
Interpolación polinómica de alto orden. Métodos espectrales.

Aplicación a problemas de contorno y de condiciones iniciales.

***Juan A. Hernández Ramos
Mario A. Zamecnik.***

*Departamento de Matemática Aplicada a la Ingeniería Aeroespacial
Escuela Técnica Superior de Ingeniería Aeronáutica y del Espacio
Universidad Politécnica de Madrid*

25 de noviembre de 2018

Portada: -Descripción foto de portada-

Queda prohibida la reproducción de cualquier parte del texto por cualquier medio, incluido fotocopia, sin permiso escrito del autor.

© Juan A. Hernández Ramos, Mario A. Zamecnik.

Índice general

1. Introducción	1
2. Aproximación de funciones	5
2.1. Introducción	5
2.2. Problema de dimensión finita	6
2.3. Aproximación mediante desarrollos en serie	7
2.4. Aproximación mediante interpolantes polinómicos	9
2.5. Error de aliasing	10
3. Interpolación	15
3.1. Interpolación polinómica	15
3.2. Matriz de Vandermonde	16
3.3. Interpolación de Lagrange	19
3.4. Método recursivo	22
3.5. Forma de Newton	24
3.6. Error de interpolación	33
3.6.1. Error de truncamiento	33
3.6.2. Error de redondeo	38
3.7. Interpolación global	41
3.8. Distribuciones equiespaciadas de puntos	41
3.9. Distribuciones de puntos no equiespaciados	46
3.10. Relación entre la interpolación de Lagrange y la serie discreta . . .	50
3.11. Relación entre la serie discreta y la serie truncada	52
3.12. Interpolación continua a trozos equiespaciada	56
3.13. Interpolantes a trozos con $q + 1$ puntos	59
3.13.1. Fórmulas para la derivada primera y segunda	59
3.13.2. Error de derivadas de polinomios interpolantes	59
3.14. Fórmulas para derivadas con tres puntos	62
3.14.1. Error de truncamiento	64
3.14.2. Error de redondeo	65
3.14.3. Error de interpolación: truncamiento y redondeo	66
4. Problema de contorno	69

4.1. Ecuaciones diferenciales ordinarias	69
4.2. Dominios bidimensionales	73
5. Problema de Cauchy en EDO's	75
5.1. Métodos multipaso. Métodos Adams	76
5.2. Métodos unipaso. Métodos Runge Kutta	77
5.3. Error local de truncación	78
6. Problemas de condiciones iniciales y de contorno	79
6.1. Discretización espacial y temporal	80
6.2. Error espacial y error temporal	83
6.3. Error de la semidiscretización espacial	85
6.4. Error de la discretización temporal	87
6.5. Cálculo de la abscisa espectral	90
6.6. Cálculo del radio espectral	91

CAPÍTULO

ONE

INTRODUCCIÓN

De forma general, los problemas que provienen de la física y de la ingeniería, se pueden clasificar en tres grandes enunciados: los *problemas de condiciones iniciales y de contorno*, los *problemas de contorno* y los *problemas mixtos*. Desde un punto de vista matemático, los problemas de condiciones iniciales pueden dar lugar a ecuaciones hiperbólicas o parabólicas, los problemas de contorno derivan en ecuaciones de tipo elípticas y los problemas mixtos dan lugar a ecuaciones de tipo parabólico y elíptico. La obtención de soluciones numéricas para estos tres tipos de problemas, implica realizar discretizaciones parciales, que se indican en el cuadro (1.1) y que determinan las necesidades o especificaciones siguientes:

En el problema de condiciones iniciales, el modelo matemático contiene derivadas parciales, de la función incógnita $u : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$, respecto de variables independientes espaciales y temporales. Para evaluar estas derivadas, se da un conjunto de puntos discretos en el dominio espacial y se aplica la *teoría de interpolación polinómica* y la *teoría de derivación numérica*, dando lugar a los métodos de discretización espacial, y que dan origen a los métodos de *diferencias finitas* (*FDM*), *volúmenes finitos* (*FVM*) y *elementos finitos* (*FEM*). Por otro lado, la *teoría de interpolación trigonométrica* permite obtener los denominados *métodos espectrales*. Este procedimiento se conoce como semi-discretización espacial y el resultado es un problema de valores iniciales para un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en la función incógnita $U : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^N$ siendo $N = dM$. Para evaluar las derivadas en la variable temporal, se define un conjunto de puntos discretos en el dominio temporal y, nuevamente, se aplica la *teoría de interpola-*

ción polinómica y la *teoría de derivación y cuadratura numérica*. En este caso, se obtienen los métodos numéricos *lineales multipaso* y *predictores–correctores*, que pueden ser tanto explícitos como implícitos. Otras técnicas de aproximación permiten obtener otro conjunto importante de métodos que son los denominados *Runge-Kutta* y que, de nuevo, pueden ser explícitos o implícitos. Los métodos implícitos, cuando se aplican a problemas diferenciales no lineales, dan lugar a sistemas de ecuaciones no lineales, que se resuelven aplicando los métodos numéricos correspondientes, como son el método de Newton-Raphson o el método de iteración de punto fijo. Esta aproximación se conoce como discretización temporal y el resultado es un problema de valores iniciales para un sistema de ecuaciones en diferencias. La primera columna del cuadro (1.1) resume el método de cálculo en problemas de valores iniciales explicado anteriormente.

En el problema de contorno, al igual que en el problema de valores iniciales, el modelo matemático contiene derivadas parciales, de la función incógnita $u : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^d$, respecto de las variables espaciales. Para evaluar estas derivadas, se emplean las técnicas de discretización espacial mencionadas en el problema de valores iniciales y el resultado es un sistema de ecuaciones algebraicas. Si el sistema es lineal, la solución se obtiene aplicando métodos numéricos para sistemas lineales como son el método de Gauss o factorización LU. Si el sistema es no lineal, la solución se obtiene aplicando métodos numéricos para sistemas no lineales como son el método de Newton o el método de iteración de punto fijo. La segunda columna del cuadro (1.1) resume el método de cálculo en problemas de contorno explicado anteriormente.

En un problema mixto, aparecen ecuaciones en derivadas parciales que evolucionan en el tiempo, por lo general de tipo parabólico, junto con ecuaciones de tipo elíptico. Para resolver los problemas mixtos se emplean las técnicas de discretización espacial y temporal junto con los métodos en ecuaciones algebraicas mencionadas en el tratamiento de los problemas de condiciones iniciales y de contorno explicados anteriormente. La última columna del cuadro (1.1) resume el método de cálculo en problemas mixtos explicado anteriormente.

Enunciado	Problema hiperbólico o parabólico.	Problema elíptico
Modelo matemático	Conjunto de ecuaciones en derivadas parciales (PDEs) $\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}(u, t, x)$ + condiciones iniciales + condiciones de contorno	Conjunto de ecuaciones en derivadas parciales (PDEs) $\mathcal{L}(u, x) = 0$ + condiciones de contorno
Discretización espacial	Conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) $\frac{dU}{dt} = F(U, t)$ + condiciones iniciales Problema de Cauchy en ODEs	Conjunto de ecuaciones algebraicas $F(U) = 0$
Discretización temporal	Conjunto de ecuaciones en diferencias (DEs) $G(U^{n+1}, U^n, \dots) = 0$ + condiciones iniciales Problema de Cauchy en DEs	
Solución discreta	U^n	U

Cuadro 1.1: Discretización espacial y temporal para problemas de condiciones iniciales y de contorno en ecuaciones en derivadas parciales.

CAPÍTULO

TWO

APROXIMACIÓN DE FUNCIONES

2.1. Introducción

Es bien conocida la utilidad de expresar una función como un desarrollo en serie de funciones elementales de la forma:

$$f(x) = c_0 \phi_0(x) + c_1 \phi_1(x) + c_2 \phi_2(x) + \dots$$

En la expresión anterior, c_k , $k = 0, 1, \dots$ son coeficientes a determinar y ϕ_k , $k = 0, 1, \dots$ son funciones elementales como por ejemplo polinomios, funciones trigonométricas o exponenciales. Un ejemplo de desarrollo en serie muy empleado es la serie de Taylor. Si la función f es analítica en un cierto dominio, el teorema de Taylor permite desarrollar la función alrededor de un punto x_0 en la forma:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k (x - x_0)^k, \quad c_k = \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!},$$

donde $f^{(k)}(x_0)$ es la derivada k -ésima de la función f evaluada en x_0 .

La *teoría de funciones ortogonales* aporta los conceptos básicos para obtener desarrollos en serie de funciones elementales. Se dice que dos funciones ϕ_m y ϕ_n son ortogonales en un intervalo $[a, b]$ si verifican que su producto interno es:

$$\langle \phi_m, \phi_n \rangle = \int_a^b \phi_m(x) \phi_n(x) dx = 0, \quad m \neq n. \quad (2.1)$$

A partir de un conjunto infinito de funciones ortogonales Φ de la forma:

$$\Phi = \{ \phi_0(x), \phi_1(x), \phi_2(x), \dots \},$$

se puede expresar una función f como un desarrollo en serie de funciones ortogonales de la forma:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \phi_k(x), \quad (2.2)$$

donde los coeficientes c_k se calculan a partir de las expresiones siguientes:

$$c_k = \frac{1}{\|\phi_k(x)\|^2} \int_a^b f(x) \phi_k(x) dx, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.3)$$

Haciendo una analogía con el cálculo vectorial, se dice que el desarrollo (2.2) es una proyección de la función f en un conjunto infinito de funciones base ϕ_k . Los infinitos términos de la serie determinan un problema de *dimensión infinita*.

Un ejemplo de desarrollo en serie de funciones ortogonales es la serie de Fourier. Si una función f es periódica en un intervalo $[0, 2\pi]$, admite un desarrollo en serie de la forma:

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} c_k e^{ikx}, \quad c_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) e^{-ikx} dx.$$

donde las exponenciales complejas $\phi_k(x) = e^{ikx}$ con k desde $-\infty$ a $+\infty$, forman un conjunto infinito de funciones ortogonales.

Los conceptos mencionados anteriormente se aplican al *tratamiento analítico* de funciones. La extensión de la teoría de funciones ortogonales al *tratamiento computacional* de funciones utilizando ordenadores, da lugar a la *teoría de aproximación* de funciones y a conceptos tales como la serie truncada, la serie discreta y los problemas de dimensión finita. Estos conceptos, se describen en las secciones siguientes.

2.2. Problema de dimensión finita

Un problema de gran interés en matemática aplicada es la evaluación de una función en un punto, cuando no se conoce la expresión analítica de la misma, o cuando, sí se dispone de tal expresión, pero es difícil de evaluar en el punto de estudio. Otro problema habitual, por ejemplo en cálculo numérico, es la obtención de derivadas de distinto orden e integrales de funciones de las que sólo se disponen

de algunos valores puntuales. Para abordar el estudio de estos problemas, se dispone de un tema clásico de la matemática que es la *teoría de aproximación*.

Dada una función f , la teoría de aproximación estudia la obtención de otra función g más sencilla, que es *próxima* a f en un cierto sentido, y que debe precisarse. Dicha función sencilla g puede ser un polinomio, una función trigonométrica, una función racional, y en general, cualquier función elemental de las estudiadas en el cálculo infinitesimal. Particularmente, las funciones polinómicas y trigonométricas, se han estudiado con detalle dando lugar al desarrollo de la teoría de aproximación polinómica y a la teoría de aproximación trigonométrica. La evolución en la teoría de aproximación se puede resumir a partir de los aportes fundamentales de Newton (1643), Euler (1707), Lagrange (1736), Weierstrass (1815), Chebyshev (1821) y Lebesgue (1875). El teorema siguiente asegura la existencia polinomios que convergen uniformemente a f :

Teorema de aproximación de Weierstrass.

Sea f una función continua definida en un intervalo $[a, b]$. Para todo $\epsilon > 0$, le corresponde un polinomio P tal que:

$$\|f - P\| < \epsilon.$$

Es decir que:

$$|f(x) - P(x)| < \epsilon, \quad \text{para todo } x \in [a, b].$$

La solución del problema de aproximación basada en la teoría de funciones ortogonales, da lugar a dos métodos de aproximación: la *aproximación por series* y la *aproximación por interpolación*. A continuación se describen estas dos formas de aproximación.

2.3. Aproximación mediante desarrollos en serie

La *aproximación por series* es una extensión del desarrollo en serie de funciones ortogonales de dimensión infinita. Dada una función f definida en un intervalo $[a, b]$, la misma se expresa como:

$$f(x) = \sum_{k=0}^N \hat{c}_k \phi_k(x) + \hat{E}_N(x), \quad (2.4)$$

donde $\hat{E}_N(x)$ es el error de truncamiento que proviene de truncar la serie infinita. La serie:

$$P_N(x) = \sum_{k=0}^N \hat{c}_k \phi_k(x),$$

se conoce como la serie truncada donde \hat{c}_k son los coeficientes a determinar y las funciones ϕ_k forman un conjunto finito de $N + 1$ funciones ortogonales de la forma:

$$\Phi = \{ \phi_0(x), \phi_1(x), \phi_2(x), \dots, \phi_N(x) \}.$$

Al igual que en el problema de dimensión infinita, la ortogonalidad se comprueba a partir de los productos internos:

$$\langle \phi_m, \phi_n \rangle = \int_a^b \phi_m(x) \phi_n(x) dx = 0, \quad m \neq n. \quad (2.5)$$

Finalmente, la función f se puede expresar como:

$$f(x) \approx \sum_{k=0}^N \hat{c}_k \phi_k(x), \quad (2.6)$$

donde los coeficientes de la serie truncada \hat{c}_k se calculan a partir de la resolución de las integrales siguientes:

$$\hat{c}_k = \frac{1}{\|\phi_k(x)\|^2} \int_a^b f(x) \phi_k(x) dx, \quad k = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (2.7)$$

Haciendo una analogía con el cálculo vectorial, se dice que el desarrollo (2.6) es una proyección de la función f en un conjunto finito de funciones base ϕ_k . Los finitos términos de la serie determinan un problema de *dimensión finita* $N + 1$.

Un ejemplo de aproximación por series es la serie truncada de Fourier. Si una función f es periódica en un intervalo $[0, 2\pi]$, admite un desarrollo en serie de la forma:

$$f(x) \approx \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{c}_k e^{ikx}, \quad \hat{c}_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) e^{-ikx} dx.$$

donde las exponenciales complejas $\phi_k(x) = e^{ikx}$ con k desde $-\frac{N}{2}$ hasta $\frac{N}{2} - 1$, forman un conjunto finito de funciones ortogonales.

2.4. Aproximación mediante interpolantes polinómicos

Al igual que en la aproximación por series, la *aproximación por interpolación* es una extensión del desarrollo en serie de funciones ortogonales de dimensión infinita. La diferencia fundamental en este tipo de aproximación es que se reemplaza la condición de ortogonalidad continua dada por el producto interno (2.5) por una condición de ortogonalidad discreta que se explica a continuación.

Dada una función f definida en un intervalo $[a, b]$, se considera un conjunto de $N + 1$ puntos discretos $x_0 = a, x_1, \dots, x_N = b$ del dominio de definición. Dadas dos funciones ϕ_m y ϕ_n en $[a, b]$, se pueden definir los vectores siguientes cuyas componentes son la evaluación de las mismas en los puntos discretos:

$$\Phi_m = \{ \phi_m(x_0), \phi_m(x_1), \dots, \phi_m(x_j), \dots, \phi_m(x_N) \},$$

$$\Phi_n = \{ \phi_n(x_0), \phi_n(x_1), \dots, \phi_n(x_j), \dots, \phi_n(x_N) \}.$$

La ortogonalidad de los vectores Φ_m y Φ_n se define a partir del producto interno discreto siguiente:

$$\langle \Phi_m, \Phi_n \rangle = \frac{1}{N+1} \sum_{j=0}^N \phi_m(x_j) \phi_n(x_j). \quad (2.8)$$

A partir del producto interno discreto anterior, la aproximación por interpolación permite expresar la función f como:

$$f(x) = \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \phi_k(x) + \tilde{E}_N(x), \quad (2.9)$$

donde $\tilde{E}_N(x)$ es el error de truncamiento que proviene de truncar la serie infinita. La serie:

$$I_N(x) = \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \phi_k(x),$$

se conoce como la serie discreta donde \tilde{c}_k son los coeficientes a determinar y las funciones ϕ_k forman un conjunto finito de $N+1$ funciones ortogonales de la forma:

$$\Phi = \{ \phi_0(x), \phi_1(x), \phi_2(x), \dots, \phi_N(x) \},$$

a partir del producto interno discreto (2.8). Finalmente, la función f se puede expresar como:

$$f(x) \approx \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \phi_k(x), \quad (2.10)$$

donde los coeficientes de la serie discreta \tilde{c}_k se calculan a partir de la resolución del sistema lineal siguiente:

$$f(x_j) = \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \phi_k(x_j), \quad j = 0, \dots, N. \quad (2.11)$$

Haciendo una analogía con el cálculo vectorial, se dice que el desarrollo (2.9) es una proyección de la función f en un conjunto finito de funciones base ϕ_k . Los finitos términos de la serie determinan un problema de *dimensión finita* $N + 1$.

En el caso de interpolación polinómica, las funciones ϕ_k pueden ser monómios en cuyo caso el problema de interpolación queda expresado como:

$$f(x) \approx \sum_{k=0}^N \hat{c}_k \phi_k(x), \quad f(x_j) = \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k x_j^k, \quad j = 0, \dots, N,$$

o pueden ser polinómios de Lagrange ℓ_k de grado N y el problema de interpolación queda expresado como:

$$f(x) \approx \sum_{k=0}^N \hat{c}_k \phi_k(x), \quad f(x_j) = \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \ell_k(x_j), \quad j = 0, \dots, N.$$

El objetivo de este libro es profundizar en el problema de aproximación por interpolación polinómica que se estudiará con detalle en los capítulos siguientes.

El esquema (2.1) resume la clasificación de la teoría de aproximación explicada anteriormente:

2.5. Error de aliasing

En esta sección se estudia la relación que existe entre la aproximación por series y la aproximación por interpolación. En particular, se analiza la relación entre los coeficientes \hat{c}_k de la serie truncada y los coeficientes \tilde{c}_k de la serie discreta. Para realizar este estudio, se considera el caso general a partir de un conjunto de funciones ortogonales ϕ_k para posteriormente estudiar el caso particular de las series truncada y discreta de Fourier.

Se considera una función f definida en un intervalo $[a, b]$ y se expresa como un desarrollo en serie de infinitas funciones ortogonales de la forma:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \phi_k(x).$$

Dado que el producto interno que determina la ortogonalidad de la serie infinita y de la serie truncada es el mismo, y para facilitar las operaciones siguientes, se cambia la nomenclatura de los coeficientes c_k por los de la serie truncada \hat{c} de forma que la serie infinita anterior se reescribe como:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x).$$

Por otro lado, la serie infinita se puede expresar como la suma de la serie truncada más el error de truncamiento:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x) = P_N(x) + \hat{E}_N(x),$$

que expresado en sumas es:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x) = \sum_{k=0}^N \hat{c}_k \phi_k(x) + \sum_{k=N+1}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x).$$

A continuación, en la expresión anterior, se suma y resta la serie discreta:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x) = \sum_{k=0}^N \hat{c}_k \phi_k(x) + \sum_{k=N+1}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x) + I_N(x) - I_N(x),$$

que expresado en sumas resulta:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x) = \sum_{k=0}^N \hat{c}_k \phi_k(x) + \sum_{k=N+1}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x) + \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \phi_k(x) - \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \phi_k(x).$$

La expresión anterior se puede particularizar un punto de interpolación x_j que pertenece al dominio de definición de f dando como resultado:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x_j) = \sum_{k=0}^N \hat{c}_k \phi_k(x_j) + \sum_{k=N+1}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x_j) + \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \phi_k(x_j) - \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \phi_k(x_j).$$

Agrupando términos en la expresión anterior, se tiene que:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x_j) = \sum_{k=0}^N (\hat{c}_k - \tilde{c}_k) \phi_k(x_j) + \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \phi_k(x_j) + \sum_{k=N+1}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x_j).$$

No leer - en construcción

El análisis se realiza en tres pasos básicos:

1. Particularizar en x_j
2. Proyectar
3. Idea feliz para analizar colas

Cuando se aproxima una función f por su serie truncada de Fourier, la diferencia entre la serie truncada y la función es el error de truncamiento:

$$E_N(x) = f(x) - \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{c}_k e^{ikx_j} = \sum_{k \leq -\frac{N}{2}-1, k \geq \frac{N}{2}} \hat{c}_k e^{ikx_j}. \quad (2.12)$$

Cuando se aproxima f mediante una serie discreta de Fourier, la diferencia entre la función y el interpolante trigonométrico se puede poner como:

$$E_N(x) = f(x) - I_N(u) = f(x) - P_N(u) + P_N(u) - I_N(u)$$

donde el primer término constituye el error de truncamiento, y el segundo término se denomina error de aliasing. Este error de aliasing tiene su origen en las diferencias que existen entre los coeficientes de la serie truncada y los coeficientes de la serie discreta.

$$P_N(u) - I_N(u) = \sum_{k=-N/2}^{k=N/2-1} (\hat{c}_k - \tilde{c}_k) e^{ikx_j}. \quad (2.13)$$

Los coeficientes de una serie discreta de Fourier \tilde{c}_k se pueden expresar en términos de los coeficientes exactos de Fourier \hat{c}_k de $f(x)$. Si existe convergencia puntual de la serie de Fourier en cada punto de colocación, entonces

$$u_j = \sum_{-\infty}^{+\infty} \hat{u}_k e^{ikx_j} = \sum_{-N/2}^{N/2-1} \tilde{u}_k e^{ikx_j}. \quad (2.14)$$

Sumando las ecuaciones anteriores desde $j = 0$ hasta $j = N - 1$,

$$\tilde{u}_k = \hat{u}_k + \sum_{p=-\infty (p \neq 0)}^{p=+\infty} \hat{u}_{k+Np}. \quad (2.15)$$

De esta forma,

$$P_N(u) - I_N(u) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \left(\sum_{p=-\infty}^{p=+\infty} \tilde{c}_{k+Np} \right) e^{ikx_j}. \quad (2.16)$$

$$\tilde{c}_k = \hat{c}_k + \sum_{p=-\infty}^{\infty} \hat{c}_{k+Np}. \quad (2.17)$$

CAPÍTULO

THREE

INTERPOLACIÓN

3.1. Interpolación polinómica

Definición: Problema general de interpolación.

Dada una función f y un conjunto de $N + 1$ puntos discretos x_0, x_1, \dots, x_N del dominio de definición, el problema general de interpolación consiste en obtener otra función I , denominada función interpolante, de la forma:

$$I(x) = a_0 \phi_0(x) + a_1 \phi_1(x) + \dots + a_N \phi_N(x),$$

que es combinación lineal de funciones elementales $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_N$, y que debe verificar:

$$I(x_j) = f(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, N.$$

Los puntos x_j se denominan *abscisas* o *nodos* de interpolación y los valores a_j son los *coeficientes* de interpolación. Resolver el problema de interpolación implica obtener los coeficientes a_j . Esta definición, también, puede enunciarse diciendo que dado un espacio vectorial V , de dimensión finita N , y dada una base $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_N$, cualquier elemento de V , puede expresarse como

$$I(x) = a_0 \phi_0(x) + a_1 \phi_1(x) + \dots + a_N \phi_N(x),$$

$$I(x_j) = f(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, N.$$

Funciones base polinómicas dan lugar a problemas de *interpolación polinómica* y funciones base trigonométricas, dan lugar a problemas de *interpolación trigonométrica*. A continuación, se define el problema de interpolación polinómica.

Definición: Problema de interpolación polinómica.

Dada una función f y un conjunto de $N + 1$ puntos discretos x_0, x_1, \dots, x_N del dominio de definición, el problema de interpolación polinómica consiste en encontrar un polinomio I_N de grado $\leq N$,

$$I_N(x) = a_0 \phi_0(x) + a_1 \phi_1(x) + \dots + a_N \phi_N(x),$$

que cumpla que:

$$I_N(x_0) = f(x_0), \quad I_N(x_1) = f(x_1), \quad \dots, \quad I_N(x_N) = f(x_N).$$

En este caso, las funciones elementales $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_N$, son polinomios.

A continuación, se presentan tres formas distintas de expresar un polinomio interpolante que son: la interpolación en monomios, la interpolación de Lagrange y la forma de Newton. En estas tres formas, los polinomios $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_N$ tienen expresiones diferentes y cada una de ellas permite justificar distintos aspectos de la teoría de la interpolación polinómica.

3.2. Matriz de Vandermonde

Se consideran $N + 1$ puntos x_0, x_1, \dots, x_N del dominio de definición de una función f , en los que se conocen los valores $f(x_j) = y_j$, $j = 0, 1, \dots, N$. El problema de interpolación consiste en obtener una función interpolante I_N de grado $\leq N$, como una combinación lineal de monomios de la forma siguiente:

$$I_N(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_N x^N.$$

Por definición de interpolación, el interpolante I_N debe verificar que:

$$I_N(x_j) = f(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, N.$$

En la expresión anterior, a_0, a_1, \dots, a_N son los coeficientes del polinomio y la obtención de los mismos, resuelve el problema de interpolación. La condición

anterior conduce al sistema lineal de ecuaciones siguiente:

$$\begin{aligned} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \cdots + a_N x_0^N &= f(x_0), \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \cdots + a_N x_1^N &= f(x_1), \\ &\vdots \\ a_0 + a_1 x_N + a_2 x_N^2 + \cdots + a_N x_N^N &= f(x_N), \end{aligned}$$

que, en forma matricial, puede expresarse como sigue

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^N \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^N \\ \vdots & & & & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & \cdots & x_N^N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_N) \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

La matriz de la expresión anterior, se conoce como matriz de Vandermonde. Si los puntos de interpolación son distintos, la matriz de Vandermonde no es singular y el sistema (3.1) tiene solución única. La solución del sistema lineal (3.1), se puede obtener mediante cualquier método directo de resolución de sistemas lineales como, por ejemplo, el método de eliminación Gaussiana o de factorización LU. El problema de interpolación queda finalmente resuelto con el polinomio siguiente:

$$I_N(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_N x^N,$$

expresado como una combinación lineal de monomios. Una dificultad que presenta esta forma de resolver el problema de interpolación, es que la matriz de Vandermonde puede presentar un número de condición grande, dando lugar a sistemas mal condicionados. A continuación se presenta un ejemplo de interpolación en monomios, con tres puntos de interpolación.

Ejemplo:

Dada una función f y 3 puntos discretos x_0, x_1, x_2 del dominio de definición, se propone obtener el polinomio interpolante I_2 de grado ≤ 2 , expresado como combinación lineal de monomios. Por definición del problema de interpolación, I_2 debe verificar que:

$$I_2(x_0) = f(x_0) = y_0, \quad I_2(x_1) = f(x_1) = y_1, \quad I_2(x_2) = f(x_2) = y_2.$$

Tal como se observa en las expresiones anteriores, se reemplaza $f(x_j)$ por y_j para simplificar las expresiones finales.

Para resolver este problema se plantea el polinomio de grado ≤ 2 siguiente:

$$I_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2,$$

donde a_0 , a_1 y a_2 son coeficientes que deben determinarse. Para ello, se fuerza a que el polinomio I_2 coincida con la función f en los 3 puntos discretos:

$$I_2(x_0) = y_0, \quad I_2(x_1) = y_1, \quad I_2(x_2) = y_2,$$

que conduce a un sistema de tres ecuaciones algebraicas lineales, cuya matriz de Vandermonde (matriz ampliada) es:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & x_0 & x_0^2 & y_0 \\ 1 & x_1 & x_1^2 & y_1 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & y_2 \end{array} \right).$$

El sistema se resuelve aplicando el método de Gauss. Mediante operaciones elementales de filas se obtienen los sistemas equivalentes siguientes:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & x_0 & x_0^2 & y_0 \\ 0 & x_1 - x_0 & x_1^2 - x_0^2 & y_1 - y_0 \\ 0 & x_2 - x_0 & x_2^2 - x_0^2 & y_2 - y_0 \end{array} \right),$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & x_0 & x_0^2 & y_0 \\ 0 & 1 & x_1 + x_0 & \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \\ 0 & 1 & x_2 + x_0 & \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \end{array} \right),$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & x_0 & x_0^2 & y_0 \\ 0 & 1 & x_1 + x_0 & \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \\ 0 & 0 & x_2 - x_0 & \left(\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \right) \end{array} \right).$$

Aplicando sustitución inversa al sistema anterior, se calculan los coeficientes del polinomio:

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{1}{x_2 - x_0} \left(\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \right), \\ a_1 &= \left(\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \right) - \frac{x_1 + x_0}{x_2 - x_0} \left(\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \right), \\ a_0 &= y_0 - x_0 a_1 - x_0^2 a_2. \end{aligned}$$

La forma de solución del problema de interpolación, expresada como una combinación lineal de monomios, no es la habitualmente empleada, dado que requiere resolver el sistema lineal (3.1) cada vez que se modifica el conjunto de nodos de interpolación. Esto hace que este método resulte ser muy laborioso. Por otro lado, desde un punto de vista computacional, el mal condicionamiento de la matriz de Vandermonde hace que el método no sea el adecuado. A continuación, se presenta otra forma de resolver el problema de interpolación, que resulta ser mucho más práctica al momento de generar esquemas numéricos para la solución de ecuaciones diferenciales.

3.3. Interpolación de Lagrange

En este apartado, se presenta otra forma de resolver el problema de interpolación polinómica, que resulta ser más eficiente desde el punto de vista de la obtención de esquemas numéricos para la solución de ecuaciones diferenciales. Se consideran $N + 1$ puntos x_0, x_1, \dots, x_N del dominio de definición de una función f , en los que se conocen los valores $f(x_j) = y_j$, $j = 0, 1, \dots, N$. A continuación, se expresa el polinomio I_N de grado $\leq N$, en la forma siguiente:

$$I_N(x) = b_0 \ell_0(x) + b_1 \ell_1(x) + \dots + b_N \ell_N(x), \quad (3.2)$$

donde b_0, b_1, \dots, b_N son coeficientes a calcular y $\ell_j(x)$ son polinomios de grado N , que tienen la expresión siguiente:

$$\ell_j(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \dots (x - x_N)}{(x_j - x_0)(x_j - x_1) \dots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \dots (x_j - x_N)} = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^N \frac{(x - x_i)}{(x_j - x_i)}. \quad (3.3)$$

La forma (3.2) se conoce como interpolación de Lagrange y los polinomios (3.3) son los polinomios de Lagrange. Esta forma de interpolación puede expresarse,

de forma compacta, como se indica a continuación:

$$I_N(x) = \sum_{j=0}^N b_j \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^N \frac{(x - x_i)}{(x_j - x_i)}.$$

Obsérvese que los polinomios (3.3) toman los valores siguientes:

$$\begin{cases} \ell_j(x) = 1, & x = x_j, \\ \ell_j(x) = 0, & x = x_i, \quad i = 0, 1, \dots, j-1, j+1, \dots, N. \end{cases} \quad (3.4)$$

Para cada uno de los puntos de interpolación, se pueden plantear las expresiones siguientes:

$$\begin{aligned} b_0 \ell_0(x_0) + b_1 \ell_1(x_0) + \dots + b_N \ell_N(x_0) &= f(x_0), \\ b_0 \ell_0(x_1) + b_1 \ell_1(x_1) + \dots + b_N \ell_N(x_1) &= f(x_1), \\ &\vdots \\ b_0 \ell_0(x_N) + b_1 \ell_1(x_N) + \dots + b_N \ell_N(x_N) &= f(x_N), \end{aligned}$$

que puestas en forma matricial resultan:

$$\begin{pmatrix} \ell_0(x_0) & \ell_1(x_0) & \dots & \ell_N(x_0) \\ \ell_0(x_1) & \ell_1(x_1) & \dots & \ell_N(x_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \ell_0(x_N) & \ell_1(x_N) & \dots & \ell_N(x_N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_N) \end{pmatrix}.$$

Haciendo uso de los resultados indicados en (3.4), el sistema lineal resultante es:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_N) \end{pmatrix}.$$

La solución del sistema anterior es:

$$b_0 = f(x_0), \quad b_1 = f(x_1), \quad \dots, \quad b_N = f(x_N),$$

con lo que, el polinomio interpolante, resulta ser:

$$I_N(x) = f(x_0) \ell_0(x) + f(x_1) \ell_1(x) + \dots + f(x_N) \ell_N(x),$$

y que, en forma compacta, tiene la expresión siguiente:

$$I_N(x) = \sum_{j=0}^N f(x_j) \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^N \frac{(x - x_i)}{(x_j - x_i)}. \quad (3.5)$$

Por tanto, se observa que para resolver el problema de interpolación polinómica, mediante el método de Lagrange, no es necesario resolver un sistema lineal de ecuaciones algebraicas, como ocurre con el método de los monomios, ya que los coeficientes son los valores de la función a interpolar en los puntos de interpolación $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_N)$, que son datos del problema.

En algunos textos, el problema de interpolación polinómica en la forma de Lagrange, se lo conoce como el *método de pesos indeterminados*, que de forma general, se expresa como:

$$I_N(x) = \sum_{j=0}^N w_j(x) f(x_j).$$

En la expresión anterior, w_j , $j = 0, \dots, N$, son los polinomios de Lagrange (3.3) y se los denomina *coeficientes de peso* o *coeficientes de influencia*. Por tanto I_N es una combinación lineal de valores $f(x_j)$, con los pesos $w_0(x)$, $w_1(x)$, \dots , $w_N(x)$.

A continuación se presenta un ejemplo de interpolación en la forma de Lagrange, con tres puntos de interpolación.

Ejemplo:

Dada una función f y 3 puntos de interpolación x_0, x_1, x_2 del dominio de definición, se propone obtener el polinomio interpolante I_2 , de grado ≤ 2 , mediante la interpolación de Lagrange, que verifique que

$$I_2(x_0) = f(x_0) = y_0, \quad I_2(x_1) = f(x_1) = y_1, \quad I_2(x_2) = f(x_2) = y_2.$$

Aplicando la expresión (3.2), el interpolante de grado ≤ 2 es:

$$I_2(x) = b_0 \ell_0(x) + b_1 \ell_1(x) + b_2 \ell_2(x),$$

donde ℓ_0 , ℓ_1 , ℓ_2 son polinomios de grado ≤ 2 que, según (3.3), tienen las expre-

siones siguientes:

$$\ell_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)},$$

$$\ell_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)},$$

$$\ell_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}.$$

Obsérvese que los polinomios anteriores verifican los valores siguientes (ver 3.4):

$$\ell_0(x_0) = 1, \quad \ell_0(x_1) = 0, \quad \ell_0(x_2) = 0,$$

$$\ell_1(x_0) = 0, \quad \ell_1(x_1) = 1, \quad \ell_1(x_2) = 0,$$

$$\ell_2(x_0) = 0, \quad \ell_2(x_1) = 0, \quad \ell_2(x_2) = 1.$$

Finalmente, los coeficientes del interpolante son $b_0 = f(x_0)$, $b_1 = f(x_1)$, $b_2 = f(x_2)$, que son datos del problema. El polinomio buscado es:

$$I_2(x) = f(x_0) \ell_0(x) + f(x_1) \ell_1(x) + f(x_2) \ell_2(x).$$

3.4. Método recursivo

En la resolución del problema de interpolación polinómica, resulta de gran utilidad contar con un procedimiento recursivo que permita obtener el polinomio interpolante de grado N a partir del polinomio interpolante de grado $N - 1$. Dicho de otra forma, al incorporar un nuevo punto de interpolación y a partir del interpolante construido con N puntos, interesa obtener el nuevo interpolante construido con $N + 1$ puntos de interpolación. En este apartado se describe un método recursivo para obtener los polinomios de Lagrange cuando, a partir de un conjunto de puntos dados, se considera un nuevo punto de interpolación. Con el fin de desarrollar este tema, a modo de notación, se introduce un subíndice adicional a los polinomios de Lagrange. En lo que sigue, se indicará con ℓ_{ji} al polinomio de Lagrange que verifica el punto de interpolación j construido a partir de i puntos de interpolación, de grado $i - 1$. Por tanto, a partir de la expresión (3.3), el polinomio de Lagrange obtenido a partir de i puntos, puede expresarse de la forma siguiente:

$$\ell_{ji}(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \dots (x - x_{i-1})}{(x_j - x_0)(x_j - x_1) \dots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \dots (x_j - x_{i-1})},$$

$$j = 0, \dots, N, \quad i = 1, \dots, N + 1.$$

La expresión anterior puede escribirse como:

$$\ell_{ji}(x) = \left(\frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \dots (x - x_{i-2})}{(x_j - x_0)(x_j - x_1) \dots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \dots (x_j - x_{i-2})} \right) \left(\frac{x - x_{i-1}}{x_j - x_{i-1}} \right),$$

$$j = 0, \dots, N, \quad i = 1, \dots, N + 1,$$

donde el primer paréntesis es el polinomio de Lagrange ℓ_{ji-1} , obtenido a partir de $i - 1$ puntos. Finalmente, se obtiene la recursión

$$\ell_{ji}(x) = \ell_{ji-1}(x) \left(\frac{x - x_{i-1}}{x_j - x_{i-1}} \right), \quad j = 0, \dots, N, \quad i = 1, \dots, N + 1, \quad (3.6)$$

que permite obtener el polinomio de Lagrange de grado $i - 1$, a partir del polinomio de Lagrange de grado $i - 2$, cuando se incorpora el punto de interpolación x_i . La condición inicial del método recursivo propuesto es $\ell_{j1} = 1$ que corresponde al polinomio de Lagrange, de grado 0, construido con un único punto de interpolación x_j . A continuación, se presenta un ejemplo donde se aplica el procedimiento recursivo explicado.

Ejemplo:

Dada una función f se propone obtener el polinomio interpolante I_2 , de grado ≤ 2 , partiendo del polinomio de Lagrange de grado 0, que verifique el punto x_0 , posteriormente incorporar el punto x_1 para obtener el polinomio de grado 1, y por último, agregar el punto de interpolación x_2 y obtener el polinomio de grado 2. En la figura (3.1) se representa gráficamente el algoritmo recursivo que se explica a continuación.

Se comienza con el punto de interpolación x_0 y el polinomio de Lagrange de grado 0 es:

$$\ell_{01} = 1,$$

siendo esta la condición inicial del método recursivo. A continuación, se considera el punto x_1 y se calcula el polinomio de Lagrange de grado 1, empleando la expresión (3.6)

$$\ell_{02}(x) = \ell_{01} \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}.$$

Por último, se considera el punto x_2 y se obtiene el polinomio de Lagrange de grado 2, aplicando nuevamente la expresión (3.6)

$$\ell_{03}(x) = \ell_{02}(x) \frac{x - x_2}{x_0 - x_2} = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}.$$

Los polinomios de Lagrange $\ell_{13}(x)$ y $\ell_{23}(x)$ se obtienen de igual forma que $\ell_{03}(x)$. Finalmente, el interpolante de grado ≤ 2 de la función f es:

$$I_2(x) = f(x_0) \ell_{03}(x) + f(x_1) \ell_{13}(x) + f(x_2) \ell_{23}(x),$$

que se representa en la figura (3.2).

3.5. Forma de Newton

En esta sección, se presenta otra forma de resolver el problema de interpolación polinómica que se conoce como forma de Newton. Al igual que en la interpolación de Lagrange, este método aporta un procedimiento recursivo para construir polinomios de grado superior, a medida que se añaden puntos de interpolación. Además, este método permite introducir el concepto de cociente incremental, también conocido como de diferencia dividida, que permite definir otro método recursivo para determinar los coeficientes de la forma de Newton.

Se consideran $N + 1$ puntos distintos x_0, x_1, \dots, x_N del dominio de definición de una función f , en los que se conocen los valores $f(x_j)$, $j = 0, 1, \dots, N$. A continuación, se expresa el polinomio I_N de grado $\leq N$, en la forma siguiente:

$$I_N(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + c_N(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_{N-2})(x - x_{N-1}), \quad (3.7)$$

donde c_0, c_1, \dots, c_N son los coeficientes de interpolación a calcular. La expresión (3.7) se conoce como forma de Newton del problema de interpolación polinómica y, de forma compacta, se puede expresar como:

$$I_N(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + c_N \prod_{i=0}^{N-1} (x - x_i), \quad (3.8)$$

$$I_N(x) = \sum_{j=0}^N c_j \prod_{i=0}^{j-1} (x - x_i).$$

Para calcular los coeficientes de interpolación, se recurre al procedimiento recursivo que se describe a continuación. Como condición inicial, se consideran los datos siguientes: el punto de interpolación x_0 y la imagen de la función $f(x_0)$. A partir del punto x_0 , se obtiene el interpolante $I_0(x)$ de grado 0 que verifica la función f en el nodo de interpolación x_0 . De esta forma, se obtiene:

$$I_0(x) = f(x_0) = c_0.$$

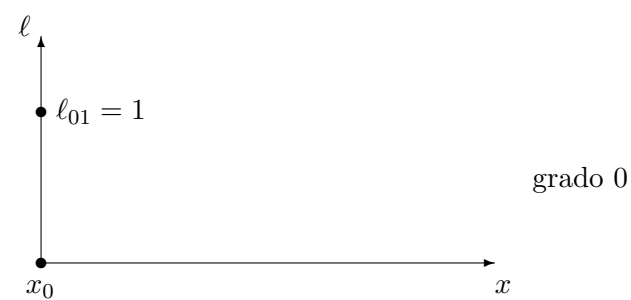
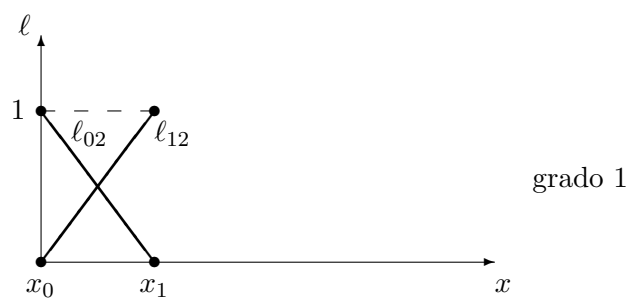
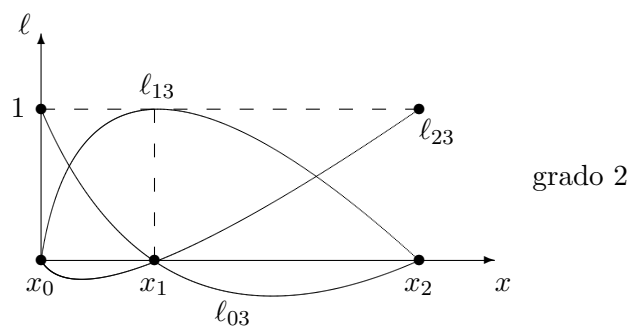


Figura 3.1: Algoritmo recursivo para la obtención de los polinomios de Lagrange

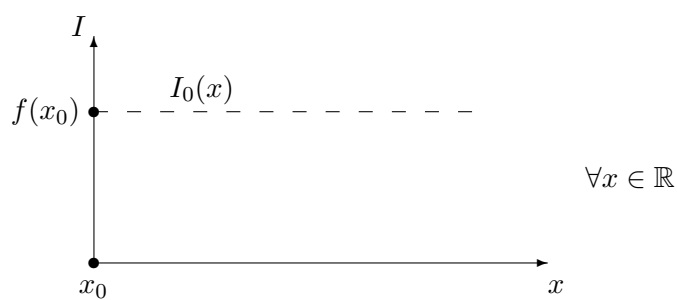
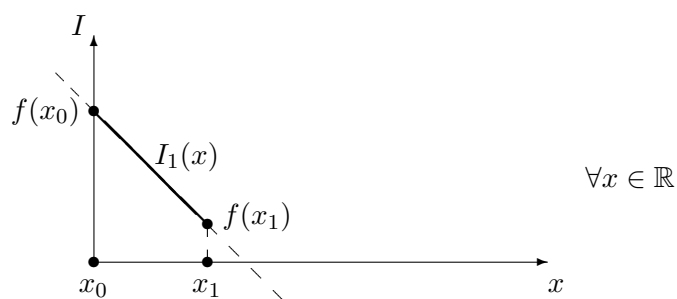
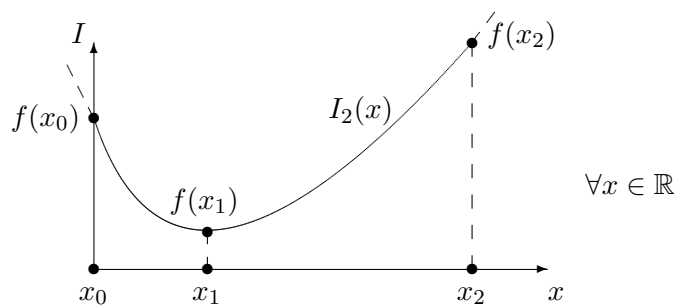


Figura 3.2: Interpolante de Lagrange de grado ≤ 2 de una función f

A partir de $I_0(x)$, se añade un segundo punto x_1 y se calcula el interpolante $I_1(x)$ de grado ≤ 1 , de la forma siguiente:

$$I_1(x) = I_0(x) + \varphi_1(x).$$

Para obtener la función $\varphi_1(x)$ se imponen las dos condiciones siguientes: debe tratarse de un polinomio de grado ≤ 1 dado que I_0 es de grado 0, y debe anularse en el punto x_0 para que se cumpla que $I_1(x_0) = I_0(x_0)$. Por tanto, la función $\varphi_1(x)$, debe tener la expresión siguiente:

$$\varphi_1(x) = c_1(x - x_0),$$

donde c_1 es un coeficiente que se determina a partir de la condición $I_1(x_1) = f(x_1)$. Una vez calculado el polinomio I_1 , y a partir del mismo, se incorpora otro punto de interpolación x_2 y se busca el interpolante $I_2(x)$ de grado ≤ 2 , que tenga la expresión general

$$I_2(x) = I_1(x) + \varphi_2(x).$$

La función $\varphi_2(x)$ debe tratarse de un polinomio de grado ≤ 2 dado que I_1 es de grado ≤ 1 , y debe anularse en los puntos x_1 para que se cumpla que $I_2(x_1) = I_1(x_1)$, y x_0 para que $I_2(x_0) = I_0(x_0)$. A partir de estas condiciones, $\varphi_2(x)$ tendrá la forma:

$$\varphi_2(x) = c_2(x - x_0)(x - x_1),$$

donde el coeficiente c_2 se determina imponiendo la condición $I_2(x_2) = f(x_2)$. Finalmente, el interpolante $I_N(x)$ de grado $\leq N$, se obtiene a partir del polinomio I_{N-1} , añadiendo el punto x_N . La expresión general para este paso es:

$$I_N(x) = I_{N-1}(x) + \varphi_N(x),$$

donde $\varphi_N(x)$ debe ser un polinomio de grado $\leq N$ y debe anularse en los puntos $x_{N-1}, x_{N-2}, \dots, x_1, x_0$. La función $\varphi_N(x)$ que cumple las condiciones citadas anteriormente, es:

$$\varphi_N(x) = c_N(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{N-2})(x - x_{N-1}).$$

El coeficiente c_N se determina imponiendo la condición $I_N(x_N) = f(x_N)$. Finalmente, se puede expresar la recursión siguiente:

$$I_i(x) = I_{i-1}(x) + \varphi_i(x), \tag{3.9}$$

siendo

$$\varphi_i(x) = c_i(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{i-1}) = c_i \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j),$$

donde los coeficientes c_i se obtienen imponiendo

$$I_i(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, \dots, N.$$

Esta recursión permite construir el interpolante de grado i , en la forma de Newton, a partir del polinomio de Newton de grado $i - 1$, cuando se incorpora el punto de interpolación x_i .

Ejemplo:

Dada una función f y 3 puntos de interpolación x_0, x_1, x_2 del dominio de definición, se propone obtener el polinomio interpolante I_2 , de grado ≤ 2 , en la forma de Newton, que verifique que

$$I_2(x_0) = f(x_0) = y_0, \quad I_2(x_1) = f(x_1) = y_1, \quad I_2(x_2) = f(x_2) = y_2.$$

Se parte de los datos iniciales x_0 y $f(x_0)$ y se obtiene el polinomio de grado 0 siguiente:

$$I_0(x) = f(x_0) = c_0.$$

A partir del interpolante anterior, se añade el punto de interpolación x_1 y se calcula el interpolante de grado ≤ 1 , aplicando la recursión (3.9). La expresión resultante es:

$$I_1(x) = I_0(x) + c_1(x - x_0),$$

donde c_1 se calcula forzando a que $I_1(x_1) = f(x_1)$, de la forma siguiente:

$$I_1(x_1) = f(x_1),$$

$$I_0(x_1) + c_1(x_1 - x_0) = f(x_1),$$

$$c_1 = \frac{f(x_1) - I_0(x_1)}{x_1 - x_0},$$

$$c_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

El interpolante de grado ≤ 1 resulta:

$$I_1(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} (x - x_0).$$

A partir de I_1 , se incorpora el punto x_2 y, aplicando la recursión (3.9), se construye $I_2(x)$, de grado ≤ 2 :

$$I_2(x) = I_1(x) + c_2(x - x_0)(x - x_1),$$

donde c_2 se calcula forzando a que $I_2(x_2) = f(x_2)$, de la forma siguiente:

$$\begin{aligned} I_2(x_2) &= f(x_2), \\ I_1(x_2) + c_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) &= f(x_2), \\ c_2 &= \frac{f(x_2) - I_1(x_2)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}, \\ c_2 &= \frac{f(x_2) - f(x_0) - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} (x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}, \\ c_2 &= \frac{\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{(x_2 - x_0)}, \end{aligned}$$

El interpolante de grado ≤ 2 resulta:

$$I_2(x) = f(x_0) + \left[\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \right] (x - x_0) + \left[\frac{\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{(x_2 - x_0)} \right] (x - x_0)(x - x_1).$$

La forma de Newton permite introducir un nuevo concepto que se conoce como *cociente de incrementos* o *diferencias divididas*, que aporta un algoritmo recursivo para la determinación de los coeficientes de interpolación.

Definición : Diferencia dividida.

Dada una función f y un conjunto de $N + 1$ puntos distintos x_0, x_1, \dots, x_N del dominio de definición de f , se define como *diferencia dividida* de la función f en los $N + 1$ puntos, al coeficiente del monomio x^N del interpolante $I_N(x)$ en potencias de x correspondiente. El número N indica el orden de la diferencia dividida y la notación habitual para representarla es $f[x_0, x_1, \dots, x_N]$, donde las magnitudes x_0, x_1, \dots, x_N son los argumentos de la diferencia dividida.

(Referencia: Diez lecciones de cálculo numérico - Autor: J. M. Sanz-Serna - Universidad de Valladolid - 1998 - Páginas 37 y 38)

Definición : Diferencia dividida.

Dada una función f y un conjunto de $N + 1$ puntos distintos x_0, x_1, \dots, x_N del dominio de definición de f , se define como *diferencia dividida* de la función f en los

$N+1$ puntos a los coeficientes del interpolante polinómico en la forma de Newton.

La diferencia dividida de orden 0 de la función f con respecto al punto x_0 , es el valor de la función en dicho punto y se indica de forma siguiente:

$$f[x_0] = f(x_0).$$

La diferencia dividida de orden 1 de la función f con respecto a los puntos x_0 y x_1 , tiene la expresión siguiente:

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

que es, por definición, el coeficiente del monomio x del interpolante de Newton (ver ejemplo anterior).

Si se añade el punto siguiente x_2 , la diferencia dividida de orden 2 de la función f con respecto a los puntos x_0, x_1 y x_2 , resulta:

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

que es, por definición, el coeficiente del monomio x^2 del interpolante de Newton (ver ejemplo anterior). Se puede observar que la diferencia dividida de orden 2, se puede expresar en función de las diferencias divididas $f[x_0, x_1]$ y $f[x_1, x_2]$, de orden 1, tal como se indica a continuación:

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{(x_2 - x_0)}.$$

De forma recursiva, se pueden ir añadiendo puntos e ir obteniendo diferencias divididas de orden superior, o lo que es equivalente, se pueden ir obteniendo los coeficientes de los monomios de mayor potencia del interpolante correspondiente. Por tanto, a partir de las diferencias divididas de orden $i - 1$, se puede construir la diferencia dividida de orden i mediante la expresión siguiente:

$$f[x_0, x_1, \dots, x_i] = \frac{f[x_1, x_2, \dots, x_i] - f[x_0, x_1, \dots, x_{i-1}]}{x_i - x_0}. \quad (3.10)$$

Al incorporar el último punto x_N , se obtiene la diferencia dividida de orden N de la función f , con respecto a los puntos x_0, x_1, \dots, x_N , resultando la expresión siguiente:

$$f[x_0, x_1, \dots, x_N] = \frac{f[x_1, x_2, \dots, x_N] - f[x_0, x_1, \dots, x_{N-1}]}{x_N - x_0}.$$

Obsérvese que si se permutan los argumentos x_0 y x_1 en la diferencia dividida de orden 1, el resultado no cambia. Es decir que:

$$f[x_0, x_1] = f[x_1, x_0].$$

Por otro lado, si se permutan los argumentos x_0 , x_1 y x_2 en la diferencia dividida de orden 2, el resultado de las $3! = 6$ permutaciones posibles dan el mismo resultado. Es decir que:

$$f[x_0, x_1, x_2] = f[x_0, x_2, x_1] = f[x_1, x_0, x_2] = f[x_1, x_2, x_0] = f[x_2, x_0, x_1] = f[x_2, x_1, x_0].$$

Finalmente, por inducción matemática, se puede demostrar que cualquier permutación de los argumentos, no modifica el valor de la diferencia dividida. Es decir que para la diferencia dividida de orden N , se puede expresar que:

$$f[x_0, x_1, \dots, x_{N-1}, x_N] = f[x_{\alpha_0}, x_{\alpha_1}, \dots, x_{\alpha_N}],$$

donde la serie finita de enteros $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_N$ es cualquier permutación de $0, 1, \dots, N$.
(Referencia : Cálculo numérico - Métodos y aplicaciones - Autores : Brice Carnahan - H. A. Luther - James O. Wilkes - Editorial Rueda (Madrid) - Página 11)

Por último, dados $N + 1$ puntos distintos x_0, x_1, \dots, x_N del dominio de definición de una función f , si se definen las diferencias divididas de orden cero como $f[x_k] = f(x_k)$, $k = 0, 1, \dots, N$, empleando los conceptos explicados anteriormente, se puede construir la tabla siguiente, conocida como tabla de diferencias divididas:

$$\begin{array}{ccccccc}
 x_0 & f[x_0] & & & & & \\
 & & f[x_0, x_1] & & & & \\
 x_1 & f[x_1] & & f[x_0, x_1, x_2] & & & \\
 & & f[x_1, x_2] & & \ddots & & \\
 x_2 & f[x_2] & & f[x_1, x_2, x_3] & & & \\
 & & f[x_2, x_3] & & \ddots & & \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & f[x_0, x_1, \dots, x_N] & \\
 & & & & & \ddots & \\
 x_{N-2} & f[x_{N-2}] & f[x_{N-3}, x_{N-2}] & f[x_{N-3}, x_{N-2}, x_{N-1}] & & \ddots & \\
 & & f[x_{N-2}, x_{N-1}] & & \ddots & & \\
 x_{N-1} & f[x_{N-1}] & & f[x_{N-2}, x_{N-1}, x_N] & & & \\
 & & f[x_{N-1}, x_N] & & & & \\
 x_N & f[x_N] & & & & &
 \end{array} \tag{3.11}$$

La columna primera indica el conjunto de $N + 1$ puntos distintos del dominio de definición de f , y cada columna, a partir de la segunda, representa las diferencias divididas de orden 0, 1, 2 hasta orden N . Moviéndose a través de la diagonal de la tabla de diferencias divididas, se puede obtener la diferencia dividida de orden i , a partir de las diferencias divididas de orden $i - 1$.

Finalmente, el interpolante de grado $\leq N$, en la forma de Newton, se puede expresar en la forma siguiente:

$$\begin{aligned}
 I_N(x) = & f[x_0] + f[x_0, x_1] (x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2] (x - x_0)(x - x_1) + \dots + \\
 & + f[x_0, x_1, \dots, x_N] (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_{N-2})(x - x_{N-1}),
 \end{aligned}$$

donde los coeficientes han sido reemplazados por las diferencias divididas del orden correspondiente. Como las diferencias divididas se pueden construir de forma recursiva a partir de la tabla (3.11), se obtiene una segunda forma recursiva para construir el interpolante en la forma de Newton, siendo esta la forma práctica empleada, en lugar de la forma clásica de obtención de los coeficientes.

En el ejemplo anterior, se puede comprobar que los coeficientes c_0, c_1 y c_2 son las diferencias divididas de la función f , de orden 0, 1 y 2, respectivamente.

3.6. Error de interpolación

Una vez analizadas las tres posibles formas de un polinomio interpolante, resulta de gran importancia conocer la diferencia que existe entre la función f a interpolar y el interpolante I en cada punto del intervalo en el que está definida la función. Dicho de otra forma, interesa contar con una expresión del error de interpolación en el dominio de definición.

De forma general, el error total al aproximar una función proviene de dos fuentes o componentes de error que se explican a continuación. Por un lado, existe un error asociado al método de aproximación empleado que se conoce como *error de truncamiento*. Este error se puede analizar cuestionando la igualdad siguiente:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} I_N(x) = f(x). \quad (3.12)$$

Por otro lado, existe un error asociado a la sensibilidad del método de aproximación a perturbaciones que se conoce como condicionamiento del método de aproximación. Al implementar un método de aproximación en el ordenador, aparecen perturbaciones asociadas a la aritmética de precisión finita por lo que este error se lo conoce como *error de redondeo*. Estas componentes de error se resumen en la expresión siguiente:

$$E_{\text{total}} = R_N(x) + R_L(x), \quad (3.13)$$

donde el error total es el error que podría medirse en el ordenador restando a la función f el interpolante I . En la expresión anterior, $R_N(x)$ es el error de truncamiento y $R_L(x)$ es el error asociado al condicionamiento del método.

En las secciones siguientes se estudian con detalle el error de truncamiento a partir del teorema del error de interpolación y el error de redondeo a partir de la función de Lebesgue.

3.6.1. Error de truncamiento

Para estudiar el error de truncamiento se presenta el teorema siguiente:

Teorema : Error de interpolación.

Sea f una función de clase C^{N+1} , definida en un intervalo $[a, b]$ y sean x_0, x_1, \dots, x_N , $N + 1$ puntos de interpolación distintos, pertenecientes al intervalo $[a, b]$, de los que se obtiene el polinomio interpolante I_N de grado $\leq N$. Entonces, a cada punto

x perteneciente al intervalo $[a, b]$, le corresponde un punto ξ , que corresponde al intervalo:

$$\min(x_0, x_1, \dots, x_N, x) < \xi < \max(x_0, x_1, \dots, x_N, x), \quad (3.14)$$

para el que se cumple la expresión siguiente que corresponde al error de interpolación y que se indica con $R_N(x)$:

$$R_N(x) = f(x) - I_N(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_N) \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}, \quad (3.15)$$

que escrita en forma compacta resulta

$$R_N(x) = f(x) - I_N(x) = \prod_{j=0}^N (x - x_j) \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}. \quad (3.16)$$

Es importante destacar que, a priori, el punto ξ se desconoce y que es función de x , es decir que $\xi = \xi(x)$. Por otro lado, con el fin de simplificar las expresiones matemáticas, en lo que sigue del texto, se indicará con $\pi_{N+1}(x)$ al productorio $\prod_{j=0}^N (x - x_j)$.

Demostración:

Para demostrar el teorema del error de interpolación, se plantean dos pasos previos, que se indican a continuación. En un primer paso se demostrará que el error de interpolación de grado N se puede expresar a partir de las diferencias divididas mediante la expresión siguiente:

$$R_N(x) = \pi_{N+1}(x) f[x, x_0, x_1, \dots, x_N], \quad (3.17)$$

y en un segundo paso, se demostrará que:

$$f[x, x_0, x_1, \dots, x_N] = \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}. \quad (3.18)$$

Para comprobar (3.17) se demuestra por recurrencia que el error de interpolación $R_N(x)$ es:

$$R_N(x) = \pi_{N+1}(x) f[x, x_0, x_1, \dots, x_N]. \quad (3.19)$$

Se parte de dos puntos de interpolación x_0 y x_1 y se construye el interpolante de grado 1 en la forma de Newton,

$$I_1(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1] (x - x_0), \quad (3.20)$$

y la función a interpolar resulta ser:

$$f(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + R_1(x). \quad (3.21)$$

De la expresión anterior, se despeja $R_1(x)$

$$R_1(x) = f(x) - f[x_0] - f[x_0, x_1](x - x_0), \quad (3.22)$$

donde por definición de diferencia dividida,

$$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}. \quad (3.23)$$

Si de la expresión de $R_1(x)$, se saca factor común $(x - x_0)(x - x_1)$, se obtiene

$$R_1(x) = (x - x_0)(x - x_1) \left[\frac{1}{x - x_1} \left(\frac{f(x) - f[x_0]}{x - x_0} - \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} \right) \right]. \quad (3.24)$$

en donde $(x - x_0)(x - x_1)$ es $\pi_2(x)$ y la expresión entre corchetes es la diferencia dividida $f[x, x_0, x_1]$, por tanto,

$$R_1(x) = \pi_2(x) \left[\frac{1}{x - x_1} (f[x_0, x] - f[x_0, x_1]) \right] = \pi_2(x) f[x, x_0, x_1]. \quad (3.25)$$

A continuación, se añade el punto de interpolación x_2 a los puntos x_0, x_1 . El interpolante de grado 2 en la forma de Newton es:

$$I_2(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1), \quad (3.26)$$

y la función a interpolar es:

$$f(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + R_2(x). \quad (3.27)$$

Si se despeja $R_2(x)$ de la expresión anterior se tiene:

$$R_2(x) = f(x) - f[x_0] - f[x_0, x_1](x - x_0) - f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1), \quad (3.28)$$

donde por definición de diferencia dividida,

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{1}{x_2 - x_0} (f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]). \quad (3.29)$$

Si de la expresión de $R_2(x)$, se saca factor común $(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$, se obtiene

$$R_2(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \left[\frac{1}{x - x_2} (f[x, x_0, x_1] - f[x_0, x_1, x_2]) \right] = \pi_3(x) f[x, x_0, x_1, x_2]. \quad (3.30)$$

Finalmente, por recurrencia, se llega a demostrar (3.17):

$$R_N(x) = \pi_{N+1}(x) f[x, x_0, x_1, \dots, x_N]. \quad (3.31)$$

En un segundo paso, se pretende demostrar (3.18), es decir que la diferencia dividida del paso anterior es:

$$f[x, x_0, x_1, \dots, x_N] = \frac{f^{N+1}(\xi)}{(N+1)!}. \quad (3.32)$$

En principio se sabe que:

$$R_N(x) = \pi_{N+1}(x) f[x, x_0, x_1, \dots, x_N] = f(x) - I_N(x). \quad (3.33)$$

Para esta demostración, se construye una función $Q(x)$ a partir de la expresión siguiente:

$$Q(x) = f(x) - I_N(x) - \pi_{N+1}(x) G(t), \quad (3.34)$$

donde $G(t)$ es:

$$G(t) = f[t, x_0, \dots, x_N]. \quad (3.35)$$

A continuación se analizan los ceros de la función Q y de sus derivadas sucesivas.

La función Q tiene $N+2$ ceros que se describen a continuación:

$$\begin{cases} N+1 \text{ ceros en: } & x_j, \quad j=0, \dots, N, \\ 1 \text{ cero en: } & x=t. \end{cases} \quad (3.36)$$

Los $N+1$ primeros ceros provienen de los $N+1$ puntos de interpolación x_j , $j=0, \dots, N$. En ellos, por definición de interpolación, se cumple que:

$$f(x_j) - I_N(x_j) = 0. \quad (3.37)$$

Por otro lado, la función $\pi_{N+1}(x_j) = 0$. Finalmente, la función Q se anula en los $N+1$ puntos de interpolación:

$$Q(x_j) = f(x_j) - I_N(x_j) - \pi_{N+1}(x_j) G(t) = 0, \quad j=0, \dots, N. \quad (3.38)$$

Además, la función Q tiene un cero en $x=t$, por definición de interpolación:

$$Q(t) = f(t) - I_N(t) - \pi_{N+1}(t) G(t) = 0. \quad (3.39)$$

Si se deriva Q una vez respecto de x , se observa que Q' tiene $N+1$ ceros, que Q'' tiene N ceros, Q''' tiene $N-1$ ceros y así hasta la derivada de orden $N+1$ de Q que tiene la expresión siguiente:

$$Q^{(N+1)}(x) = f^{(N+1)}(x) - I_N^{(N+1)}(x) - (N+1)! G(t), \quad (3.40)$$

en la que $I_N^{(N+1)} = 0$. Finalmente, la función $Q^{(N+1)}$ tiene la expresión siguiente:

$$Q^{(N+1)}(x) = f^{(N+1)}(x) - (N+1)! G(t) = f^{(N+1)}(x) - (N+1)! f[t, x_0, x_1, \dots, x_N], \quad (3.41)$$

donde por el teorema de Rolle, tiene un cero en algún valor $x = \xi$, que permite expresar que:

$$f^{(N+1)}(\xi) = (N+1)! G(t) = (N+1)! f[t, x_0, x_1, \dots, x_N], \quad (3.42)$$

y donde ξ es función de t, x_0, x_1, \dots, x_N . De esta forma queda demostrado (3.18)

$$f[x, x_0, x_1, \dots, x_N] = \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}. \quad (3.43)$$

A partir de los resultados (3.17) y (3.18) se demuestra el teorema del error de interpolación:

$$R_N(x) = \pi_{N+1}(x) \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}, \quad (3.44)$$

donde ξ pertenece al intervalo:

$$\min(x_0, x_1, \dots, x_N, x) < \xi < \max(x_0, x_1, \dots, x_N, x).$$

De la expresión del error de interpolación (3.15),

$$R_N(x) = \pi_{N+1}(x) \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}, \quad (3.45)$$

se observa que el error depende de dos cuestiones, una de ellas es la regularidad de la función a interpolar y la otra son los puntos de interpolación. Con respecto a la regularidad de la función, se observa que la misma debe ser derivable hasta el orden $N+1$. Independientemente de su regularidad, si $f^{(N+1)}$ es grande o pequeña, el error de interpolación será grande o pequeño. En particular, si $f^{(N+1)}$ no está acotada con N en el dominio de definición, el error de interpolación resultará no acotado. Con respecto a los puntos de interpolación, se observa que afectan al error de interpolación en el número de puntos a través de $(N+1)!$ y en la distribución de puntos de interpolación a través de la función $\pi_{N+1}(x)$. En cuanto a la distribución de puntos pueden darse distribuciones equiespaciadas y no equiespaciadas.

Antes de analizar el comportamiento del error con los puntos de interpolación, se presentan dos métodos para aproximar funciones mediante interpolantes que son la *interpolación global* y la *interpolación continua a trozos*. La interpolación global consiste en utilizar todos los puntos de interpolación dentro del dominio de

definición, para construir un interpolante que será continuo en dicho dominio. En este caso, se hablará de $N + 1$ puntos de interpolación y el interpolante resultante será I_N . Además, la interpolación global puede ser equiespaciada y no equiespaciada. La interpolación continua a trozos consiste en utilizar una cantidad, por lo general pequeña, de puntos de interpolación para construir un interpolante continuo a trozos. En este caso, se hablará de $q + 1$ puntos de interpolación y el interpolante resultante será I_q . El método de interpolación continua a trozos es el más empleado cuando, a partir de la teoría de interpolación, se pretende obtener métodos numéricos para la solución de ecuaciones diferenciales. La estrategia de construcción de un interpolante continuo a trozos se explicará en secciones siguientes de este capítulo. En secciones siguientes se estudiará el comportamiento de la función $\pi_{N+1}(x)$ para las distribuciones de puntos citadas anteriormente.

3.6.2. Error de redondeo

NO LEER - Falta darle estructura

Constante de Lebesgue y función de Lebesgue en la interpolación polinómica

Se define la función de Lebesgue como:

$$\Lambda_N(x) = \sum_{j=0}^N |\ell_j(x)|,$$

A priori, no se conoce cuál es la *mejor aproximación* posible pero puede expresarse de la forma siguiente:

$$I_N^*(x) = \sum_{j=0}^N I_N^*(x_j) \ell_j(x).$$

Por otro lado, dada una función $f(x)$ y un conjunto de puntos $\{x_0, \dots, x_j, \dots, x_N\}$ el interpolante puede expresarse como:

$$I_N(x) = \sum_{j=0}^N f(x_j) \ell_j(x).$$

Si se restan las dos expresiones anteriores, se tiene:

$$I_N - I_N^* = \sum_{j=0}^N \left(f(x_j) - I_N^*(x_j) \right) \ell_j(x).$$

Al aplicar valores absolutos a la expresión anterior se llega a la desigualdad siguiente:

$$\left| I_N - I_N^* \right| \leq \max_{j=0, \dots, N} \left| f(x_j) - I_N^*(x_j) \right| \sum_{j=0}^N |\ell_j(x)|.$$

Si ahora se considera el valor máximo de los valores absolutos en el intervalo $[-1, 1]$, se tiene:

$$\max_{x \in [-1, 1]} \left| I_N - I_N^* \right| \leq \max_{j=0, \dots, N} \left| f(x_j) - I_N^*(x_j) \right| \max_{x \in [-1, 1]} \sum_{j=0}^N |\ell_j(x)|. \quad (3.46)$$

En la expresión anterior,

$$\max_{x \in [-1, 1]} \left| I_N - I_N^* \right| = \|I_N - I_N^*\|_\infty,$$

es la norma infinita y

$$\max_{x \in [-1, 1]} \sum_{j=0}^N |\ell_j(x)| = \Lambda_N,$$

por lo que la expresión (3.46) queda:

$$\|I_N - I_N^*\|_\infty \leq \max_{j=0, \dots, N} \left| f(x_j) - I_N^*(x_j) \right| \Lambda_N.$$

Por otro lado, el error de interpolación es:

$$f(x) - I_N(x) = f(x) - I_N^*(x) + I_N^*(x) - I_N(x).$$

Al aplicar módulos a la expresión anterior, se tiene:

$$|f(x) - I_N(x)| \leq \left| f(x) - I_N^*(x) \right| + \left| I_N^*(x) - I_N(x) \right|.$$

Si ahora se considera el valor máximo de los valores absolutos en el intervalo $[-1, 1]$, se tiene:

$$\max_{x \in [-1, 1]} |f(x) - I_N(x)| \leq \max_{x \in [-1, 1]} \left| f(x) - I_N^*(x) \right| + \max_{x \in [-1, 1]} \left| I_N^*(x) - I_N(x) \right|.$$

Aplicando (3.46) a la expresión anterior se tiene:

$$\max_{x \in [-1, 1]} |f(x) - I_N(x)| \leq \max_{x \in [-1, 1]} \left| f(x) - I_N^*(x) \right| + \max_{j=0, \dots, N} \left| f(x_j) - I_N^*(x_j) \right| \Lambda_N.$$

Finalmente, la expresión anterior en la norma infinita queda:

$$\|f - I_N\|_\infty \leq (1 + \Lambda_N) \|f - I_N^*\|_\infty.$$

Acotación del error de interpolación $E_N(x)$

$$E_N(x) = \pi_{N+1}(x) \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} + \sum_{j=0}^N \epsilon_j \ell_j(x).$$

$$|E_N(x)| \leq \left| \pi_{N+1}(x) \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} \right| + \left| \sum_{j=0}^N \epsilon_j \ell_j(x) \right|.$$

$$|E_N(x)| \leq |\pi_{N+1}(x)| \frac{|f^{(N+1)}(\xi)|}{(N+1)!} + \|\epsilon\|_\infty \sum_{j=0}^N |\ell_j(x)|,$$

donde

$$\sum_{j=0}^N |\ell_j(x)| = \Lambda_N(x).$$

$$\max_x |E_N(x)| \leq \max_x |\pi_{N+1}(x)| \frac{\max |f^{(N+1)}(\xi)|}{(N+1)!} + \|\epsilon\|_\infty \Lambda_N.$$

$$\|E_N\|_\infty \leq \|\pi_{N+1}\|_\infty \frac{\|f^{(N+1)}(\xi)\|_\infty}{(N+1)!} + \|\epsilon\|_\infty \Lambda_N.$$

A continuación, se plantean las preguntas siguientes:

- ¿ está acotada la derivada $f^{(N+1)}(\xi)$? (fenómeno de Runge)
- ¿ cómo se comporta $\|\pi_{N+1}\|$ con $N \rightarrow \infty$?
- ¿ cómo se comporta Λ_N con $N \rightarrow \infty$?

Si los puntos de interpolación están equiespaciados, el resultado es un desastre. Si los puntos están equiespaciados a una distancia Δx , las respuestas a algunas de las cuestiones mencionadas anteriormente son:

$$\|\pi_{N+1}\| \leq \frac{\Delta x^{N+1}}{4} N! = \left(\frac{2}{N}\right)^{N+1} \frac{N!}{4} \approx \frac{2^N}{N^N} \frac{1}{N} \sqrt{2\pi N} \frac{N^N}{e^N} = \left(\frac{2}{e}\right)^N \sqrt{\frac{2\pi}{N}}.$$

$$\Lambda_N \leq \frac{2^{N+1}}{e N(\log N + \gamma)}. \quad (\text{Verificar})$$

En la sección siguiente se analizará el comportamiento del error con los puntos de interpolación en la interpolación global y a continuación, se estudiará el efecto de los puntos de interpolación en la interpolación continua a trozos.

3.7. Interpolación global

Como se ha explicado anteriormente, la interpolación global consiste en utilizar todos los puntos de interpolación dentro del dominio de definición, para construir el interpolante. En este caso, se considera una función f y $N + 1$ puntos del dominio de definición de f a partir de los cuales se construye el interpolante I_N de grado $\leq N$. La función f se puede expresar como:

$$f(x) = I_N(x) + R_N(x),$$

donde R_N es el error de interpolación. El teorema del error de interpolación permite escribir la expresión anterior de la forma siguiente:

$$f(x) = I_N(x) + \pi_{N+1}(x) \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} = I_N(x) + \pi_{N+1}(x) f[x, x_0, \dots, x_N].$$

Para este problema, se propone estudiar el comportamiento del error de interpolación a través de $\pi_{N+1}(x)$, en los dos casos siguientes. Primero se analiza el caso cuando $N \rightarrow \infty$, en una distribución equiespaciada de puntos y a continuación, se estudia un número de puntos N fijo y una distribución no equiespaciada de puntos y se analiza el comportamiento del error de interpolación. Para este último caso, se considerará una distribución de puntos Chebyshev. En los apartados siguientes se desarrollan estos temas.

3.8. Distribuciones equiespaciadas de puntos

En este apartado se estudia el comportamiento del error de interpolación cuando el número de puntos tiende a infinito, con una distribución equiespaciada de los mismos. En particular, se explica por qué el error de interpolación es mayor en los extremos del intervalo de interpolación y se determina cuál es el valor máximo de este error. Se plantea una distribución equiespaciada de $N + 1$ puntos de interpolación donde la distancia entre puntos consecutivos es Δx . Para dos puntos consecutivos genéricos (x_j, x_{j+1}) la distancia tiene la expresión siguiente:

$$\Delta x = x_{j+1} - x_j.$$

Esta distribución se muestra en la figura (3.3).

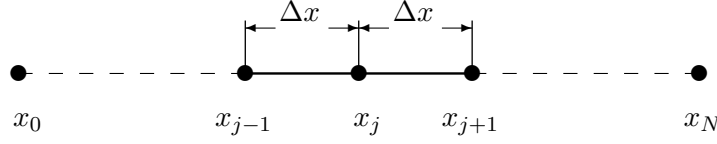


Figura 3.3: Distribución equiespaciada de puntos de interpolación

Del teorema del error de interpolación se tiene que $\pi_{N+1}(x)$ es:

$$\pi_{N+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_N). \quad (3.47)$$

Se consideran dos puntos de interpolación consecutivos genéricos x_j y x_{j+1} . Suponiendo que $\pi_{N+1}(x)$ alcanza un extremo en un valor de x que pertenece al intervalo (x_j, x_{j+1}) , se propone demostrar que:

$$|(x - x_j)(x - x_{j+1})| \leq \frac{\Delta x^2}{4}. \quad (3.48)$$

Para ello, en los pasos siguientes, se busca el extremo de la función $y = (x - x_j)(x - x_{j+1})$:

$$y = (x - x_j)(x - x_{j+1}),$$

$$y' = x - x_{j+1} + x - x_j = 0,$$

$$x_{\text{extremo}} = \frac{1}{2}(x_j + x_{j+1}),$$

$$y_{\text{extremo}} = \left[\frac{1}{2}(x_j + x_{j+1}) - x_j \right] \left[\frac{1}{2}(x_j + x_{j+1}) - x_{j+1} \right],$$

$$y_{\text{extremo}} = \left[\frac{1}{2}(x_{j+1} - x_j) \right] \left[\frac{1}{2}(x_j - x_{j+1}) \right],$$

$$y_{\text{extremo}} = \left(\frac{\Delta x}{2} \right) \left(-\frac{\Delta x}{2} \right) = -\frac{\Delta x^2}{4}.$$

Se observa que el extremo de $\pi_{N+1}(x)$, en caso de obtenerse en el intervalo (x_j, x_{j+1}) , se alcanza en el punto medio de intervalo y su valor es $\frac{\Delta x^2}{4}$ (ver figura 3.4). Aplicando módulos a la expresión anterior, se demuestra (3.48).

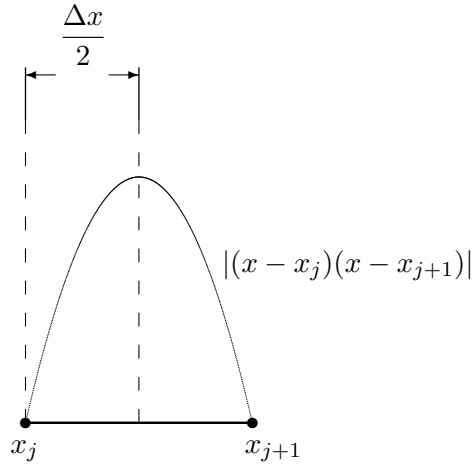


Figura 3.4: Representación de $|\pi_{N+1}(x)|$ entre los puntos de interpolación x_j y x_{j+1}

A continuación, se plantea el caso general de una interpolación global tal como se representa en la figura (3.5). Observando la misma se puede comprobar que:

$$\begin{aligned} |x - x_i| &\leq (j - i + 1)\Delta x, & \text{para } i < j, \\ |x - x_i| &\leq (i - j)\Delta x, & \text{para } i > j + 1. \end{aligned} \quad (3.49)$$

En la figura (3.5) el índice i indica puntos de interpolación genéricos por delante y por detrás del intervalo (x_j, x_{j+1}) donde se supone que existe el máximo de $|\pi_{N+1}(x)|$.

Aplicando módulos a la expresión (3.47), se tiene que:

$$|\pi_{N+1}(x)| \leq |(x - x_0)| \cdots |(x - x_{j-1})| \frac{\Delta x^2}{4} |(x - x_{j+2})| \cdots |(x - x_{N-1})| |(x - x_N)|,$$

y haciendo uso de las desigualdades (3.49), se llega a que:

$$|\pi_{N+1}(x)| \leq (j + 1) j (j - 1) \cdots 2 \Delta x^j \frac{\Delta x^2}{4} 2 \cdot 3 \cdots (N - j) \Delta x^{N-j-1},$$

$$|\pi_{N+1}(x)| \leq (j + 1)! (N - j)! \frac{\Delta x^{N+1}}{4}.$$

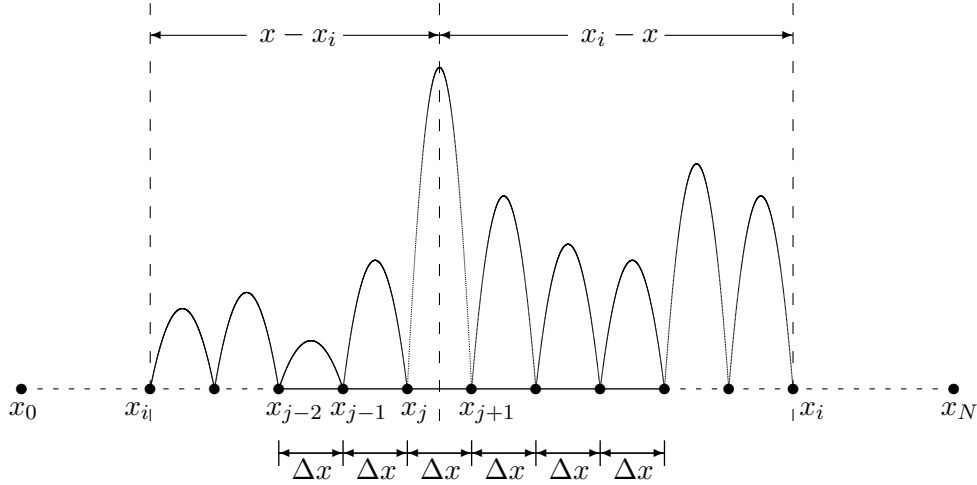


Figura 3.5: Extremos de $|\pi_{N+1}(x)|$ en un caso general de una interpolación global equiespaciada

La expresión anterior da una cota de $|\pi_{N+1}(x)|$, si se considera que el máximo está en el intervalo (x_j, x_{j+1}) . Si ahora se mueve el índice j desde $j = 0, 1, \dots, N - 1$, se puede comprobar que los valores máximos se presentan en los extremos del dominio de interpolación, correspondiendo a los índices $j = 0$ y $j = N - 1$. Es decir, los máximos de $|\pi_{N+1}(x)|$ se alcanzan en los intervalos (x_0, x_1) y (x_{N-1}, x_N) . y valen:

$$|\pi_{N+1}(x)| \leq N! \frac{\Delta x^{N+1}}{4}, \quad (3.50)$$

para $j = 0$ y $j = N - 1$. El resultado (3.50) tiene una gran importancia ya que permite conocer una cota del error de interpolación en función del número de puntos elegido, o dicho de otra forma, del Δx considerado, a través de la función $\pi_{N+1}(x)$. De forma esquemática, en la figura (3.6) se representa $|\pi_{N+1}(x)|$ para una interpolación global equiespaciada genérica donde puede observarse que los errores son importantes en los extremos del dominio de interpolación y son pequeños en las proximidades del punto medio de dicho dominio.

Si en la expresión (3.50) se considera el signo igual y se evalúa el logaritmo se tiene que:

$$\log |\pi_{N+1}(x)| = \log \left(\frac{N!}{4} \right) + (N + 1) [\log (x_N - x_0) - \log N].$$

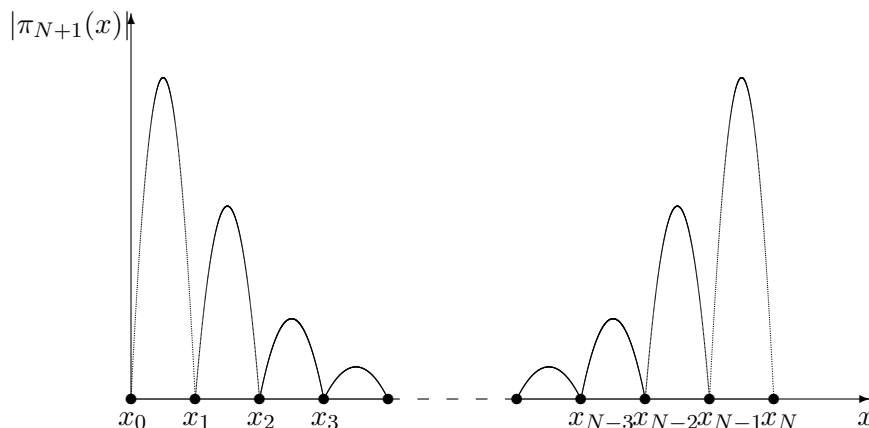


Figura 3.6: $|\pi_{N+1}(x)|$ en una interpolación global equispaciada

De forma esquemática, la expresión anterior tiene la representación gráfica que se indica en la figura (3.7) y que representa la convergencia de $|\pi_{N+1}(x)|$ con el número de puntos N en una interpolación global equispaciada.

Una vez estudiado el comportamiento de $\pi_{N+1}(x)$, se estudia una cota del error de interpolación $R_N(x)$. Aplicando módulos en la expresión del error de interpolación (3.15), se obtiene la desigualdad siguiente:

$$|R_N(x)| = |\pi_{N+1}(x)| \left| \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} \right|,$$

$$|R_N(x)| \leq N! \frac{\Delta x^{N+1}}{4} \left| \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} \right|,$$

$$|R_N(x)| \leq \frac{\Delta x^{N+1}}{4} \frac{|f^{(N+1)}(\xi)|}{(N+1)}.$$

Si la función f a interpolar tiene derivadas de cualquier orden acotadas, como por ejemplo es la función $f(x) = \sin(x)$, y se estudia el límite del modulo del error con $N \rightarrow \infty$ se tiene que:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |R_N(x)| \leq \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{\Delta x^{N+1}}{4} \frac{1}{(N+1)} \right] = 0.$$

En este caso, se comprueba que el error converge a cero cuando $N \rightarrow \infty$. Si por el contrario, se interpola una función que tiene derivadas no acotadas como por

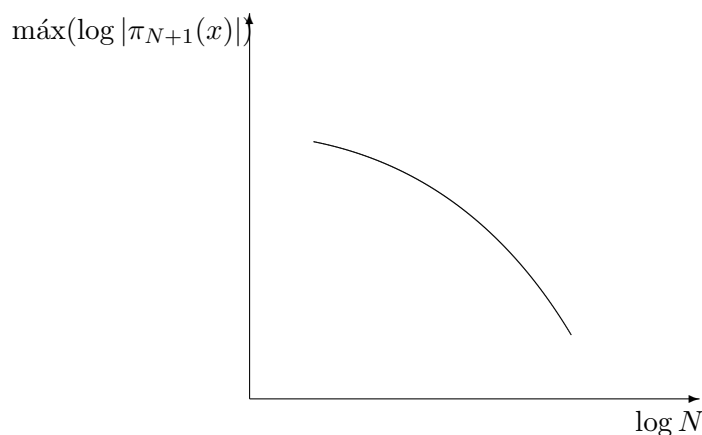


Figura 3.7: Convergencia de $|\pi_{N+1}(x)|$ en función de N para una interpolación global equiespaciada

ejemplo es la función de Runge, que tiene la expresión siguiente:

$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}, \quad x \in [-1, 1],$$

se tiene

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |R_N(x)| = \infty,$$

porque las derivadas $f^{(N+1)}$ para la función de Runge no están acotadas cuando $N \rightarrow \infty$.

3.9. Distribuciones de puntos no equiespaciados

Como se ha visto en el apartado anterior, (ver figura (3.6)) una distribución equiespaciada de puntos de interpolación produce errores grandes de $\pi_{N+1}(x)$ y $\lambda_N(x)$ en los extremos del dominio de interpolación y errores pequeños en las proximidades del punto medio de dicho dominio. La pregunta que surge es: sería posible encontrar distribuciones de puntos que tengan los extremos de $\pi_{N+1}(x)$ uniformes para todo x perteneciente al intervalo $[-1, 1]$? La respuesta a esta pregunta es afirmativa. Chebyshev (??) demostró que concentrando puntos en los extremos del intervalo $[-1, 1]$, se podría obtener $\pi_{N+1}(x)$ con extremos uniformes.

Se buscan funciones con extremos iguales tales como senos y cosenos trigonométricos. Para estas funciones, una distribución equiespaciada de la variable $\theta \in [0, \pi]$, produce una distribución que concentra puntos de la variable

$x \in [-1, 1]$. Si se realiza un cambio de variable de la forma:

$$x = \cos \theta, \quad (3.51)$$

se observa que los puntos x se concentran en los extremos del intervalo. El primer paso a demostrar es que $f(\theta) = \cos[(N+1)\theta]$ con el cambio de variable (3.51) es un polinomio de grado $N+1$. Como puede observarse para los primeros valores de N , los polinomios en x resultantes son los siguientes:

$$\begin{aligned} N = 0, \quad & f(\theta) = K \cos \theta = K x, \\ N = 1, \quad & f(\theta) = K \cos 2\theta = K (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) = \\ & K (x^2 - (1 - x^2)) = K (2x^2 - 1), \\ N = 2, \quad & f(\theta) = K \cos 3\theta = K \cos (2\theta + \theta) = \\ & K (\cos 2\theta \cos \theta - \sin 2\theta \sin \theta) = \\ & K [(2x^2 - 1)x - 2x(1 - x^2)] = K (4x^3 - 3x), \\ \vdots \quad & \vdots \end{aligned} \quad (3.52)$$

Como $f(\theta)$ es un polinomio en x de grado $N+1$ se tiene la expresión siguiente:

$$\pi_{N+1}(x) = f(\theta) = K \cos[(N+1)\theta]. \quad (3.53)$$

Por lo tanto, los ceros de $\pi_{N+1}(x)$ son los puntos nodales x_0, \dots, x_N . Es importante hacer notar que como:

$$\pi_{N+1}(x) = K \cos[(N+1)\theta], \quad (3.54)$$

el polinomio de error $\pi_{N+1}(x)$ oscila entre ± 1 en el dominio $[-1, 1]$. Por lo tanto, los ceros de $\pi_{N+1}(x)$ son los puntos nodales x_0, \dots, x_N que verifican que los extremos de $\pi_{N+1}(x)$ son uniformes en $[-1, 1]$. En la expresión (3.54), K es una constante. A continuación, se calculan los ceros del polinomio (??). a partir de la expresión siguiente:

$$\cos(N+1)\theta = 0, \quad (3.55)$$

en la que los ceros se obtienen para los argumentos siguientes:

$$(N+1)\theta_j = \frac{\pi}{2} + j\pi, \quad j = 0, \dots, N.$$

Como $x = \cos \theta$, los $N+1$ puntos que anulan la función $\pi_{N+1}(x)$, son:

$$x_j = \cos \left[\left(\frac{\pi}{2} + j\pi \right) \frac{1}{N+1} \right], \quad j = 0, \dots, N. \quad (3.56)$$

El primer punto nodal es:

$$x_0 = \cos \left[\frac{\pi}{2(N+1)} \right], \quad (3.57)$$

que no coincide con $x = +1$ y el último:

$$x_N = \cos \left(\frac{\frac{\pi}{2} + \pi N}{N+1} \right), \quad (3.58)$$

que no coincide con $x = -1$. La distribución de puntos (3.56) se conoce como *los ceros de Chebyshev* (??). Una vez obtenida la distribución de puntos (3.56) se calculan los extremos del polinomio (??) para la distribución de puntos (3.56), con el fin de conocer el comportamiento de $\pi_{N+1}(x)$ y poder compararlo con la figura (3.6). Para ello se deriva el interpolante con respecto a x y se calculan los ceros del polinomio derivado.

$$\begin{aligned} \pi'_{N+1}(x) &= 0, \\ \pi'_{N+1}(x) &= -K \sin(N+1)\theta \quad (N+1) \frac{d\theta}{dx} = K \frac{\sin(N+1)\theta}{\sin \theta} (N+1). \end{aligned} \quad (3.59)$$

Los ceros del polinomio anterior son los valores de θ_j que anulan la expresión siguiente:

$$K \frac{\sin(N+1)\theta}{\sin \theta} (N+1) = 0, \quad (3.60)$$

y como $\pi'_{N+1}(x)$ es un polinomio de grado N , existen N ceros que están dados por:

$$(N+1) \theta_j = 0 + j\pi, \quad j = 1, \dots, N. \quad (3.61)$$

Con el fin de identificar los extremos de los ceros, se denominan por y_j a los valores en donde se alcanzan los extremos de $\pi_{N+1}(x)$ que tienen la expresión siguiente:

$$y_j = \cos \left(\frac{j\pi}{N+1} \right), \quad j = 1, \dots, N. \quad (3.62)$$

Finalmente, se calculan los extremos del polinomio (??) en los puntos y_j :

$$\pi_{N+1}(y_j) = K \cos \left[(N+1) \frac{j\pi}{(N+1)} \right] = K (-1)^j, \quad j = 1, \dots, N. \quad (3.63)$$

En la expresión anterior, falta determinar la constante K . Para ello, como el coeficiente que multiplica al monomio x^{N+1} en $\pi_{N+1}(x)$ es 1, a través de la recursión 2^{N+1} , se identifican los coeficientes para obtener K :

$$K 2^N = 1, \quad K = \frac{1}{2^N}. \quad (3.64)$$

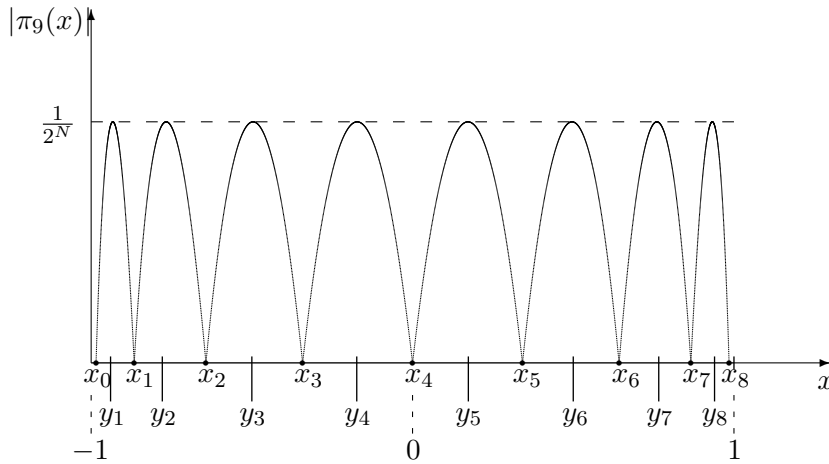


Figura 3.8: Ceros y extremos de $|\pi_{N+1}(x)|$ para un conjunto de 9 puntos ($N = 8$) no equiespaciados obtenidos a partir de los ceros de $\pi_{N+1}(x)$

Se observa que el polinomio $\pi_{N+1}(x)$, que interviene en la expresión del error de interpolación, oscila entre $\pm \frac{1}{2^N}$ cuando se usa la distribución de puntos (3.56). Desde este punto de vista, la distribución de puntos obtenida a partir de los ceros de $\pi_{N+1}(x)$ resulta más beneficiosa que una distribución de puntos equiespaciada. A modo de ejemplo, la figura (3.8) presenta los ceros y extremos de $|\pi_{N+1}(x)|$ para 9 puntos distribuidos a partir de la expresión (3.56). En esta representación gráfica, θ_j se recorre desde $j = N$ hasta $j = 0$ para obtener el conjunto de puntos correspondiente x_0, x_1, \dots, x_8 .

Tal como puede observarse en la figura y como puede comprobarse en las expresiones correspondientes, un inconveniente que presenta la distribución de puntos (3.56) es que no contiene los puntos extremos del intervalo de interpolación.

Para contener los extremos del intervalo $[-1, 1]$ como puntos nodales y puntos de interpolación, surge otro conjunto de puntos nodales llamados los *extremos de Chebyshev* que son:

$$x_j = \cos\left(\frac{j\pi}{N}\right), \quad j = 0, \dots, N. \quad (3.65)$$

Es importante hacer notar que para esta distribución de puntos nodales, $\pi_{N+1}(x)$ y $\lambda_N(x)$, son no uniformes pero se comportan mucho mejor que para distribuciones equiespaciadas de puntos.

3.10. Relación entre la interpolación de Lagrange y la serie discreta

La pregunta que surge ahora es determinar la bondad del ajuste del interpolante de Lagrange basado en distribuciones no equiespaciadas.

En esta sección, se demostrará que ciertas distribuciones de $N + 1$ puntos o grados de libertad tienen el mismo comportamiento asintótico del error que los mejores desarrollos en funciones ortogonales con precisión espectral. Para llevar a cabo esta demostración, primero se debe definir el concepto de precisión espectral en un desarrollo en serie de funciones ortogonales. Sea el desarrollo en serie de $f(x)$ siguiente:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k \phi_k(x), \quad (3.66)$$

donde \hat{c}_k son los coeficientes dados por:

$$\hat{c}_k = \int_a^b \phi_k(x) f(x) w(x) dx. \quad (3.67)$$

Se dice que el desarrollo (3.66) tiene precisión espectral cuando $|\hat{c}_k| \ll O\left(\frac{1}{k^m}\right)$, $\forall m$ entero (??).

Poner referencia a Sturm-Liouville.

La importancia de la precisión espectral reside en la velocidad de convergencia de la serie. Con muy pocos términos o grados de libertad de (3.66), $f(x)$ se puede representar con mucha precisión puesto que en cuanto k sea grande, $|\hat{c}_k| \ll O\left(\frac{1}{k^m}\right)$ se hacen muy pequeños no siendo necesario retener muchos términos.

Si las funciones $\phi_k(x)$ son polinomios de grado k , (3.66) es un polinomio de grado N . Este polinomio no tiene, en principio, nada que ver con el interplante de Lagrange. Sin embargo, vamos a definir una serie discreta de (3.66) que permitirá la comparación con el polinomio de Lagrange.

Dada la serie siguiente:

$$P_N(x) = \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \phi_k(x), \quad (3.68)$$

se fuerza a que el interpolante pase por los puntos nodales o puntos de colocación:

$$P_N(x_j) = \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \phi_k(x_j), \quad j = 0, \dots, N. \quad (3.69)$$

3.10. RELACIÓN ENTRE LA INTERPOLACIÓN DE LAGRANGE Y LA SERIE DISCRETA

51

El sistema anterior constituye un sistema de $N + 1$ ecuaciones con $N + 1$ incógnitas \tilde{c}_k . La serie anterior se denomina la serie discreta y la determinación de los coeficientes \tilde{c}_k pasa por la resolución del sistema (3.69).

Un ejemplo de funciones polinómicas ortogonales con precisión espectral son los polinomios de Chebyshev de primera clase:

$$T_k(x) = \cos(k\theta), \quad \text{con} \quad \cos \theta = x. \quad (3.70)$$

Para estos polinomios, el sistema (3.69) se puede resolver analíticamente mediante el siguiente procedimiento. Se multiplica en (3.69) por $T_m(x_j)$ y se suma desde $j = 0, \dots, N$ obteniéndose la expresión siguiente:

$$\sum_{j=0}^N T_m(x_j) P_N(x_j) = \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \sum_{j=0}^N T_m(x_j) T_k(x_j). \quad (3.71)$$

A continuación, se demuestra lo que vale la cantidad:

$$\sum_{j=0}^N T_m(x_j) T_k(x_j), \quad (3.72)$$

de la expresión (3.71). La misma, en función de la variable θ es:

$$\sum_{j=0}^N \cos(m \theta_j) \cos(k \theta_j) = \sum_{j=0}^N \frac{1}{2} [\cos(m+k) \theta_j + \cos(m-k) \theta_j]. \quad (3.73)$$

Hacer dibujo

Sumando por parejas, dado un θ_j existe su complementario $\pi - \theta_j$:

$$\cos(m+k) \theta_j + \cos[\pi - (m+k) \theta_j] = 0, \quad (3.74)$$

por lo que (3.72) vale cero salvo que $k = m$. Si $k = m = 0$, se tiene que:

$$\sum_{j=0}^N 1 \cdot 1 = N + 1, \quad (3.75)$$

y si $k = m \neq 0$, se tiene que:

$$\sum_{j=0}^N \cos(m \theta_j) \cos(m \theta_j) = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^N [\cos(2m \theta_j) + 1] = \frac{N+1}{2}. \quad (3.76)$$

De esta forma,

$$\tilde{c}_m = \frac{1}{\gamma_m} \sum_{j=0}^N f(x_j) T_m(x_j), \quad (3.77)$$

con:

$$\gamma_m = \begin{cases} \frac{N+1}{2}, & m = 0, \\ N+1, & m = 0. \end{cases} \quad (3.78)$$

Como el interpolante es de grado N y pasa por los puntos x_j , la serie discreta de Chebyshev **coincide** con el interpolante de Lagrange cuando los puntos nodales son los ceros de Chebyshev.

A continuación, se plantea la siguiente pregunta: Si el interpolante de Lagrange es idéntico a la serie discreta, tiene la serie discreta la misma precisión espectral que la serie truncada ? La respuesta a esta pregunta se resuelve en la siguiente sección.

3.11. Relación entre la serie discreta y la serie truncada

$$f(x_j) = \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k T_k(x_j) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k T_k(x_j). \quad (3.79)$$

Multiplicando por $T_m(x_j)$ y sumando desde $j = 0, \dots, N$ se tiene:

$$\sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \sum_{j=0}^N T_m(x_j) T_k(x_j) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{c}_k \sum_{j=0}^N T_m(x_j) T_k(x_j). \quad (3.80)$$

$$\tilde{c}_m \gamma_m = \hat{c}_m \gamma_m + \sum_{k=N+1}^{\infty} \hat{c}_k \underbrace{\sum_{j=0}^N T_m(x_j) T_k(x_j)}_{k=m+pN \text{ es distinto de cero}}. \quad (3.81)$$

Finalmente se llega a la relación:

$$\tilde{c}_m = \hat{c}_m + \sum_{|p| \geq 1} \hat{c}_{m+pN}. \quad (3.82)$$

Es importante hacer notar que si la serie truncada \hat{c}_k tiene precisión espectral, la serie discreta también tiene comportamiento espectral y por lo tanto el interpolante de Lagrange con los puntos (3.56) tiene un error tan pequeño como el

3.11. RELACIÓN ENTRE LA SERIE DISCRETA Y LA SERIE TRUNCADA 53

error de la serie truncada. Por otra parte, desde el punto de vista numérico, el tratamiento con ordenador del interpolante de Lagrange es mucho más fácil que la serie truncada.

Además de la distribución de puntos obtenida anteriormente, existen otras distribuciones de puntos Chebyshev con propiedades similares, que se indican a continuación:

$$\text{Chebyshev-Gauss} \quad x_j = \cos \left[\frac{(2j+1)\pi}{2N+2} \right], \quad j = 0, \dots, N,$$

$$\text{Chebyshev-Gauss-Radau} \quad x_j = \cos \left(\frac{j2\pi}{2N+1} \right), \quad j = 0, \dots, N,$$

$$\text{Chebyshev-Gauss-Lobatto} \quad x_j = \cos \left(\frac{j\pi}{N} \right), \quad j = 0, \dots, N.$$

A continuación, se describe el algoritmo de los puntos Chebyshev. Se parte del polinomio $\pi(x)$ de grado $N+1$ del error de interpolación:

$$\pi_{N+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_N).$$

1. Se buscan funciones con extremos iguales, tales como senos o cosenos.
2. A partir de una nueva variable θ , el polinomio π_{N+1} se puede expresar como un coseno de la variable θ en lugar de un coseno de la variable x .
3. A partir de la igualdad $x = \cos \theta$, se obtiene el polinomio:

$$\pi(x) = \epsilon \cos(N+1)\theta.$$

4. Se demuestra que $\cos(N+1)\theta$, con $x = \cos \theta$, es un polinomio de grado $N+1$.

$$N = 0, \quad \pi(x) = \epsilon \cos \theta = \epsilon x,$$

$$\begin{aligned} N = 1, \quad \pi(x) &= \epsilon \cos 2\theta = \epsilon (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) = \\ &= \epsilon (x^2 - (1 - x^2)) = \epsilon (2x^2 - 1), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N = 2, \quad \pi(x) &= \epsilon \cos 3\theta = \epsilon \cos(2\theta + \theta) = \\ &= \epsilon (\cos 2\theta \cos \theta - \sin 2\theta \sin \theta) = \\ &= \epsilon [(2x^2 - 1)x - 2x(1 - x^2)] = \epsilon (4x^3 - 3x), \end{aligned}$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots$$

5. Obsérvese que $N+1$ es el grado del polinomio π .

3.11. RELACIÓN ENTRE LA SERIE DISCRETA Y LA SERIE TRUNCADA 55

6. El coeficiente que multiplica al monomio x^{N+1} es 2^N .
7. Se iguala el coeficiente de x^{N+1} de $\pi(x)$ con el coeficiente de mayor grado de x^{N+1} de $\pi(\theta)$:

$$1 = \epsilon 2^N, \quad \epsilon = \frac{1}{2^N}.$$

8. Se obtienen los ceros de $\cos[(N+1)\theta]$:

$$\cos[(N+1)\theta] = 0, \quad (N+1)\theta_j = \frac{\pi}{2} + \pi j, \quad j = 0, \dots, N.$$

Obsérvese que para $j = 0$:

$$\theta_0 = \left(\frac{1}{N+1} \right) \frac{\pi}{2},$$

que es distinto de 0 y que para $j = N$:

$$\theta_N = \left(\frac{1}{N+1} \right) \left(\frac{\pi}{2} + \pi N \right),$$

que es distinto de π . Esto significa que $x = -1$ y $x = 1$ no están incluidos en estos ceros. Finalmente, los ceros de Chebyshev son:

$$x_j = \cos \left(\frac{\frac{\pi}{2} + \pi j}{N+1} \right), \quad j = 0, \dots, N.$$

9. Se determinan los extremos de Chebyshev:

$$\pi(\theta) = \epsilon \cos[(N+1)\theta],$$

$$\pi'(\theta) = -\epsilon (N+1) \sin[(N+1)\theta],$$

$$\sin[(N+1)\theta] = 0, \quad (N+1)\theta_j = \pi j, \quad \theta_j = \frac{\pi j}{N+1}, \quad j = 1, \dots, N.$$

Si $\pi_{N+1}(x)$ tiene $N+1$ ceros entonces $\pi_{N+1}(x)$ tiene N extremos, por tanto, el índice j va desde 1 hasta N . Estos extremos se completan con $x_0 = -1$ y $x_N = 1$. Finalmente, los puntos extremos de Chebyshev tienen la expresión siguiente:

$$y_j = \cos \left(\frac{\pi j}{N+1} \right), \quad j = 1, \dots, N.$$

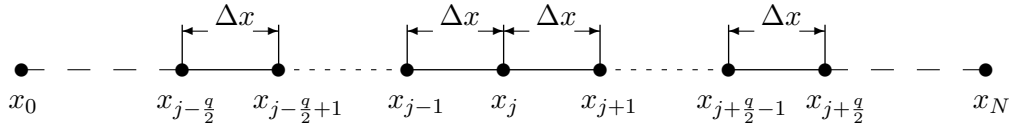


Figura 3.9: Molécula computacional centrada y equiespaciada

3.12. Interpolación continua a trozos equiespaciada

En las secciones anteriores se analizó el comportamiento del error cuando se emplean interpolaciones globales equiespaciadas y no equiespaciadas. En esta sección se estudia otra forma de interpolación denominada *interpolación equiespaciada continua a trozos* siendo esta la forma más empleada al momento de generar esquemas numéricos para la solución de ecuaciones diferenciales. Para este tipo de interpolación se estudia el comportamiento del error de interpolación a través de la función π .

Para describir la interpolación equiespaciada continua a trozos se consideran $N + 1$ puntos x_0, x_1, \dots, x_N del dominio de definición de una función f , equiespaciados a una distancia Δx . A continuación, se consideran $\frac{q}{2}$ puntos de interpolación por delante y por detrás de un punto genérico x_j , donde q es un número natural par. De esta forma se tienen $q + 1$ puntos de interpolación equiespaciados donde x_j es el punto medio. A esta configuración de puntos se le suele denominar molécula computacional centrada equiespaciada y se representa en la figura (3.9). Para el conjunto de $q + 1$ puntos de interpolación se puede construir un interpolante I_q de grado $\leq q$ y si se repite esta construcción a todo el dominio de interpolación, se tiene una interpolación continua a trozos. (Nota : decir qué ocurre con los puntos próximos a x_0 y x_N)

El error correspondiente a la interpolación polinómica a partir de los $q + 1$ puntos equiespaciados tiene la expresión siguiente:

$$R_q(x) = \pi_{q+1}(x) \frac{f^{(q+1)}(\xi)}{(q+1)!}, \quad (3.83)$$

donde $\pi_{q+1}(x)$ es:

$$\begin{aligned} \pi_{q+1}(x) = & (x - x_{j-\frac{q}{2}})(x - x_{j-\frac{q}{2}+1}) \cdots (x - x_{j-1})(x - x_j)(x - x_{j+1}) \cdots \\ & \cdots (x - x_{j+\frac{q}{2}-1})(x - x_{j+\frac{q}{2}}). \end{aligned} \quad (3.84)$$

Al igual que se hizo en la interpolación global, a continuación se busca una cota del error de interpolación continua a trozos a través de la función (3.84). Siguiendo el mismo desarrollo realizado en interpolación global equiespaciada, se puede llegar a una expresión equivalente a (3.50) que para la interpolación continua a trozos resulta:

$$|\pi_{q+1}(x)| \leq q! \frac{\Delta x^{q+1}}{4}. \quad (3.85)$$

Un detalle muy importante a tener en cuenta al momento de aplicar el resultado (3.50) para obtener (3.85) es que en ambos el valor de Δx se obtiene como:

$$\Delta x = \frac{x_N - x_0}{N}.$$

Obsérvese que en la expresión anterior el denominador es N y no q como podría esperarse en (3.85).

Si en la expresión (3.85) se considera el signo igual y se evalúa el logaritmo se tiene que:

$$\log |\pi_{q+1}(x)| = \log \left(\frac{q!}{4} \right) + (q+1) [\log (x_N - x_0) - \log N].$$

De forma esquemática, la figura (3.10) representa la expresión anterior e indica la convergencia de $|\pi_{q+1}(x)|$ con el número de puntos N en una interpolación continua a trozos equiespaciada.

A diferencia de lo que ocurre en la interpolación global equiespaciada, en la figura (3.10) puede observarse que $|\pi_{q+1}|$ varía linealmente con N y la pendiente es $q+1$.

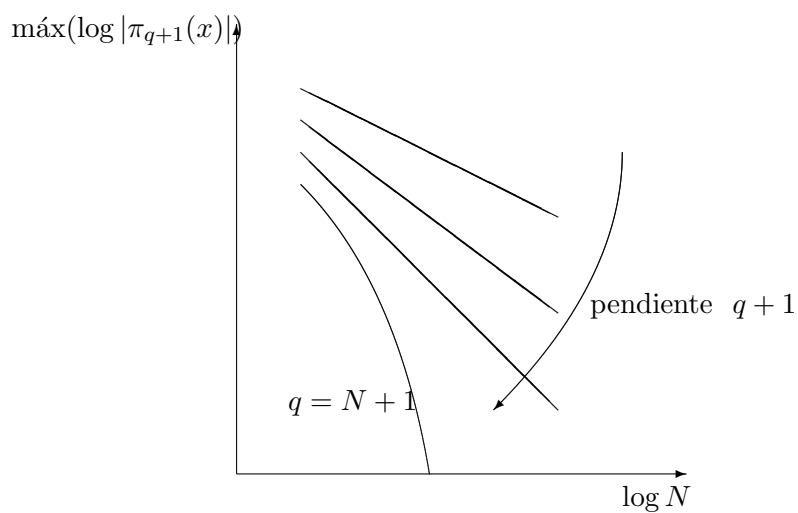


Figura 3.10: Convergencia de $|\pi_{q+1}(x)|$ en función de N para una interpolación continua a trozos equiespaciada

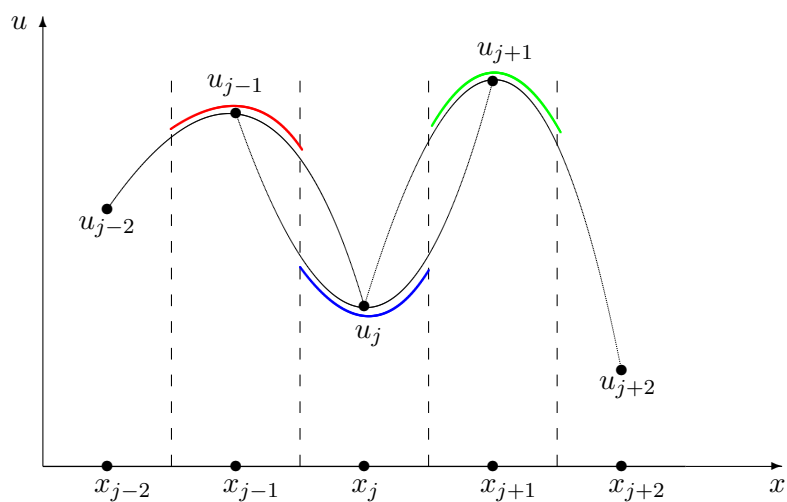


Figura 3.11: Interpolación continua a trozos

3.13. Interpolantes a trozos con $q + 1$ puntos

3.13.1. Fórmulas para la derivada primera y segunda

En este apartado, se obtienen las fórmulas de las derivadas primera y segunda para interpolantes a trozos contruidos a partir de $q + 1$ puntos. Las expresiones generales para estas derivadas son:

$$\frac{dI_q}{dx} = \sum_{j=0}^q f_j \ell'_j(x), \quad (3.86)$$

$$\frac{d^2 I_q}{dx^2} = \sum_{j=0}^q f_j \ell''_j(x). \quad (3.87)$$

Las expresiones anteriores evaluadas para valores $x_k \in \left(x_j - \frac{\Delta x_{j-1}}{2}, x_j + \frac{\Delta x_{j+1}}{2}\right)$ son:

$$\left(\frac{dI_q}{dx}\right)_{x_k} = \sum_{j=0}^q f_j \ell'_j(x_k), \quad (3.88)$$

$$\left(\frac{d^2 I_q}{dx^2}\right)_{x_k} = \sum_{j=0}^q f_j \ell''_j(x_k). \quad (3.89)$$

Obsérvese que tanto $\ell'_j(x_k)$ como $\ell''_j(x_k)$ son números y las expresiones (3.88) y (3.89) se conocen como las fórmulas de diferencias finitas para las derivadas primera y segunda.

3.13.2. Error de derivadas de polinomios interpolantes

A partir de la expresión del error de interpolación a trozos siguiente:

$$f(x) = I_q(x) + E_q(x), \quad (3.90)$$

el error del interpolante de grado $q + 1$ se puede calcular mediante la expresión siguiente:

$$E_q(x) = \pi_{q+1}(x) \frac{f^{(q+1)}(\xi)}{(q+1)!} + \sum_{j=0}^q \epsilon_j \ell_j(x). \quad (3.91)$$

La expresión (3.91) es válida para su dominio de definición correspondiente. Si se consideran $\frac{q}{2}$ puntos a derecha y $\frac{q}{2}$ puntos a izquierda, este interpolante es válido $\forall x \in \left(x_j - \frac{\Delta x_{j-1}}{2}, x_j + \frac{\Delta x_j}{2}\right)$. Obsérvese que la interpolación no es continua en $x = x_j - \frac{\Delta x_{j-1}}{2}$ y en $x_j + \frac{\Delta x_j}{2}$. En el caso de los contornos, el dominio de validez es mayor. Derivando la expresión (3.91) con respecto a x en los puntos del dominio de validez, se obtiene el error de la derivada primera;

$$E'_q(x) = \pi'_{q+1}(x) \frac{f^{(q+1)}(\xi)}{(q+1)!} + \pi_{q+1}(x) \frac{f^{(q+2)}(\xi)}{(q+1)!} \left(\frac{d\xi}{dx}\right) + \sum_{j=0}^q \epsilon_j \ell'_j(x). \quad (3.92)$$

y derivando nuevamente la expresión anterior con respecto a x , se obtiene el error de la derivada segunda:

$$\begin{aligned} E''_q(x) = & \pi''_{q+1}(x) \frac{f^{(q+1)}(\xi)}{(q+1)!} + 2 \pi'_{q+1}(x) \frac{f^{(q+2)}(\xi)}{(q+1)!} \left(\frac{d\xi}{dx}\right) + \\ & \pi_{q+1}(x) \left(\frac{f^{(q+2)}(\xi)}{(q+1)!} \left(\frac{d\xi}{dx}\right) \right)' + \sum_{j=0}^q \epsilon_j \ell''_j(x). \end{aligned} \quad (3.93)$$

En particular, las expresiones (3.91), (3.92) y (3.93) para los puntos *nodales* x_k , respectivamente quedan:

$$E_q(x_k) = \epsilon_k, \quad (3.94)$$

$$E'_q(x_k) = \pi'_{q+1}(x_k) \frac{f^{(q+1)}(\xi)}{(q+1)!} + \sum_{j=0}^q \epsilon_j \ell'_j(x_k), \quad (3.95)$$

$$E''_q(x_k) = \pi''_{q+1}(x_k) \frac{f^{(q+1)}(\xi)}{(q+1)!} + 2 \pi'_{q+1}(x_k) \frac{f^{(q+2)}(\xi)}{(q+1)!} \left(\frac{d\xi}{dx}\right) + \sum_{j=0}^q \epsilon_j \ell''_j(x_k). \quad (3.96)$$

En la figura (3.12) se representa esquemáticamente $\pi_{q+1}(x)$ y sus derivadas para q par y para q impar. Si q es par, el número de puntos de interpolación es $q+1$ impar y las moléculas computacionales para los puntos centrales pueden ser centradas. Si q es impar, el número de puntos de interpolación es $q+1$ par y no existe una molécula computacional centrada.

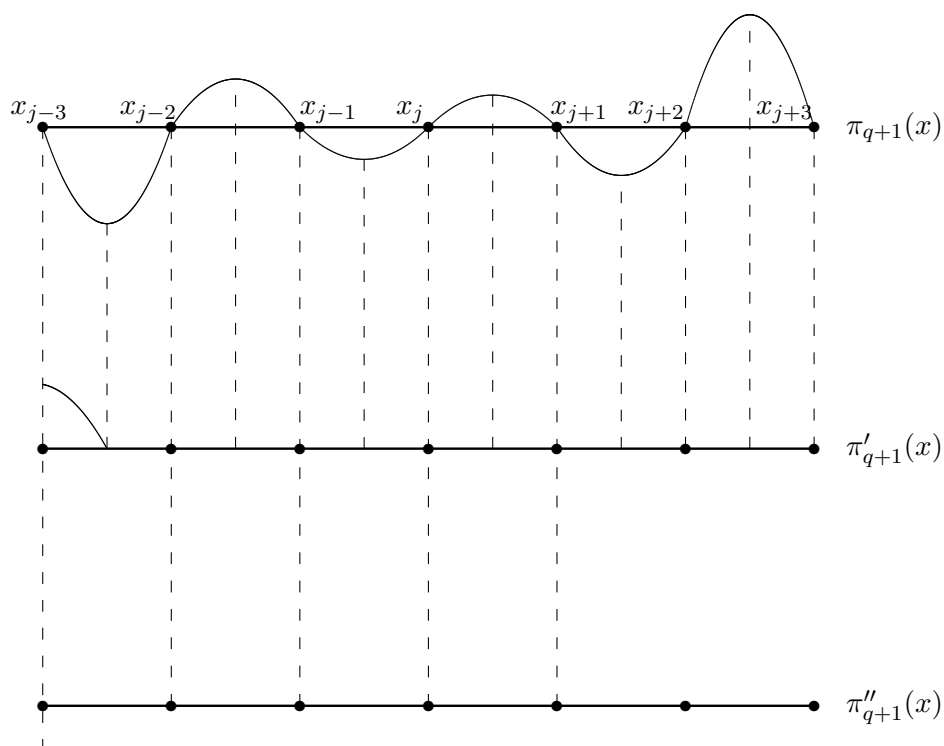


Figura 3.12: Representación de $\pi_{q+1}(x)$, $\pi'_{q+1}(x)$ y $\pi''_{q+1}(x)$ para $q = 6$

Es importante hacer notar que si q es par, $\pi''_{q+1}(x)$ se anula en el punto central y el término: $\pi''_{q+1}(x) \frac{f^{(q+1)}(\xi)}{(q+1)!}$ en la expresión del error (??) de la derivada segunda se hace cero, quedando la derivada primera y la derivada segunda con el mismo error. Por esta razón, siempre se elige q par cuando se interpola con polinomios continuos a trozos.

En los siguientes apartados se discutirá el error de la derivada primera y segunda para una interpolación continua a trozos basada en tres puntos ($q = 2$).

3.14. Fórmulas para derivadas con tres puntos

Se consideran tres puntos de interpolación no equiespaciados tal como se representa en la figura (3.13).

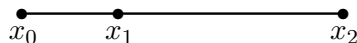


Figura 3.13: Tres puntos de interpolación no equiespaciados

Se construyen los polinomios de Lagrange;

$$\begin{aligned}\ell_0(x) &= \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}, \\ \ell_1(x) &= \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}, \\ \ell_2(x) &= \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}.\end{aligned}\tag{3.97}$$

Se calcula la derivada primera y segunda del interpolante:

$$I_2(x) = f_0 \ell_0(x) + f_1 \ell_1(x) + f_2 \ell_2(x),\tag{3.98}$$

$$\frac{dI_2}{dx}(x) = f_0 \ell'_0(x) + f_1 \ell'_1(x) + f_2 \ell'_2(x),\tag{3.99}$$

$$\frac{d^2 I_2}{dx^2}(x) = f_0 \ell_0''(x) + f_1 \ell_1''(x) + f_2 \ell_2''(x), \quad (3.100)$$

y se particulariza en $x = x_1$. Estas expresiones quedan:

$$\left(\frac{dI_2}{dx} \right)_{x=x_1} =, \quad (3.101)$$

$$\left(\frac{d^2 I_2}{dx^2} \right)_{x=x_1} = \frac{2 f_0}{(x_2 - x_0)(x_1 - x_0)} + \frac{2 f_1}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + \frac{2 f_2}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}. \quad (3.102)$$

Cuando (3.99) y (3.100) se particularizan en un extremo $x = x_0$, las expresiones quedan:

$$\left(\frac{dI_2}{dx} \right)_{x=x_0} =, \quad (3.103)$$

$$\left(\frac{d^2 I_2}{dx^2} \right)_{x=x_0} = . \quad (3.104)$$

Las fórmulas anteriores permiten aproximar las derivadas primera y segunda en un punto central o en un punto del contorno.

Cuando se considera una malla equiespaciada, las expresiones anteriores se reducen a las conocidas fórmulas siguientes (??):

$$\left(\frac{dI_2}{dx} \right)_{x=x_1} = \frac{f_2 - f_0}{2 \Delta x}, \quad (3.105)$$

$$\left(\frac{d^2 I_2}{dx^2} \right)_{x=x_1} = \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{\Delta x^2}, \quad (3.106)$$

$$\left(\frac{dI_2}{dx} \right)_{x=x_0} = \frac{1}{2\Delta x} (4f_0 - 3f_1 + f_2), \quad (3.107)$$

$$\left(\frac{d^2 I_2}{dx^2} \right)_{x=x_0} = \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{\Delta x^2}. \quad (3.108)$$

3.14.1. Error de truncamiento

A partir de tres puntos se construye un interpolante de grado ≤ 2 con el que se busca aproximar las derivadas primera y segunda de una función f . De lo estudiado en apartados anteriores, el error al aproximar las derivadas primera y segunda es:

$$R'_2(x) = \pi'_3(x) \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!} + \pi_3(x) \frac{f^{(4)}(\xi)}{3!} \left(\frac{d\xi}{dx} \right), \quad (3.109)$$

$$R''_2(x) = \pi''_3(x) \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!} + 2\pi'_3(x) \frac{f^{(4)}(\xi)}{3!} \left(\frac{d\xi}{dx} \right) + \pi_3(x) \frac{d}{dx} \left[\frac{f^{(4)}(\xi)}{3!} \left(\frac{d\xi}{dx} \right) \right]. \quad (3.110)$$

A continuación, se analiza el comportamiento de la función π_3 para entender cómo afecta la distribución de puntos en la expresión anterior. La función π_3 para este caso es:

$$\pi_3(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2), \quad (3.111)$$

y sus derivadas primera y segunda son:

$$\begin{aligned} \pi'_3(x) &= (x - x_0)(x - x_1) + (x - x_0)(x - x_2) + (x - x_1)(x - x_2), \\ \pi''_3(x) &= 6x - 2(x_0 + x_1 + x_2). \end{aligned} \quad (3.112)$$

La evaluación de $\pi_3(x)$ y sus derivadas en el punto de interpolación intermedio x_1 de la figura (??) es:

$$\pi(x_1) = 0,$$

$$\pi'(x_1) = (x_1 - x_0)(x_1 - x_2),$$

$$\pi''(x_1) = 6x_1 - 2x_0 - 2x_1 - 2x_2 = 2(x_1 - x_0 - x_2) = 4 \left[x_1 - \frac{1}{2}(x_0 + x_2) \right].$$

Si se define:

$$\Delta x_1 = x_1 - x_0, \quad \Delta x_2 = x_2 - x_1,$$

la derivadas primera y segunda de π en x_1 resultan:

$$\pi'_3(x_1) = -\Delta x_1 \Delta x_2,$$

$$\pi''_3(x_1) = \frac{4}{2} [\Delta x_1 - \Delta x_2],$$

y el error de aproximación de las derivadas primera y segunda en el punto x_1 es:

$$R'_2(x_1) = -\Delta x_1 \Delta x_2 \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}, \quad (3.113)$$

$$R''_2(x_1) = -2\Delta x_1 \Delta x_2 \frac{f^{(4)}(\xi)}{3!} \left(\frac{d\xi}{dx} \right) + 2(\Delta x_1 - \Delta x_2) \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}. \quad (3.114)$$

Si en lugar de una distribución de puntos de interpolación no equiespaciada, se elige una distribución equiespaciada con $\Delta x_1 = \Delta x_2 = \Delta x$, el error de aproximación de las derivadas primera y segunda es:

$$R'_2(x_1) = -\Delta x^2 \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}, \quad (3.115)$$

$$R''_2(x_1) = -2\Delta x^2 \frac{f^{(4)}(\xi)}{3!} \left(\frac{d\xi}{dx} \right). \quad (3.116)$$

Comparando las expresiones (3.114) y (3.116), se observa que para una distribución de puntos no equiespaciada, aparece el término adicional:

$$2(\Delta x_1 - \Delta x_2) \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!},$$

que tiene que ver con la regularidad de la malla. Por otra parte, el error de truncamiento de la derivada primera y de la derivada segunda son del mismo orden. En este caso q es par.

3.14.2. Error de redondeo

El error de redondeo está dado por:

$$L_3(x) = \sum_{j=0}^2 \epsilon_j \ell_j(x), \quad (3.117)$$

y los errores de redondeo de la derivadas primera y segunda son:

$$L'_3(x) = \sum_{j=0}^2 \epsilon_j \ell'_j(x), \quad (3.118)$$

$$L_3''(x) = \sum_{j=0}^2 \epsilon_j \ell_j''(x). \quad (3.119)$$

A continuación, se calculan los errores anteriores en el punto central $x = x_1$:

$$L_3'(x_1) = \epsilon_0 \ell_0'(x_1) + \epsilon_1 \ell_1'(x_1) + \epsilon_2 \ell_2'(x_1), \quad (3.120)$$

$$L_3''(x_1) = \epsilon_0 \ell_0''(x_1) + \epsilon_1 \ell_1''(x_1) + \epsilon_2 \ell_2''(x_1), \quad (3.121)$$

que coinciden con las fórmulas (3.101) y (3.102) de la derivada primera y de la derivada segunda cuando se sustituye (f_0, f_1, f_2) por $(\epsilon_0, \epsilon_1, \epsilon_2)$. En el caso de una malla equiespaciada, las expresiones (3.120) y (3.121) quedan:

$$L_3'(x_1) = \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{2 \Delta x}, \quad (3.122)$$

$$L_3''(x_1) = \frac{\epsilon_2 - 2\epsilon_1 + \epsilon_0}{\Delta x^2}, \quad (3.123)$$

$$L_3'(x_0) = \frac{1}{2 \Delta x} (4\epsilon_0 - 3\epsilon_1 + \epsilon_2), \quad (3.124)$$

$$L_3''(x_0) = \frac{\epsilon_2 - 2\epsilon_1 + \epsilon_0}{\Delta x^2}. \quad (3.125)$$

3.14.3. Error de interpolación: truncamiento y redondeo

Las expresiones para el error de truncamiento (3.115) (3.116) junto con las del error de redondeo (3.122) (3.123) permiten escribir:

$$E_2'(x_1) = -\Delta x^2 \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!} + \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{2 \Delta x}, \quad (3.126)$$

$$E_2''(x_1) = -2\Delta x^2 \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} \left(\frac{d\xi}{dx} \right) + \frac{\epsilon_2 - 2\epsilon_1 + \epsilon_0}{\Delta x^2}. \quad (3.127)$$

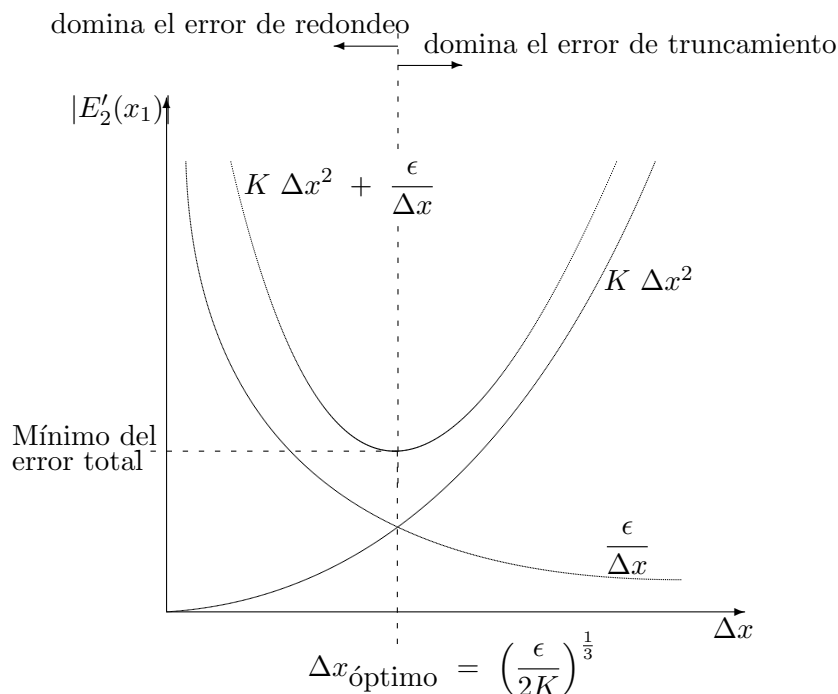


Figura 3.14: Error total de la derivada primera centrada y equiespaciada

Acotando las expresiones anteriores se tiene:

$$|E'_2(x_1)| \leq \Delta x^2 K_1 + \frac{2 \epsilon}{2 \Delta x}, \quad (3.128)$$

$$|E''_2(x_1)| \leq \frac{\Delta x^3}{3} K_2 + \frac{4 \epsilon}{\Delta x^2}, \quad (3.129)$$

donde $|f^{(3)}(\xi)| \leq K_1$, $\left| f^{(4)}(\xi) \left(\frac{d\xi}{dx} \right) \right| \leq K_2$ y $\epsilon = \max(\epsilon_0, \epsilon_1, \epsilon_2)$. Las expresiones (3.128) y (3.129) se representan en las figuras (3.14) y (3.15).

Para los dos casos se observa la presencia de un mínimo de error para un Δx óptimo. La razón reside en la importancia del error de redondeo frente al error de truncamiento.

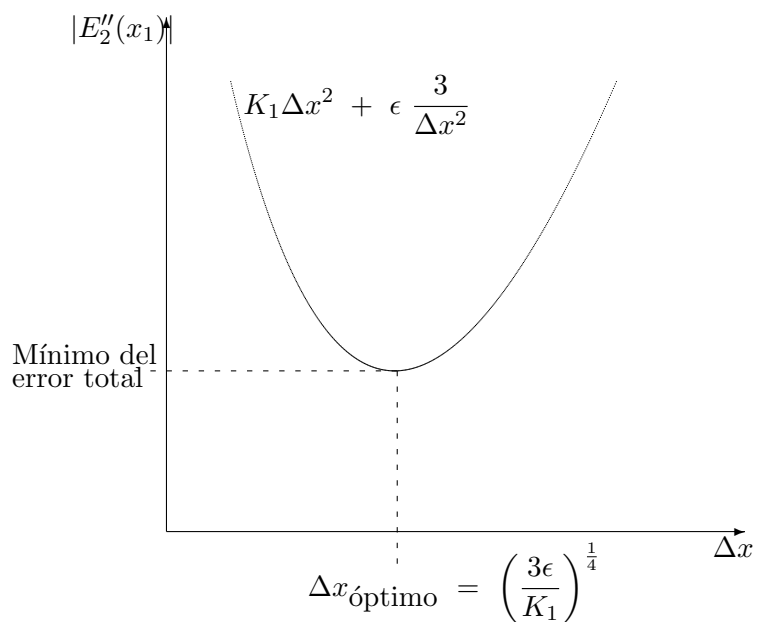


Figura 3.15: Error total de la derivada segunda centrada y equiespaciada

Para fijar ideas, si se trabaja en precisión simple $\epsilon = O(10^{-7})$, el error crece cuando $\Delta x < \left(\frac{\epsilon}{2K} \right)^{\frac{1}{3}}$ para la derivada primera. En el caso de la derivada segunda el Δx óptimo es $\left(\frac{3\epsilon}{K_1} \right)^{\frac{1}{4}}$.

CAPÍTULO

FOUR

PROBLEMA DE CONTORNO

En este capítulo se analizará por separado el problema de contorno en ecuaciones diferenciales ordinarias y el problema de contorno en ecuaciones en derivadas parciales.

Un problema de contorno se define por un operador diferencial $\mathcal{L}(u)$ y sus condiciones de contorno $BC(u) = 0$ siguientes:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(u) &= 0, \\ BC(u)|_{\partial\Omega} &= 0, \quad \forall x \in \Omega, \quad \Omega \subset \mathbb{R}^d,\end{aligned}\tag{4.1}$$

donde $\mathcal{L}(u)$ constituye una relación entre los valores de la función y sus derivadas. El orden de un problema diferencial es el mayor orden de las derivadas que involucra el operador $\mathcal{L}(u)$. Esta relación es válida en un dominio Ω . El problema de contorno se caracteriza por dar las condiciones que debe cumplir la solución general de (4.1) en el contorno del dominio Ω .

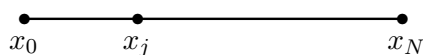
4.1. Ecuaciones diferenciales ordinarias

En particular, si el problema fuera unidimensional y la expresión $\mathcal{L}(u)$ fuera un operador escalar de segundo orden, se deben dar dos condiciones para determinar la solución, una en $x = x_0$ y la otra en $x = x_f$. Si el problema fuera de

orden superior a dos, el problema se puede reducir a un problema vectorial de segundo orden mediante la inclusión de una variable auxiliar. Generalmente, las leyes de conservación de la física en formulación primitiva constituyen sistemas de ecuaciones en derivadas parciales que involucran a lo sumo derivadas segundas de las magnitudes físicas.

A continuación, se expone el algoritmo para resolver un problema de contorno escalar en un dominio unidimensional:

1. Partición del dominio de integración mediante una malla equiespaciada o no equiespaciada.



2. Elegir el interpolante: global o continuo a trozos.
Si es global, estaremos frente a métodos espectrales y si es continua a trozos mediante diferencias finitas.
3. Calcular las expresiones para las derivadas primera y segunda. En general, las condiciones de contorno se representan por el operador $BC(u) = 0$ que involucra a la función y a su derivada primera. Estas condiciones o relaciones diferenciales se deben cumplir en el contorno de Ω . En el caso unidimensional el contorno de Ω es $x = x_0$ y $x = x_f$. En el caso de diferencias finitas se utilizan las fórmulas centradas o descentradas obtenidas en los capítulos anteriores. En el caso de interpolación global, se pueden obtener las fórmulas de las derivadas en el plano espectral o en el plano físico. Si el problema se resuelve en el plano físico, las incógnitas son los valores de la función en los puntos nodales mientras que si el problema se resuelve en el plano espectral, las incógnitas del problema son las amplitudes de los armónicos de la serie discreta.
4. Imponemos el cumplimiento del operador diferencial $\mathcal{L}(u) = 0$ en cada uno de los puntos interiores x_j , $j = 1, \dots, N - 1$.
5. Imponemos las condiciones de contorno $BC(u) = 0$ en $x = x_0$ y en $x = x_N$ mediante las fórmulas para las derivadas obtenidas en el paso 3.
6. Si el problema es escalar, el sistema anterior constituye un sistema de $N + 1$ ecuaciones con $N + 1$ incógnitas. Si la resolución se hace en el plano

físico, las incógnitas son los valores de la función en los puntos nodales u_j , $j = 0, \dots, N$. Por el contrario, si la resolución se hace en el plano espectral, las incógnitas son las amplitudes de los armónicos del desarrollo en serie:

$$I_N(x) = \sum_{k=0}^N \tilde{c}_k \phi_k(x), \quad \{\tilde{c}_k, \quad k = 0, \dots, N+1\}.$$

Dependiendo de la linealidad del operador diferencial y de la linealidad de las condiciones de contorno, el sistema resultante de las ecuaciones algebraicas puede ser lineal o no lineal.

7. El último punto pasa por resolver el sistema algebraico obtenido en el paso 6.

La figura (4.1) resume el algoritmo explicado anteriormente.

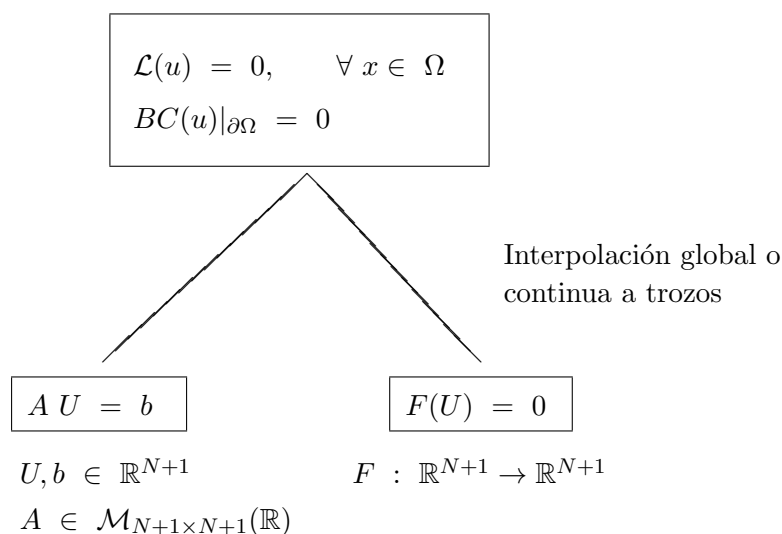


Figura 4.1: Esquema del algoritmo para la solución de un problema de contorno

A continuación, a modo de ejemplo, se presenta el siguiente problema de contorno:

$$\begin{aligned} u'' + \pi^2 u &= 0, \\ u(-1) &= 1, \\ u(+1) &= 1, \end{aligned} \tag{4.2}$$

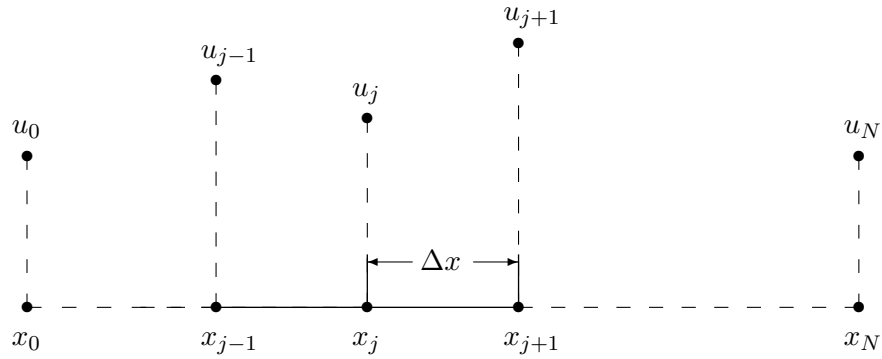


Figura 4.2: Partición de la malla espacial

donde la solución analítica es:

$$u(x) = \cos(\pi x). \quad (4.3)$$

Se plantea una partición espacial tal como se indica en la figura (4.2)

$$\frac{1}{\Delta x^2} (u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) + \pi^2 u_j = 0, \quad j = 1, \dots, N-1, \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} u_0 &= 1, \\ u_N &= 1. \end{aligned}$$

En forma vectorial:

$$A U = b, \quad (4.5)$$

donde,

$$U = \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ & -2 & \dots & 0 \\ & \vdots & & \\ 0 & \dots & & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

4.2. Dominios bidimensionales

Cuando el dominio de integración Ω es bidimensional o tridimensional, el operador diferencial $\mathcal{L}(u) = 0$ puede involucrar derivadas parciales en cada una de las direcciones del espacio. Desde el punto de vista conceptual, el problema de contorno es el mismo que en un dominio unidimensional salvo que en este caso es necesario calcular derivadas a lo largo de direcciones coordenadas diferentes. En el caso de que las direcciones coordenadas sean ortogonales, el problema se puede reducir al anterior (unidimensional) de forma muy simple:

$$I(x, y) = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^M f_{ij} \ell_{ij}(x, y), \quad (4.7)$$

donde,

$$\ell_{ij}(x, y) = \ell_i(x) \ell_j(y), \quad (4.8)$$

y donde,

$$\ell_i(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^N \frac{(x - x_k)}{(x_i - x_k)}, \quad \ell_j(y) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^M \frac{(y - y_k)}{(y_j - y_k)}. \quad (4.9)$$

La expresión (4.7) es un interpolante que satisface los puntos nodales (x_i, y_j) con los valores de la función $f(x_i, y_j)$ que se representan por f_{ij} .

$$\begin{aligned} &\{x_{i-\frac{q}{2}}, \dots, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+\frac{q}{2}}\}, \\ &\{y_{j-\frac{q}{2}}, \dots, y_{j-1}, y_j, y_{j+1}, \dots, y_{j+\frac{q}{2}}\}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

De esta forma se construye una partición equiespaciada o no equiespaciada del dominio Ω .

$$\begin{aligned} &\{x_i = a + (b - a) i / N_x, \quad i = 0, \dots, N_x\}, \\ &\{y_j = c + (d - c) j / N_y, \quad j = 0, \dots, N_y\}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

De igual forma que en el caso 1D, se fuerza al cumplimiento del operador diferencial en los puntos interiores o puntos de colocación:

$$\mathcal{L}(u)|_{x_i, y_j} = 0, \quad (4.12)$$

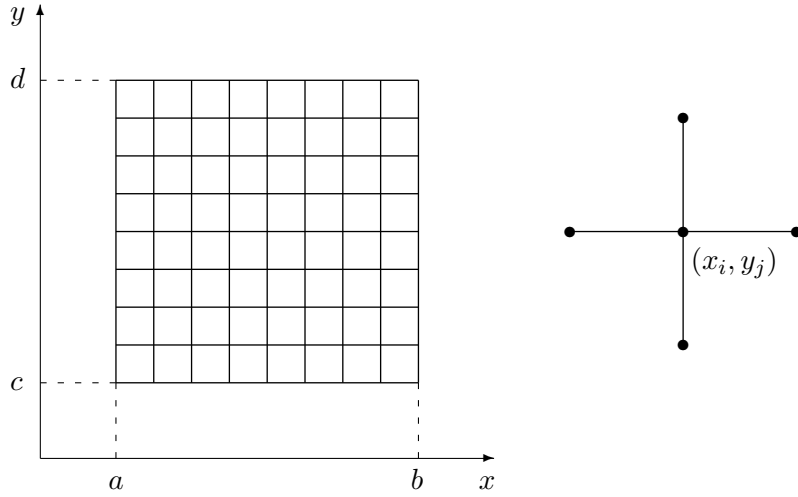


Figura 4.3: Partición equiespaciada en un dominio bidimensional

que constituyen un sistema de $(N_x - 1) \times (N_y - 1)$ ecuaciones que junto con las condiciones de contorno:

$$BC(u)|_{\partial\Omega} = 0, \quad (4.13)$$

que son $2(N_x - 1) + 2(N_y + 1) = 2N_x + 2N_y$ ecuaciones permiten obtener las $(N_x + 1)(N_y + 1)$ incógnitas de la función en los puntos nodales.

CAPÍTULO

FIVE

PROBLEMA DE CAUCHY EN EDO'S

Un problema de Cauchy en EDO's está formado por un conjunto de ecuaciones de evolución junto con una condición inicial $U(t_0)$.

$$\begin{aligned}\frac{dU}{dt} &= F(U; t), \quad U \in \mathbb{R}^N, \quad F : \mathbb{R}^N \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^N, \\ U(t_0) &= U^0, \quad \forall t \in [t_0, +\infty).\end{aligned}\tag{5.1}$$

En los problemas de Cauchy, la variable independiente suele ser el tiempo. La nomenclatura adoptada en esta sección es la siguiente:

Con el superíndice n indica la aproximación en el instante temporal t_n .

En los problemas de Cauchy o problemas de evolución se trata de obtener una aproximación para U^{n+1} en función de los valores anteriores de la variable dependiente $U(t)$ y de sus $F(U; t)$. Los métodos numéricos para la discretización temporal se pueden dividir en dos grandes grupos: (i) métodos unipaso y (ii) métodos multipaso. Mientras que los métodos multipaso utilizan un interpolante para $U(t)$ y para $F(U; t)$ basado en los puntos anteriores, los métodos unipaso utilizan la evaluación de $F(U; t)$ en etapas intermedias entre t_n y t_{n+1} .

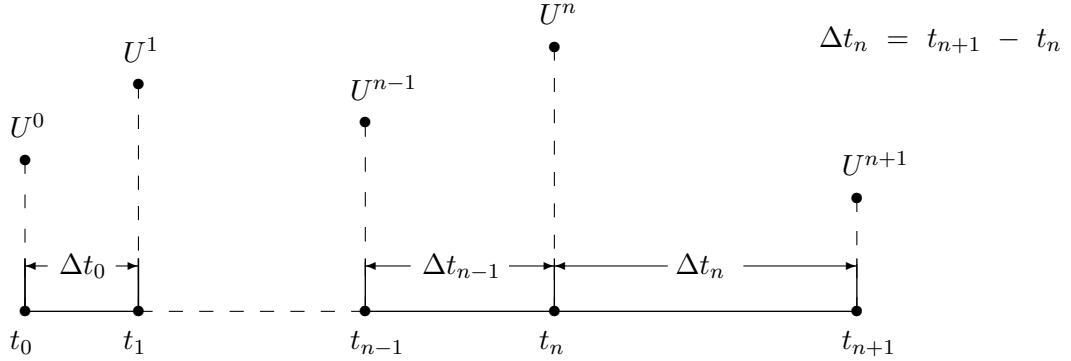


Figura 5.1: Partición de la malla temporal

5.1. Métodos multipaso. Métodos Adams

Integrando la ecuación diferencial de (5.1) entre t_n y t_{n+1} se tiene:

$$U(t_{n+1}) = U(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} F(U; t) dt. \quad (5.2)$$

Cuando $F(U; t)$ se aproxima por un polinomio interpolante basado en $F^{n+1}, F^n, F^{n-1}, \dots, F^{n+1-p}$, se tiene:

$$I_p(t) = \sum_{j=0}^p F^{n+1-j} \ell_j(t), \quad \ell_j(t) = \prod_{\substack{k=t_{n+1}-p \\ k \neq j}}^{k=t_{n+1}} \frac{(t - t_k)}{(t_j - t_k)}. \quad (5.3)$$

Los esquemas resultantes o esquemas de Adams quedan:

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t_n \sum_{j=0}^p \beta_j F^{n+1-j}, \quad (5.4)$$

donde los valores β_j son números que se obtienen al integrar el interpolante de $F(U; t)$ segun las expresiones siguientes:

$$\beta_j = \frac{1}{\Delta t_n} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \ell_j(t) dt. \quad (5.5)$$

A continuación, se expone el algoritmo para resolver un problema de Cauchy mediante métodos Adams:

1. Conocida la condición inicial U^0 se determina U^1 mediante un método unipaso. Para poder usar la relación de recurrencia (5.4) se necesitan p condiciones iniciales. Las $p-1$ extra condiciones iniciales se deben determinar en el arranque de estos métodos con otros esquemas unipaso o con esquemas de menor número de pasos.
2. Se plantea la relación de recurrencia (5.4) para obtener U^{n+1} .
- 3.

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t_n (\beta_0 F^{n+1} + \dots + \beta_p F^{n+1-p}), \quad n = p, p+1, \dots \quad (5.6)$$

Nótese que en la ecuación (5.6), U^n, U^{n-1}, \dots, U^0 y F^n, F^{n-1}, \dots, F^0 son valores conocidos de pasos anteriores.

De esta forma, la ecuación (??) es un sistema de ecuaciones que involucra U^{n+1} . Si $U^{n+1} \in \mathbb{R}^N$, el sistema anterior es un sistema lineal o no lineal de N ecuaciones de la forma:

$$F(U^{n+1}) = U^{n+1} - \Delta t_n \beta_0 F^{n+1} c, \quad (5.7)$$

con c conocido a través de los pasos anteriores. Si β_0 fuera cero, el sistema se resuelve directamente:

$$U^{n+1} = c, \quad (5.8)$$

y se dice que el sistema es explícito. Si β_0 es distinto de cero, el esquema es implícito. Ejemplo: el esquema Euler

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t F^n. \quad (5.9)$$

5.2. Métodos unipaso. Métodos Runge Kutta

Los métodos Runge-Kutta se basan en evaluar etapas intermedias entre t_n y t_{n+1} . Aunque son más robustos que los métodos multipaso exigen, en general, más carga computacional. La expresión general de un esquema Runge-Kutta es:

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t_n \sum_{i=1}^e b_i k_i, \quad (5.10)$$

$$k_i = F \left(U^n + \Delta t \sum_{j=1}^e a_{ij} k_j; t_n + c_i \Delta t_n \right),$$

donde b_i, c_i y a_{ij} son coeficientes del esquema dados y e es el número de evaluaciones t_n y t_{n+1} .

Ejemplo : Runge-Kutta de dos etapas

$$\begin{aligned} U^{n+1} &= U^n + \Delta t_n (b_1 k_1 + b_2 k_2), \\ k_1 &= F(U^n + \Delta t (a_{11}k_1 + a_{12}k_2); t_n + c_1 \Delta t_n), \\ k_2 &= F(U^n + \Delta t (a_{21}k_1 + a_{22}k_2); t_n + c_2 \Delta t_n). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Si $a_{11} = 0$, $a_{12} = 0$ y $a_{22} = 0$, el esquema es explícito:

$$\begin{aligned} k_1 &= F(U^n + \Delta t \cdot 0; t_n + c_1 \Delta t_n), \\ k_2 &= F(U^n + \Delta t a_{21}k_1; t_n + c_2 \Delta t_n). \end{aligned} \quad (5.12)$$

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t_n b_1 F^n + b_2 F(U^n + \Delta t a_{21} F^n; t_n + c_2 \Delta t_n). \quad (5.13)$$

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t_n \frac{1}{2} [F(U^n) + F(U^n + \Delta t F^n)]. \quad (5.14)$$

5.3. Error local de truncación

Se define el error local de truncación como el error que deja la solución exacta cuando se introduce en el esquema numérico.

Métodos lineales multipaso:

$$T^{n+1} = U(t_{n+1}) - U(t_n) - \Delta t_n \sum_{j=0}^p \beta_j F(U(t_{n+1-j}); t_{n+1-j}). \quad (5.15)$$

Se dice que un esquema es consistente si:

$$\lim_{\Delta t_n \rightarrow 0} \left(\frac{T^{n+1}}{\Delta t_n} \right) = 0. \quad (5.16)$$

Se dice que un esquema es de orden q cuando su error local de truncación es $O(\Delta t^{q+1})$.

CAPÍTULO

SIX

PROBLEMAS DE CONDICIONES INICIALES Y DE
CONTORNO

Sea el siguiente problema de condiciones iniciales y de contorno:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}(u; t), \quad u : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad \Omega \subset \mathbb{R}^3,$$

$$BC(u)|_{\partial\Omega} = 0,$$

$$u(x, 0) = f(x),$$

Como ejemplos representativos de este tipo de problemas se encuentra la ecuación del calor que tiene carácter parabólico y la ecuación de ondas que tiene carácter hiperbólico.

6.1. Discretización espacial y temporal

El operador $\mathcal{L}(u; t)$ es un operador diferencial que actúa sobre la variable $u(x, t)$ e incluye todas las variaciones espaciales de $u(x, t)$. Para abordar la integración de este tipo de problemas se utilizará el denominado método de las líneas que consiste en discretizar espacialmente el problema (1) para obtener un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias. Posteriormente, mediante la discretización temporal o mediante el uso de los esquemas estudiados para la solución numérica del problema de Cauchy en EDO's, se reduce el sistema de EDO's a un sistema de ecuaciones en diferencias que evoluciona en el tiempo.

Es importante hacer notar que al discretizar las condiciones de contorno, su influencia queda reflejada en las componentes de $F(U; t)$.

A continuación, se explica el proceso anterior mediante el ejemplo de la ecuación del calor con diferentes condiciones de contorno.

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & \text{en un dominio } x \in [0, 1], \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(0,t)} &= 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{(1,t)} &= 0, \\ u(x, 0) &= f(x). \end{aligned} \tag{6.1}$$

Algoritmo:

1. Se procede a hacer una partición del intervalo $[0, 1]$:
2. Se impone la ecuación en derivadas parciales en el punto genérico x_j :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_{x_j} = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{x_j}. \tag{6.2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}(u; t), \quad u : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad \Omega \subset \mathbb{R}^3,$$

$$BC(u)|_{\partial\Omega} = 0,$$

$$u(x, 0) = f(x).$$

discretización espacial

$$\frac{dU}{dt} = F(U; t),$$

$$U(0) = U^0.$$

discretización temporal

$$U^{n+1} = G(U^n, U^{n-1}, \dots),$$

$$U^0 \text{ dado.}$$

$$\begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ x_0 \quad x_j \quad x_N \end{array}$$

82 CAPÍTULO 6. PROBLEMAS DE CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO

3. Se utiliza un interpolante para $u(x, t)$ basado en nodos vecinos y se calculan las fórmulas aproximadas para las derivadas.
4. Se plantea el sistema de EDO's resultante una vez realizada la semidiscretización espacial para los puntos interiores:

$$\frac{du_j}{dt} = \frac{1}{\Delta x^2} (u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}), \quad j = 1, \dots, N-1. \quad (6.3)$$

5. Se discretizan las condiciones de contorno:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{1}{2\Delta x} (-3u_0 + 4u_1 - u_2), \quad (6.4)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=1} = \frac{1}{2\Delta x} (3u_N - 4u_{N-1} + u_{N-2}), \quad (6.5)$$

y se obtienen los puntos del contorno en función de los puntos interiores:

$$u_0 = \frac{1}{3} (4u_1 - u_2), \quad (6.6)$$

$$u_N = \frac{1}{3} (4u_{N-1} - u_{N-2}). \quad (6.7)$$

6. Se realiza la discretización temporal del sistema (6.3) mediante un esquema temporal. En este caso se utilizará un esquema Euler:

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n), \quad j = 1, \dots, N-1, \quad n = 0, \dots \\ u_0 &= \frac{1}{3} (4u_1^n - u_2^n), \\ u_N &= \frac{1}{3} (4u_{N-1}^n - u_{N-2}^n), \\ u_j^0 &= f(x_j), \quad j = 0, \dots, N. \end{aligned} \quad (6.8)$$

En el caso de la ecuación de ondas, el problema pasa por reducir inicialmente la ecuación de ondas a una ecuación de primer orden en el tiempo mediante un

cambio de variables.

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & \text{en un dominio } x \in [0, 1], \\ u(0, t) &= 0, \\ u(1, t) &= 0, \\ u(x, 0) &= f(x).\end{aligned}\tag{6.9}$$

Se realiza el cambio de variable $w = \frac{\partial u}{\partial t}$ y el sistema resultante de la ecuación de ondas queda:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} u \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \end{pmatrix}.\tag{6.10}$$

Se discretiza espacialmente para obtener el sistema EDO's.

$$\begin{pmatrix} \frac{du_j}{dt} \\ \frac{dw_j}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_j \\ \frac{1}{\Delta x^2} (u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} u_0 \\ w_0 \\ u_1 \\ w_1 \\ \vdots \\ u_N \\ w_N \end{pmatrix}.\tag{6.11}$$

6.2. Error espacial y error temporal

Cuando un problema se discretiza temporal y espacialmente aparecen dos tipos de problemas de errores: (i) el asociado a la aproximación de las derivadas en el espacio y (ii) el asociado a la aproximación de las derivadas en el tiempo o la integración temporal.

Si se define como $u(x_i, t)$ el valor exacto de la solución en el nodo o punto de la malla x_i y $u_i(t)$ el valor aproximado que tiene la solución una vez realizada la discretización espacial,

$$e_i = u(x_i, t) - u_i(t),\tag{6.12}$$

84 CAPÍTULO 6. PROBLEMAS DE CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO

es el error espacial cometido en el punto x_i . $u_i(t)$ representa el valor exacto de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Por otra parte, si u_i^n representa el valor aproximado que toma la solución en un punto de la malla x_i y en un instante $t = t_n$, el error de la discretización temporal y de la discretización espacial se define como:

$$E_{T_i} = u(x_i, t_n) - u_i^n, \quad (6.13)$$

que se puede poner como:

$$E_{T_i} = \underbrace{u(x_i, t_n) - u_i(t_n)}_{E_i(t_n)} + \underbrace{u_i(t_n) - u_i^n}_{E_i^n}, \quad (6.14)$$

o en notación vectorial:

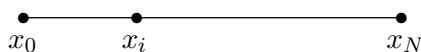
$$E_T = E + E^n. \quad (6.15)$$

A continuación, se pasa a analizar el comportamiento del error espacial E y del error temporal E^n .

Sea el problema del calor con un dominio 1D y se considera una discretización espacial mediante diferencias finitas centradas con tres puntos y la discretización temporal se hace con un esquema Euler.

1.

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \\ u(x_0, t) &= 1, \\ u(x_N, t) &= 1, \\ u(x, 0) &= f(x). \end{aligned} \quad (6.16)$$



2.

$$\begin{aligned} \frac{du_i}{dt} &= \frac{1}{\Delta x^2} (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}), \quad i = 1, \dots, N-1 \\ \text{con } u_0 &= 1, \quad u_N = 1. \end{aligned} \quad (6.17)$$

3.

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n), \quad i = 1, \dots, N-1, \quad n = 0, \dots$$

con $u_0^n = 1, \quad u_N^n = 1.$

(6.18)

6.3. Error de la semidiscretización espacial

Primero se calcula el error de la semidiscretización espacial restando (6.16) en los nodos de la malla menos (6.17).

$$\frac{d}{dt} [u(x_i, t) - u_i] = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i} - \frac{1}{\Delta x^2} [u_{i+1}(t) - 2u_i(t) + u_{i-1}(t)]. \quad (6.19)$$

Se suma y resta el operador discreto aplicado a la solución exacta.

$$\begin{aligned} \frac{dE_i}{dt} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i} - \frac{1}{\Delta x^2} [u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}] + \\ &\quad \frac{1}{\Delta x^2} [u(x_{i+1}, t) - 2u(x_i, t) + u(x_{i-1}, t)] - \\ &\quad \frac{1}{\Delta x^2} [u(x_{i+1}, t) - 2u(x_i, t) + u(x_{i-1}, t)]. \end{aligned} \quad (6.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{dE_i}{dt} &= \frac{1}{\Delta x^2} [E_{i+1} - 2E_i + E_{i-1}] + \\ &\quad \underbrace{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i} - \frac{1}{\Delta x^2} [u(x_{i+1}, t) - 2u(x_i, t) + u(x_{i-1}, t)]}_{R_i \text{ error de truncamiento de la derivada segunda}}. \end{aligned} \quad (6.21)$$

En notación vectorial, la expresión anterior queda:

$$\frac{dE}{dt} = AE + R. \quad (6.22)$$

Integrando esta expresión se tiene:

$$E(t) = e^{At} E(0) + \int_0^t e^{A(t-\tau)} R(\tau) d\tau. \quad (6.23)$$

86 CAPÍTULO 6. PROBLEMAS DE CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO

La acotación de la expresión anterior resulta:

$$\|E\| \leq \|e^{At}\| \|E(0)\| + \sup_{t \in [0, t_f]} \|R\| \left| \int_0^t \|e^{A(t-\tau)}\| d\tau \right|. \quad (6.24)$$

Si la matriz A es normal $AA^T = A^T A$, entonces existe un conjunto de autovectores ortogonales que diagonaliza la matriz A y

$$\|e^{At}\| = e^{\alpha(A)t}, \quad (6.25)$$

donde $\alpha(A)$ es la abscisa espectral de A y es:

$$\alpha(A) = \sup_{z \in \Lambda(A)} \operatorname{Re}(z), \quad (6.26)$$

donde $\Lambda(A)$ es el espectro o conjunto de todos los autovalores de A .

$$\int_0^t \|e^{A(t-\tau)}\| d\tau = \int_0^t e^{\alpha(t-\tau)} d\tau = \left. \frac{e^{\alpha(t-\tau)}}{-\alpha} \right|_0^t = \mp \frac{1}{\alpha} (1 - e^{\alpha t}). \quad (6.27)$$

Finalmente, la acotación del error de la semidiscretización espacial es:

$$\|E\| \leq e^{\alpha t} \|E(0)\| + \frac{1}{\alpha} (e^{\alpha t} - 1) \sup_{t \in [0, t_f]} \|R\|. \quad (6.28)$$

Si $\alpha < 0$, el error de las condiciones iniciales tiende a cero con $t \rightarrow \infty$ y el error espacial está acotado por el orden del error de la discretización espacial:

$$\|E\| \leq \frac{1}{\alpha} (e^{\alpha t} - 1) \sup_{t \in [0, t_f]} \|R\|. \quad (6.29)$$

Si $\alpha > 0$, cualquier error que se cometa en las condiciones iniciales, por pequeño que sea, se amplifica exponencialmente con $t \rightarrow \infty$, enmascarando cualquier error de truncamiento.

Por esta razón es importante asegurar que la discretización espacial no cambia el carácter de estabilidad del problema diferencial. Generalmente, cuando se discretiza la ecuación de ondas que tiene autovalores imaginarios puros, mediante esquemas centrados de diferencias finitas de alto orden en mallas equiespaciadas, se obtienen autovalores que tienen parte real mayor que cero. Estos esquemas o fórmulas de diferencias finitas no son válidas para realizar la discretización espacial. Esta problemática está asociada al mal comportamiento de los interpolantes de alto orden en los contornos cuando la malla es equiespaciada. Este problema se suele resolver concentrando puntos en los contornos como lo hacen los métodos de Chebyshev.

6.4. Error de la discretización temporal

A continuación se calcula el error de la discretización temporal utilizando (6.17) y (6.18) en forma vectorial:

$$\frac{dU}{dt} = AU + b, \quad U = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} \frac{1}{\Delta x^2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{1}{\Delta x^2} \end{pmatrix}. \quad (6.30)$$

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t (AU^n + b) = \underbrace{(I + \Delta t A)}_B U^n + \Delta t b. \quad (6.31)$$

Se define el error de truncamiento del esquema para la discretización temporal como el residuo que deja la solución exacta cuando se introduce en el esquema numérico.

$$T^{n+1} = U(t_{n+1}) - U(t_n) - B U(t_n) - \Delta t b. \quad (6.32)$$

Restando (6.32) menos (6.31) se tiene:

$$\begin{cases} U(t_{n+1}) - U(t_n) - \Delta t A U(t_n) - \Delta t b = T^{n+1}, \\ - \\ U^{n+1} - U^n - \Delta t A U^n - \Delta t b = 0, \end{cases} \quad (6.33)$$

$$E^{n+1} - E^n - \Delta t A E^n = T^{n+1}, \quad (6.34)$$

$$E^{n+1} = E^n + \Delta t A E^n + T^{n+1}, \quad (6.35)$$

$$E^{n+1} = \underbrace{(I + \Delta t A)}_B E^n + T^{n+1}. \quad (6.36)$$

88 CAPÍTULO 6. PROBLEMAS DE CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO

La solución de la ecuación anterior es:

$$E^n = B^n E^0 + \sum_{k=1}^n B^{n-k} T^k. \quad (6.37)$$

La acotación del error anterior es:

$$\|E^n\| \leq \|B^n\| \|E^0\| + \sup_{k \in [1, n]} \|T^k\| \sum_{k=1}^n \|B^{n-k}\|. \quad (6.38)$$

Si B es normal, $BB^T = B^T B$, existe un conjunto ortonormal de autovalores que diagonaliza B y la norma:

$$\|B^n\| = \rho^n, \quad \text{con} \quad \rho = \sup_{z \in \Lambda(B)} |z|, \quad (6.39)$$

donde ρ representa el radio espectral de B y $\Lambda(B)$ es el conjunto de todos los autovalores de B . De esta forma:

$$\sum_{k=1}^n \|B^{n-k}\| = \sum_{k=1}^n \rho^{n-k}. \quad (6.40)$$

$$\sum_{k=1}^n \|B^{n-k}\| = \rho^n + \rho^{n-1} + \rho^{n-2} + \dots + 1 = \frac{1 - \rho^{n+1}}{1 - \rho}. \quad (6.41)$$

$$\left. \begin{aligned} S_n &= 1 + \rho + \dots + \rho^n \\ \rho S_n &= \rho + \dots + \rho^{n+1} \end{aligned} \right\} S_n (1 - \rho) = 1 - \rho^{n+1}. \quad (6.42)$$

Finalmente, la acotación del error temporal resulta:

$$\|E^n\| \leq \rho^n \|E^0\| + \sup_{k \in [1, n]} \|T^k\| \left| \frac{1 - \rho^{n+1}}{1 - \rho} \right|. \quad (6.43)$$

Si $\rho < 1$ el error de las condiciones iniciales tiende a cero con $t \rightarrow \infty$ y el error temporal está acotado por el error de truncamiento de la discretización temporal:

$$\|E^n\| \leq \frac{1}{1 - \rho} \sup_{k \in [1, n]} \|T^k\|. \quad (6.44)$$

Si $\rho > 1$, cualquier error por pequeño que sea en las condiciones iniciales se amplifica potencialmente con $t \rightarrow \infty$ enmascarando cualquier error de truncamiento.

La pregunta que surge ahora es determinar en qué situaciones ρ es menor que uno. Para poder analizar los autovalores de B en función de los autovalores de A y poder calcular el radio espectral se utiliza el teorema de transformación espectral.

Definición : El polinomio característico de estabilidad de un método lineal multipaso se define mediante:

$$\pi(r, \omega) = \sum_{j=0}^p (\alpha_j - \omega \beta_j) r^{p-j}. \quad (6.45)$$

Definición : El polinomio característico de estabilidad de un método lineal unipaso se define mediante:

$$\pi(r, \omega) = r - 1 - \omega. \quad (6.46)$$

El teorema de transformación espectral dice que si $\lambda \Delta \in \Lambda(\Delta t A)$ entonces cada raíz del polinomio característico de estabilidad con $\omega = \Delta t \lambda$ pertenece al espectro de B .

Definición : La región de estabilidad absoluta Re_A de un esquema numérico es el conjunto de números $\omega \in \mathbb{C}$ para los cuales todas las raíces del polinomio característico de estabilidad satisfacen que su módulo es menor o igual a la unidad y aquellas que tienen módulo igual a la unidad son simples.

Por lo tanto, si $\Delta t \lambda$ está dentro de Re_A , entonces el autovalor $r \in \Lambda(B)$ tiene módulo menor que la unidad y el error temporal está acotado.

6.5. Cálculo de la abscisa espectral

Se considera la ecuación del calor en un dominio unidimensional con condiciones de contorno tipo Dirichlet discretizada espacialmente con un esquema de diferencias finitas centradas de segundo orden y en el tiempo con un esquema Euler. La matriz del sistema semidiscretizado con FD2 es normal por lo que se pueden calcular los autovalores.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x^2} (u_{j+1} - 2u_j - u_{j-1}) &= \lambda u_j, \quad j = 1, \dots, N-1, \\ u_0 &= 0, \\ u_N &= 0. \end{aligned} \tag{6.47}$$

Existen soluciones de la forma $u_j = \sin(k\pi x_j)$ que son los autovectores del sistema. A continuación se comprueban dichas soluciones y se calculan los autovalores correspondientes.

$$\sin(k\pi x_j + k\pi\Delta x) - 2\sin(k\pi x_j) + \sin(k\pi x_j - k\pi\Delta x) = \lambda \sin(k\pi x_j) \Delta x^2, \tag{6.48}$$

$$\begin{aligned} \sin(k\pi x_j) \cos(k\pi\Delta x) + \cos(k\pi x_j) \sin(k\pi\Delta x) - 2\sin(k\pi x_j) + \\ \sin(k\pi x_j) \cos(k\pi\Delta x) - \cos(k\pi x_j) \sin(k\pi\Delta x) &= \lambda \sin(k\pi x_j) \Delta x^2, \end{aligned} \tag{6.49}$$

$$2\sin(k\pi x_j) [\cos(k\pi\Delta x) - 1] = \lambda_k \sin(k\pi x_j), \tag{6.50}$$

$$\lambda_k = -\frac{2}{\Delta x^2} [1 - \cos(k\pi\Delta x)] = -\frac{4}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k\pi\Delta x}{2}\right), \quad k = 1, \dots, N-1. \tag{6.51}$$

En este caso, la abscisa espectral es:

$$\alpha = \sup_{\lambda \in \Lambda(A)} \operatorname{Re}(\lambda) = -\frac{4}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{\pi\Delta x}{2}\right) \approx -\frac{4}{\Delta x^2} \frac{\pi^2 \Delta x^2}{4} = -\pi^2. \tag{6.52}$$

La acotación del error de semidiscretización espacial es:

$$\|E(t)\| \leq e^{-\pi^2 t} \|E(0)\| + \left(-\frac{1}{\pi^2}\right) (e^{-\pi^2 t} - 1) \sup_{\forall \tau} \|R\|. \tag{6.53}$$

$$\|E(t)\| \leq e^{-\pi^2 t} \|E(0)\| + \frac{1}{\pi^2} \left(1 - e^{-\pi^2 t}\right) \sup_{\forall \tau} \|R\|. \quad (6.54)$$

$$\|E(t)\| \leq e^{-\pi^2 t} \|E(0)\| + \frac{1}{\pi^2} \left(1 - e^{-\pi^2 t}\right) \sup_{\forall \tau} \|R\|. \quad (6.55)$$

A continuación se calcula el error de truncamiento R mediante su definición.

$$R_j = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{x_j} - \frac{1}{\Delta x^2} [u(x_{j+1}, t) - 2u(x_j, t) + u(x_{j-1}, t)]. \quad (6.56)$$

El resultado de la expresión anterior se puede obtener a partir de la teoría de derivación de interpolantes con tres puntos en mallas equiespaciadas:

$$R_j = -2\Delta x^2 \frac{u^{(4)}(\xi)}{3!} \left(\frac{d\xi}{dx} \right), \quad (6.57)$$

y su acotación es:

$$\|R\| \leq k\Delta x^2. \quad (6.58)$$

De esta forma,

$$\|E(t)\| \leq e^{-\pi^2 t} \|E(0)\| + \frac{1}{\pi^2} \left(1 - e^{-\pi^2 t}\right) \Delta x^2 k. \quad (6.59)$$

Se observa que el error en las condiciones iniciales decrece con el tiempo y el error espacial crece con el tiempo y permanece acotado por algo $O(\Delta x^2)$. Se dice que un esquema espacial es de orden q cuando su error de truncamiento es $O(\Delta x^q)$.

6.6. Cálculo del radio espectral

La expresión:

$$U^{n+1} = B U^n + b \Delta t, \quad (6.60)$$

es la ecuación en diferencias que permite obtener la solución numérica con la matriz B como:

$$B = (I + \Delta t A), \quad (6.61)$$

cuando se discretiza temporalmente mediante un esquema Euler. La ecuación del error temporal es:

$$E^{n+1} = B E^n + T^{n+1}, \quad (6.62)$$

y su solución es:

$$E^n = B^n E^0 + \sum_{k=1}^n B^{n-k} T^k. \quad (6.63)$$

92 CAPÍTULO 6. PROBLEMAS DE CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO

La acotación de la expresión anterior es:

$$\|E^n\| \leq \rho^n \|E^0\| + \sup_{k \in [1, n]} \|T^k\| \left(\frac{1 - \rho^n}{1 - \rho} \right), \quad (6.64)$$

donde:

$$\rho = \sup_{r \in \Lambda(B)} |r|. \quad (6.65)$$

Para calcular el radio espectral, se deben calcular los autovalores de B a partir de los autovalores de A :

$$\begin{aligned} (I + \Delta t A) v &= r v, \\ A v &= \lambda v, \\ I v + \Delta t A v &= r v, \\ (I + \Delta t \lambda I) v &= r v, \end{aligned} \quad (6.66)$$

por lo que:

$$r = 1 + \lambda \Delta t. \quad (6.67)$$

En este caso particular, la obtención de los autovalores de B es muy sencilla. En otros esquemas numéricos más complicados, los autovalores de B se calculan mediante el teorema de transformación espectral y el polinomio característico de estabilidad:

$$\pi(r, \omega) = r - \omega - 1. \quad (6.68)$$

Si $\lambda \Delta t \in \Lambda(A \Delta t)$, entonces cada raíz del polinomio característico con $\omega = \lambda \Delta t$ pertenece al espectro de B .

$$r = 1 + \Delta t \lambda, \quad r_k = 1 + \Delta t \lambda_k = 1 - \frac{4\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k\pi \Delta x}{2} \right). \quad (6.69)$$

$$\begin{aligned} r_1 &= 1 - \Delta t \pi^2, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (6.70)$$

$$r_{N-1} = 1 - \frac{4\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{(N-1)\pi \Delta x}{2} \right) \approx 1 - \frac{4\Delta t}{\Delta x^2}.$$

El radio espectral es:

$$\rho = \sup_{r \in \Lambda(B)} |r| = |1 - \Delta t \gamma|. \quad (6.71)$$

De esta forma, la cota de error queda:

$$\|E^n\| \leq (|1 - \Delta t \gamma|)^n \|E^0\| + \left[\frac{1 - (1 - \Delta t \gamma)^n}{\Delta t \gamma} \right] \sup \|T^k\|. \quad (6.72)$$

A continuación, se calcula el error de truncamiento o residuo del esquema temporal:

$$T^{n+1} = U(t_{n+1}) - U(t_n) - \Delta t F(U(t_n); t_n). \quad (6.73)$$

Si $U(t)$ es suficientemente regular, se puede hacer un desarrollo en serie de Taylor alrededor de t_n .

$$T^{n+1} = U(t_n) + \left(\frac{dU}{dt} \right)_{t_n} \Delta t + \left(\frac{d^2U}{dt^2} \right)_{t_n} \frac{\Delta t^2}{2} + \dots - U(t_n) - \Delta t F(U(t_n); t_n). \quad (6.74)$$

El primer término distinto de cero del desarrollo anterior es:

$$T^{n+1} = \left(\frac{d^2U}{dt^2} \right)_{t_n} \frac{\Delta t^2}{2}, \quad (6.75)$$

y

$$\sup \|T^k\| = \frac{K \Delta t^2}{2}, \quad K = \sup_{\forall t_n} \left(\frac{d^2U}{dt^2} \right)_{t_n}. \quad (6.76)$$

Sustituyendo en la expresión (6.72), queda:

$$\|E^n\| \leq (|1 - \Delta t \gamma|)^n \|E^0\| + \left[\frac{1 - (1 - \Delta t \gamma)^n}{\Delta t \gamma} \right] \frac{K \Delta t^2}{2}. \quad (6.77)$$

$$\|E^n\| \leq (|1 - \Delta t \gamma|)^n \|E^0\| + \left[\frac{1 - (1 - \Delta t \gamma)^n}{\gamma} \right] \frac{K \Delta t}{2}. \quad (6.78)$$

En general, el error de la discretización espacial del esquema Euler es $O(\Delta t)$. Nótese como el denominador de la expresión anterior reduce un orden el error de truncamiento.

Se dice que un esquema temporal para la discretización temporal es de orden q cuando su error local de truncamiento sea del $O(\Delta t^{q+1})$. Por otra parte, el radio espectral $\rho = 1 - \gamma \Delta t$ es menor que uno siempre que:

$$\begin{aligned} 1 - \gamma \Delta t < 1, & \Rightarrow \gamma > 0, \\ \gamma \Delta t - 1 < 1, & \Rightarrow \gamma \Delta t < 2. \end{aligned} \quad (6.79)$$

$$\text{Como } \gamma = \frac{4}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k\pi \Delta x}{2} \right),$$

94 CAPÍTULO 6. PROBLEMAS DE CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO

$$\frac{4 \Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k\pi \Delta x}{2} \right) < 2, \quad \frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2 \sin^2 \left(\frac{k\pi \Delta x}{2} \right)},$$

$$k = 1, \quad \frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2 \frac{\pi^2 \Delta x^2}{4}}, \quad (6.80)$$

$$k = N - 1, \quad \frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2 \sin^2 \left[\frac{(N-1)\pi}{2 N} \right]} \approx \frac{1}{2}.$$

Por lo tanto, el límite se encuentra para números de onda grandes $k = N - 1$ y resulta que:

$$\text{si } \frac{\Delta t}{\Delta x^2} < 2, \quad \text{entonces } \rho < 1, \quad (6.81)$$

y el error de las condiciones iniciales se amortigua con el tiempo. Además, el error temporal queda acotado por $O(\Delta t)$.

Interpolación: $E_N(x) = u(x) - I_N(x) = \pi_{N+1}(x) \frac{u^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} + \sum_{j=0}^N \epsilon_j \ell_j(x)$

Discretización:

- Temporal: $E^n = u(t_n) - u^n$
- Espacial: $E = \begin{pmatrix} u(x_0, t) \\ \vdots \\ u(x_N, t) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_0(t) \\ \vdots \\ u_N(t) \end{pmatrix}, \quad R_j = \mathcal{L}(u)|_{x_j} - A_{jk} u(x_k, t)$
- Total: $E_T = E + E^n$

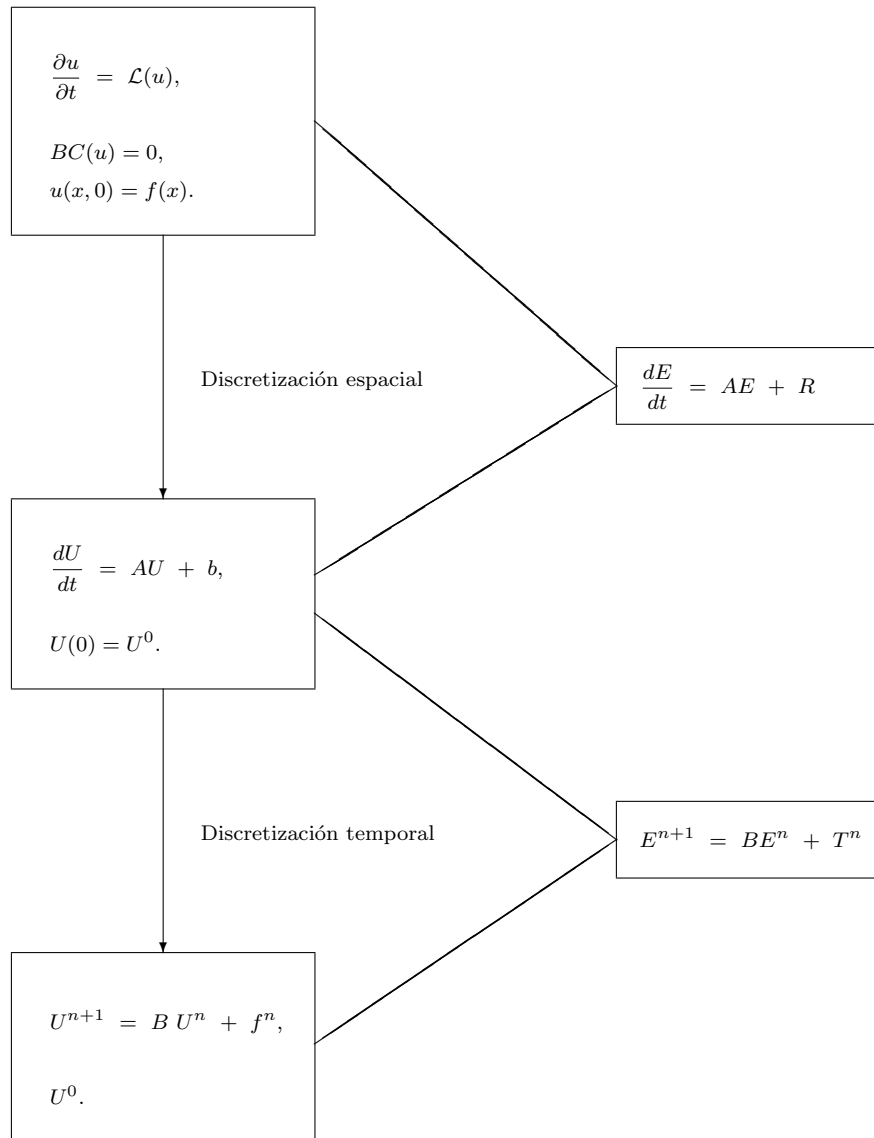


Figura 6.1: Esquema de errores de las discretizaciones espacial y temporal

96 CAPÍTULO 6. PROBLEMAS DE CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO

BIBLIOGRAFÍA