor absoluto por 1 (en el intervalo $[0, 1]$), mientras que $\lim_{x\to 0} g_2'(x) = \infty$. Además es fácil ver que

$$g_1(x) \in [0, 1], \quad g_2(x) \in [0, 1]$$

Podemos usar, por tanto, el teorema del punto fijo en ambas funciones. La mejor función será la que más rápido nos de ese punto. Las constantes de contractividad de ambas funciones son

$$K_1 = \sup\left\{\frac{e^x}{3} : x \in [0, 1]\right\} = \frac{e}{3}, \quad K_3 = \sup\left\{\frac{e^x - 1}{2} : x \in [0, 1]\right\} = \frac{e - 1}{2}$$

Utilizaremos pues la tercera, ya que al tener menor constante de contractividad convergerá más rápido al punto.

4.3. Método de Newton-Raphson o de la tangente

Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función derivable de la que sabemos que existe cierto $\xi \in [a, b]$ tal que $f(\xi) = 0$. Este método consiste en tomar iterativamente una sucesión de puntos $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ de forma que $x_0 \in [a, b]$ y para $n > 0$, x_n es el punto de intersección entre el eje de abscisas y la recta tangente a la función en el punto $(x_{n-1}, f(x_{n-1}))$, que existe para todo $x \in [a, b]$ por ser la función derivable.

La recta tangente a la función en el punto x_n es de la forma

$$y = f(x_n) + f'(x_n)\,(x - x_n)$$

Si sustituimos $y = 0$, $x = x_{n+1}$ y despejamos, tenemos que

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Teorema 4.9. *Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ de clase C^2 y supongamos que*

1. $f(a) \cdot f(b) < 0$.
2. $f'(x) \neq 0$ *para cualquier* $x \in [a, b]$.
3. f *es cóncava o convexa en* $[a, b]$.
4. $\max\left\{\left|\frac{f(a)}{f'(a)}\right|, \left|\frac{f(b)}{f'(b)}\right|\right\} \leq b - a$

Entonces existe un único punto $\xi \in (a, b)$ tal que $f(\xi) = 0$ y la sucesión $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ generada por el método de Newton-Raphson está bien definida y converge cuadráticamente hacia ξ.

En particular, se tiene que

$$|\xi - x_{n+1}| \leq \frac{\max\{|f''(x)| : x \in [a, b]\}}{2 \cdot \min\{|f'(x)| : x \in [a, b]\}} |\xi - x_n|^2$$

Demostración. Las hipótesis 1 y 2 garantizan que exista el ξ del enunciado. Supongamos que $f'(x) > 0$ y $f''(x) > 0$ para cualquier $x \in [a, b]$. Supongamos también por comodidad que $f(a) < 0$ y $f(b) > 0$. Sea $x_0 \in (\xi, b]$. Entonces $f(x_0) \cdot f''(x_0) > 0$ por ser f creciente. Por el desarrollo de Taylor sabemos que

$$0 = f(\xi) = f(x_n) + f'(x_n)(\xi - x_n) + \frac{f''(\eta_n)}{2!}(\xi - x_n)^2, \quad \eta_n \in (\xi, x_n)$$

Tenemos que

$$f(x_n) + f'(x_n)(\xi - x_n) < 0 \implies \xi < x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} = x_{n+1} \implies \xi < x_{n+1} < x_n$$

Así, la sucesión $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ es monótona decreciente y está acotada inferiormente por ξ. Por la continuidad de f y f' y dado que f' no se anula en ningún punto, podemos definir

$$F(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

Esta función es continua y además llamando $A = \lim_{n\to\infty} x_n$, se tiene

$$F(A) = F\left(\lim_{n\to\infty} x_n\right) = \lim_{n\to\infty} F(x_n) = \lim_{n\to\infty} x_{n+1} = A$$

Como $F(A) = A$, $f(A) = 0$ y $A = \xi$. □

Observación 4.10. Si cogemos $x_0 \in [a, \xi)$, entonces $x_1 \in (\xi, b]$ y la demostración se mantiene.

Ejemplo 4.11. Calcular la raíz cuadrada de un número real utilizando el algoritmo de Newton-Raphson. A modo de curiosidad, el método que vamos a seguir fue creado por el matemático griego *Herón* que, entre otras cosas, "vivió 200 años"[1].

[1] Fuente: los apuntes de la profesora.

Solución. Sea $a > 0$. Queremos calcular $\sqrt{a}$, que es equivalente a calcular la raíz de la función

$$f(x) = x^2 - a$$

El algoritmo vendrá dado por $x_{n+1} = \frac{1}{2}\left(x_n + \frac{a}{x_n}\right)$. Vamos obteniendo los siguientes puntos:

$$\begin{aligned} x_0 &= 4 \\ x_1 &= \frac{31}{8} = 3.875 \\ x_2 &= 3.87298 \\ &\vdots \end{aligned}$$

y así podríamos continuar indefinidamente.

4.3.1. Método de la secante

Esta es una variación del método anterior. Se basa en el siguiente algoritmo:

$$\begin{aligned} &x_0, x_1 \in [a,b] \\ &x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n) = \frac{f(x_n)}{\frac{f(x_n)-f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}} \end{aligned}$$

En lugar de tomar el punto de corte con el eje de abscisas de la tangente a la función en el punto anterior, tomamos el punto de corte de la recta secante que une los dos puntos anteriores.

Teorema 4.12. *Sea $f \in C^2([a,b])$ y supongamos que existe $\xi \in [a,b]$ tal que $f(\xi) = 0$ y $f'(\xi) \neq 0$. Entonces la sucesión de puntos $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ dada por el algoritmo de la secante converge hacia ξ. Además, se tiene que*

$$|\xi - x_n| \leq \frac{\text{máx}\{|f''(x)| : x \in [a,b]\}}{2 \cdot \text{mín}\{|f'(x)| : x \in [a,b]\}} \cdot |(\xi - x_{n-1})(\xi - x_{n-2})|$$

4.4. Órdenes de convergencia

Definición 4.13. Sea $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$una sucesión convergente hacia cierto x. Decimos que $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ tiene un **órden de convergencia** α y **radio de convergencia** $r > 0$ si

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|\xi - x_n|}{|\xi - x_{n-1}|^\alpha} = r$$

Los métodos que hemos visto hasta ahora tienen diferentes órdenes de convergencia, siendo el método del punto fijo de órden lineal y el de la secante de órden supralineal. El caso del método de Newton-Raphson resulta más complicado de decir. Si la raíz que buscamos tiene multiplicidad uno, el método converge de forma cuadrática. Sin embargo, de ser mayor su multiplicidad, el método converge más despacio. El siguiente teorema trata este segundo caso.

Teorema 4.14. *Sea $f \in C^{m+2}([a,b])$ y supongamos que existe $\xi \in [a,b]$ tal que $f(\xi) = 0$ con multiplicidad $m > 0$. Entonces la convergencia de la sucesión $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ obtenida mediante el algoritmo de Newton-Raphson es lineal y el radio es*

$$r = 1 - \frac{1}{m}$$

4.5. Método de *Regula-falsi* o falsa posición

Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ continua tal que $f(a) \cdot f(b) < 0$. Por el teorema de Bolzano, ya sabemos que existe $\xi \in (a,b)$ tal que $f(\xi) = 0$. Tomamos

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

Esta es la recta que une los puntos $(a, f(a))$ y $(b, f(b))$, que es continua. Calculando la intersección de esta recta con el eje de abscisas, vamos construyendo una sucesión que converja hacia ξ. El algoritmo viene dado por la fórmula

$$x_n = a_n - \frac{f(a_n)}{f(b_n) - f(a_n)} \cdot (b_n - a_n)$$

una vez obtenido el nuevo punto, estamos en uno de los siguientes casos

1. Si $f(x_n) = 0$ entonces $x_n = \xi$.
2. Si $f(x_n) \cdot f(a_n) < 0$ entonces $b_{n+1} = x_n$ y $a_{n+1} = a_n$.
3. Si $f(x_n) \cdot f(b_n) < 0$ entonces $a_{n+1} = x_n$ y $b_{n+1} = b_n$.

Si esta sucesión converge hacia ξ, lo hace de forma lineal.

Observación 4.15. Para funciones cóncavas o convexas, se tiene que

$$\lim_{n\to\infty} |b_n - a_n| \neq 0 \implies \lim_{n\to\infty} |\xi - x_n| \neq 0$$

por lo que el algoritmo no siempre converge hacia ξ.

Ejemplo 4.16. Sea $f(x) = e^{-x^2} - \cos(x)$. Demostrar que existe $1.4 \leq \xi \leq 1.5$ tal que $f(\xi) = 0$.

Solución. Reescribimos la función

$$e^{-x^2} - \cos(x) \iff e^{-x^2} = \cos(x) \iff -x^2 = \log(\cos(x)) \iff x = \sqrt{-\log(\cos(x))}$$

Como $\cos(x) \in (0,1)$, $-\log(\cos(x)) > 0$. Definimos $g(x) = \sqrt{-\log(\cos(x))}$. Veamos si tiene puntos fijos.

Para poder aplicar el teorema del punto fijo, necesitamos que g sea contractiva y que $g([a,b]) \subset [a,b]$. Para lo primero, calculamos sus derivadas primera y segunda

$$g'(x) = \frac{1}{2\sqrt{-\log(\cos(x))}} \cdot \tan(x) \qquad g''(x) = -\frac{1}{4\sqrt{(-\log(\cos(x)))^3}} \cdot \tan^2(x) + \frac{1}{2\sqrt{-\log(\cos(x))} \cdot \cos^2(x)}$$

La segunda derivada es positiva, por lo que la primera derivada es creciente. Como $g'(1.4) = 2.1776559$ y $g'(1.5) = 4.332211$ por lo que no es contractiva, ya que la derivada no es menor que uno.

Bibliografía

[1] R. Burden y D. Faires, *Análisis Numérico*.