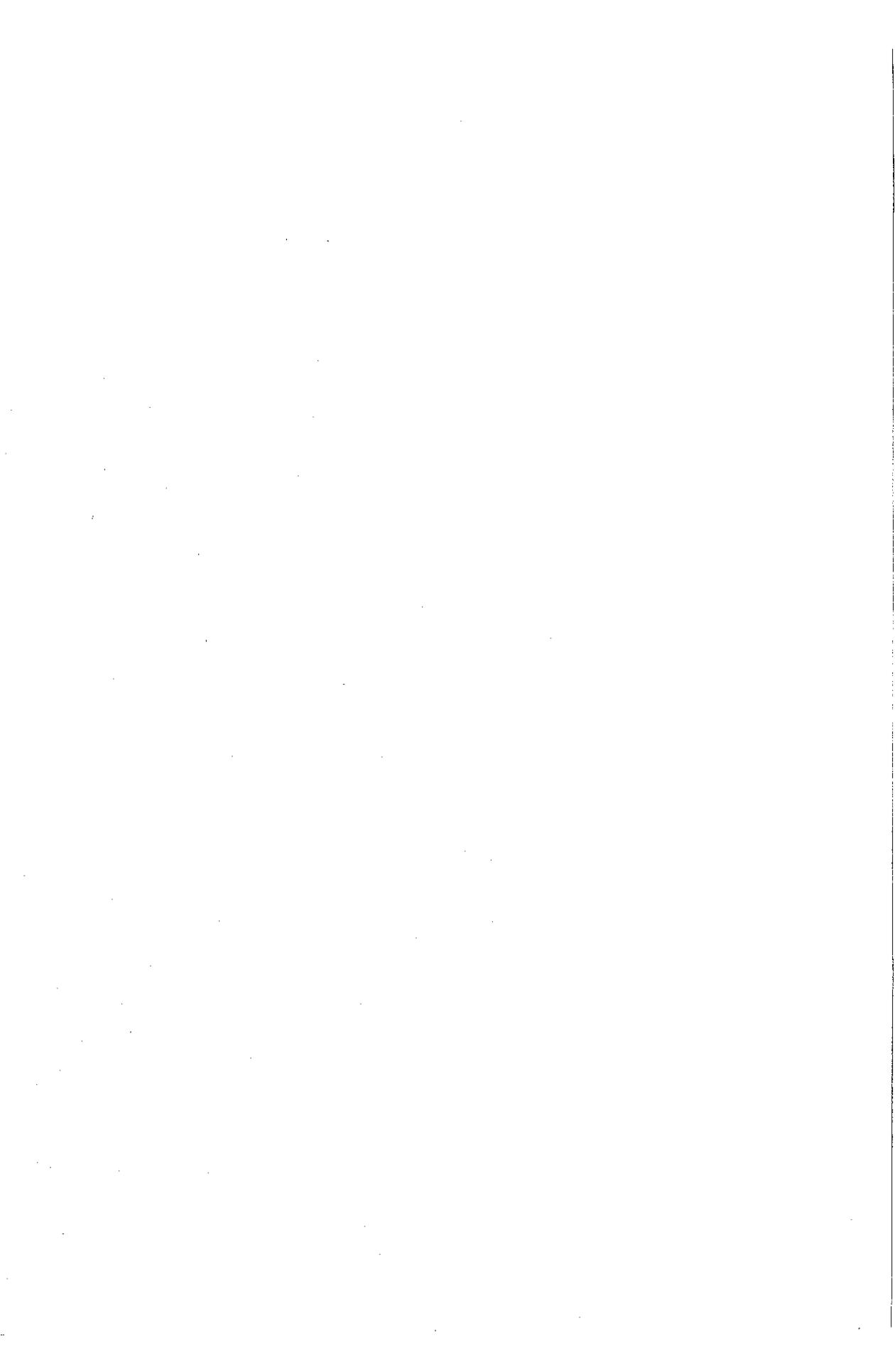


A mis padres



*«¡Bellos copos de nieve!
Nunca caen fuera de
ninguna parte.»*

Kôan Zen, siglo VIII

NOTA A LA PRIMERA REIMPRESION

En esta reimpression no se altera el esquema general de presentación previo. No obstante, he aprovechado la oportunidad para completar la materia discutida en el texto original. Son de mencionar el tratamiento de integrales con funciones fuertemente oscilantes (Tema 2), la discusión un tanto detallada de la δ de Dirac y sus aplicaciones (Tema 4) y la integración numérica Monte Carlo en regiones arbitrarias (Tema 7). Una buena serie de pequeños detalles en forma de comentarios, ejercicios o fórmulas, no dignos de mención pormenorizada y que clarifican o amplían las discusiones, han sido igualmente añadidos.

Por otra parte y tras minuciosa búsqueda, erratas, errores e interpretaciones dudosas han sido corregidas doquiera se han localizado. Confío en haber eliminado todas las imprecisiones de importancia. Dado el escaso tiempo transcurrido desde la primera edición, la bibliografía se mantiene invariable salvo adiciones puntuales de referencias colaterales. También se incluye una nueva tanda de Ejercicios de Autocomprobación sobre aquellos aspectos que he detectado como más dificultosos para el estudiante.

Luis M. Sesé Sánchez

Madrid, marzo 1994



La disciplina Métodos Teóricos de la Química Física corresponde al Plan de Estudios de la Licenciatura en Ciencias Químicas por la UNED aprobado en Orden Ministerial de 25 de abril de 1985 (BOE de 14 de mayo de 1985). Se imparte en una asignatura cuatrimestral y optativa ubicada en el 5.º Curso. Fundamentalmente se dirige a los estudiantes de Química Física, aunque no existen impedimentos de orden técnico serios para que sea cursada con aprovechamiento por los de otras especialidades.

La Química Física, como teoría de una Ciencia experimental, la Química, se ha convertido en una vasta rama de las Ciencias que utiliza, con toda profusión, un amplio bagaje teórico-experimental para aprehender los fenómenos fisicoquímicos. Es un hecho indiscutible que de la interacción Teoría-Experimentación surgen, no sólo las correctas interpretaciones (dentro del marco conceptual) a los problemas bajo estudio, sino, además, hipótesis e ideas atrevidas que sugieren tanto nuevos experimentos como mejores métodos de trabajo teóricos.

Con independencia de opiniones y gustos particulares, el lenguaje matemático, en toda su riqueza y diversidad, se ha convertido en una herramienta imprescindible para la interpretación teórica del comportamiento de la materia. La complejidad de los fenómenos aquí involucrados hace, sin embargo, que los modelos matemáticos utilizados para describirlos no puedan ser completamente desarrollados, en la mayor parte de los casos, con el fin de obtener respuestas exactas. En el intento de mejorar la capacidad predictiva y determinar resultados tan fiables como sea posible se emplean tanto métodos de cálculo aproximado como modelos teóricos del comportamiento de los sistemas. Todas estas aplicaciones, en la práctica, implican el uso extensivo de cálculo con ordenador.

Parece pues obligación inexcusable brindar al estudiante la posibilidad de familiarizarse con las técnicas y manipulaciones matemáticas, de uso corriente en la especialidad, mediante un curso introductorio. Dada la duración de éste ha habido que seleccionar como objeto de estudio determinados temas básicos de modo que permitan una posible progresión ulterior. En este primer volumen nos centraremos en los métodos de aproximación del Análisis Numérico (Temas 1-5) y en los modelos de comportamiento que surgen de la Estadística Teórica (Temas 6-9).

Los objetivos generales que se persiguen se enumeran a continuación.

- i) Presentar un conjunto de útiles matemáticos para la comprensión y aplicación práctica de los esquemas de trabajo usuales en Química Física.
- ii) Orientación de los contenidos hacia hechos concretos, extraídos directamente de este área científica, a través de los denominados Ejemplos de Aplicación. Se pretende con ellos acortar la magnitud del salto que va de los desarrollos abstractos hasta las aplicaciones de interés práctico.
- iii) Proveer al estudiante de una serie significativa de problemas resueltos que refuercen los puntos anteriores y contribuyan a un autoaprendizaje eficaz. Estos problemas van en dos bloques: los ejercicios de aplicación, intercalados en el texto para aclarar el punto matemático recién planteado; y los ejercicios de autocomprobación, que son a su vez de índole puramente matemática o de aplicación a algún caso concreto de la Química Física. Conviene realizar estos ejercicios cuando así se indica en el texto, paralelamente al estudio de éste.
- iv) Suministrar una bibliografía complementaria (no exhaustiva), tanto en forma de textos convencionales como de artículos de investigación, con la que poder ampliar los contenidos aquí discutidos.

Descendiendo un poco al detalle, veremos en la primera parte (Análisis Numérico) cómo reducir complicadas expresiones matemáticas exactas a combinaciones de las cuatro operaciones elementales (algoritmos) y evaluar el error de este reemplazamiento. Se estudiarán los problemas clásicos de la aproximación polinómica de colocación (Tema 1) y sus aplicaciones (Temas 2-3) incluyendo el tratamiento de ecuaciones diferenciales ordinarias, la aproximación de mínimos cuadrados y los desarrollos en serie de funciones ortogonales (Tema 4), y por último la resolución de ecuaciones no lineales y la diagonalización de matrices (Tema 5).

Por lo que respecta a la segunda parte (Estadística Teórica) y alrededor del concepto de probabilidad, introduciremos primeramente la terminología usual relativa a variables aleatorias y distribuciones de probabilidad (Tema 6). Seguidamente se examinan ejemplos concretos de distribuciones en una y dos dimensiones, discutiendo el importante concepto de correlación (Temas 7-8). Para concluir se presta una especial atención a los procesos estocásticos y las cadenas de Markov (Tema 9).

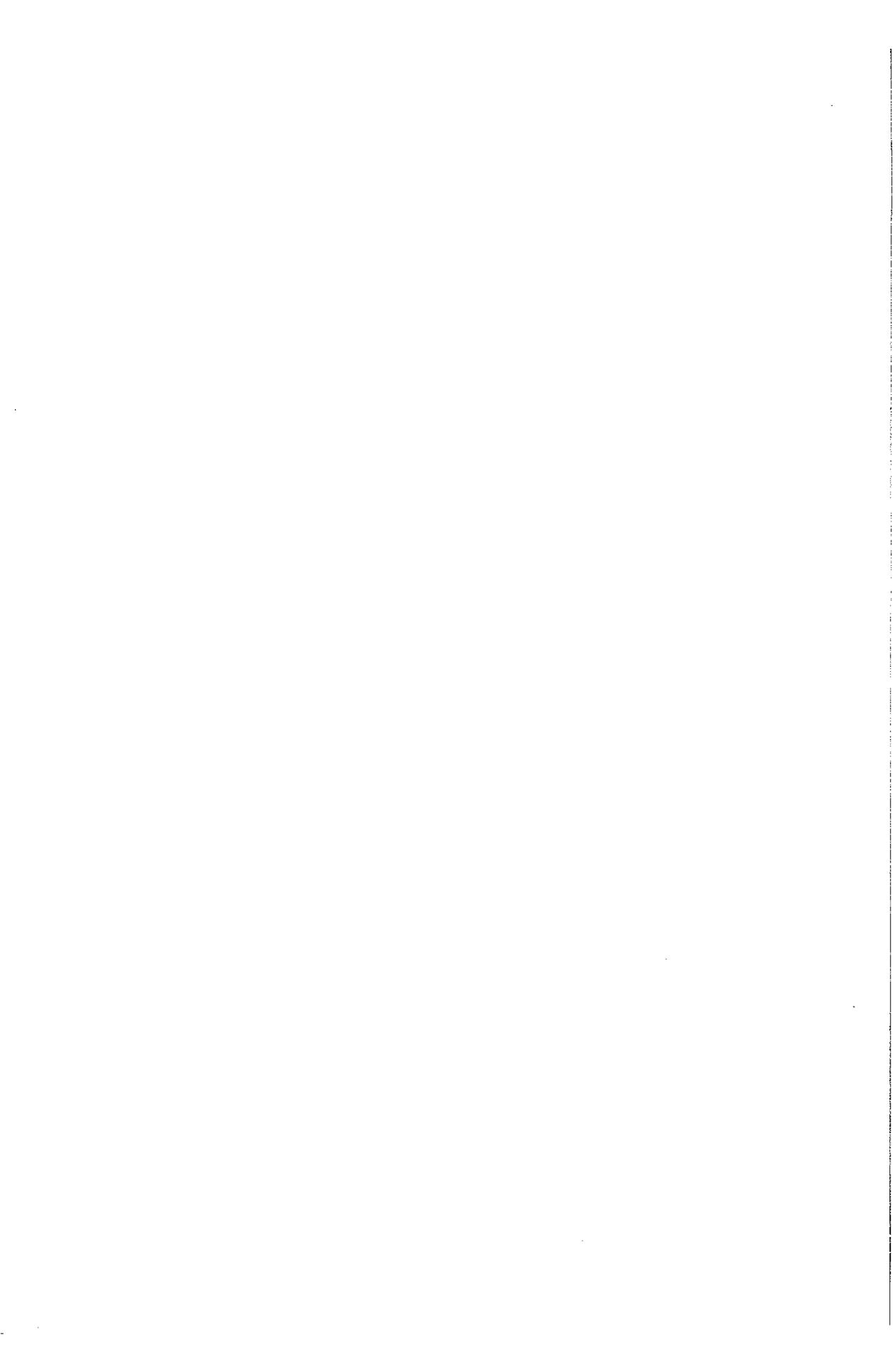
Para abordar el estudio de este volumen con provecho sólo se requieren los conocimientos elementales adquiridos en cursos previos de Matemáticas. Más explícitamente, conviene tener presentes las ideas básicas sobre: convergencia de sucesiones y series funcionales, cálculo diferencial e integral, ecuaciones diferenciales, álgebra matricial y teoría de probabilidades.

Dada la limitación temporal y la amplitud de los contenidos de la asignatura (hay un segundo volumen dedicado a la Teoría de Grupos, elaborado por el Dr. Hernanz), las aplicaciones con ordenador son relegadas a posibles estudios de Tercer Ciclo. Parece claro que los cálculos con ordenador sólo pueden programarse con fiabilidad una vez que se conoce correctamente cómo se resolvería «a mano» el problema en cuestión. Se pretende entonces aquí cubrir esta etapa previa de conocimiento de los métodos, ejercitándolos a través de cálculos (espero que interesantes) abordables con someros medios como son las calculadoras de escritorio programables.

Naturalmente, asumo la responsabilidad total del presente volumen y apelo a la benevolencia del lector para que sepa disculpar los posibles errores de hecho, notaciones pesadas, exposiciones oscuras y demás. Quedaré muy reconocido a todos aquellos colegas, estudiantes y lectores en general, que con sus comentarios constructivos me ayuden a mejorar en el futuro esta aportación sobre Matemática Aplicada. No puedo terminar sin antes agradecer a mi hermano Jesús, siempre dispuesto a colaborar, la realización de las figuras que ilustran el texto.

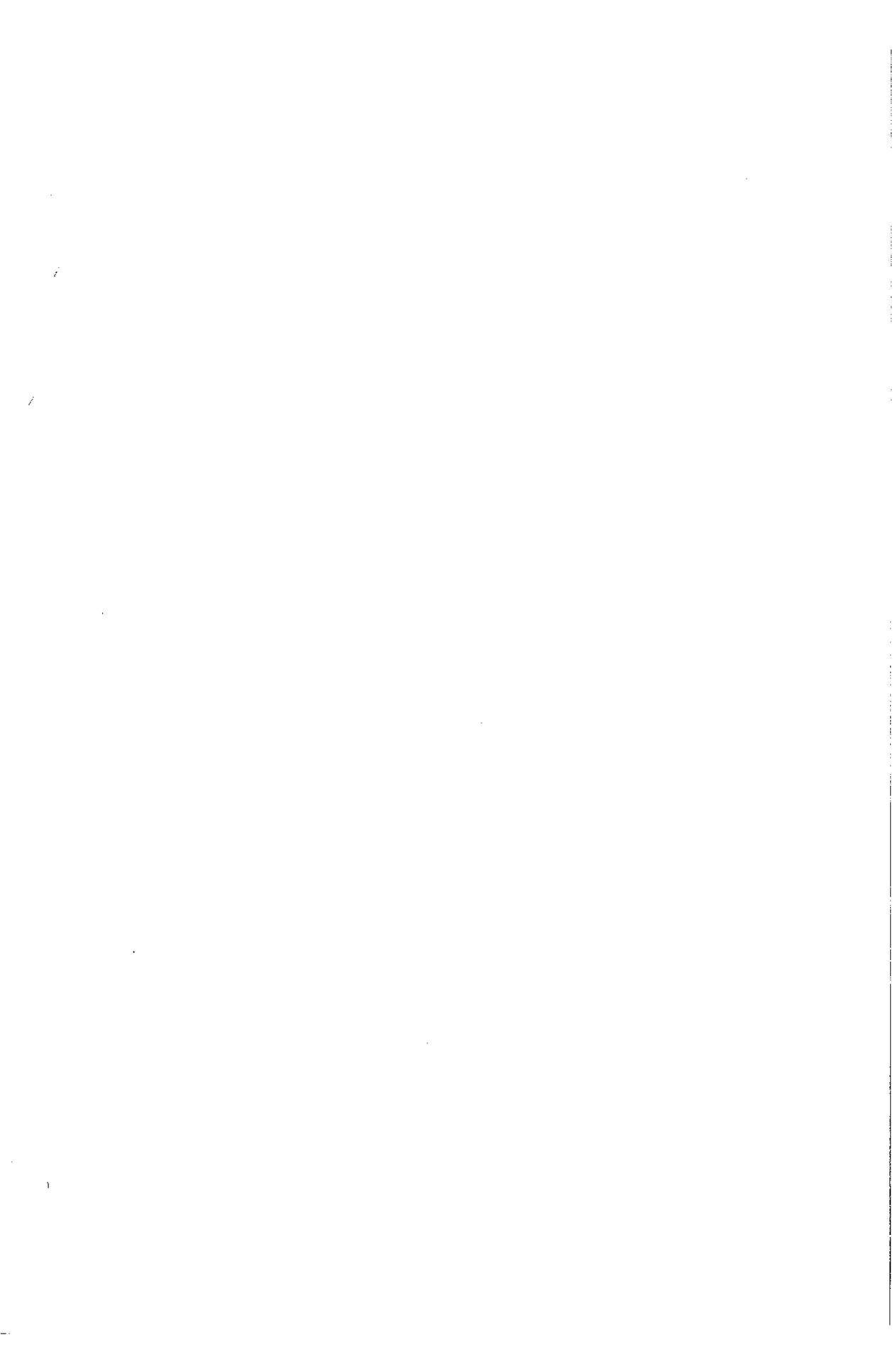
Luis M. Sesé Sánchez

Madrid, febrero 1990



ANALISIS NUMERICO

(Temas 1-5)



Tema 1

LA APROXIMACION POLINOMICA DE COLOCACION

Este primer tema de Análisis Numérico se dedica a presentar los principios de la *aproximación polinómica*. En él se considerará la sustitución de funciones matemáticas $y(x)$, reales de variable real, que incluyan operaciones no aritméticas, por entes más sencillos como son los polinomios.

Se comienza analizando el concepto de *polinomio de colocación* a una serie de datos (x_i, y_i) que tomará los valores y_i en los puntos x_i de la serie (tabla), examinándose el error del ajuste en el intervalo considerado. Es claro que trabajar con un polinomio es mucho más cómodo que hacerlo con la tabla numérica a la que representa.

El siguiente punto es el del cálculo de *diferencias finitas*. Esta herramienta, introducida originalmente por Newton, ocupa un lugar central en los textos clásicos de Análisis Numérico por el gran número de aplicaciones que se derivan de ella. Entre otras, bastará mencionar la obtención de polinomios de colocación para argumentos equiespaciados, la resolución numérica de ecuaciones diferenciales, etc.

A continuación se pasa a los *polinomios factoriales*, los cuales combinados linealmente permiten representar polinomios cualesquiera. Su utilidad estriba en la facilidad de cálculo de diferencias de polinomios arbitrarios, pues la diferencia de un polinomio factorial responde a una fórmula análoga a la de la derivación de funciones potenciales en Análisis Matemático.

Se estudia la relación entre operadores y aproximación polinómica para argumentos equiespaciados, empleando operadores para representar de forma compacta fórmulas de colocación complicadas. El ya citado cálculo con diferencias queda bien representado con ayuda del operador

diferencia Δ , que a su vez nos suministra la expresión del polinomio de Newton. Se introducen igualmente otros polinomios de colocación, como el de Gauss y el de Stirling, que involucran a otros operadores (δ, μ).

El tema concluye con algunas técnicas (Lagrange, diferencias divididas) que se deben aplicar en los casos de argumentos no igualmente espaciados.

1. FUNDAMENTOS MATEMATICOS

Antes de pasar a estudiar el polinomio de colocación, puede resultar provechoso revisar someramente los fundamentos matemáticos de la aproximación polinómica. Las razones para la sustitución de una función $y(x)$ arbitraria por un polinomio $p(x)$ parecen sencillas de comprender:

- i) Facilidad de cálculo con $p(x)$, que incluye potencias enteras x^n , tanto manual como con máquinas.
- ii) La diferenciación e integración de $p(x)$ son inmediatas y conducen de nuevo a un polinomio.
- iii) Las raíces de $p(x)$ son fáciles de obtener.
- iv) Si se cambia el origen de coordenadas, cambian los coeficientes del polinomio, pero se mantiene la forma funcional de la aproximación. Esto se debe a que el conjunto base $\{x^n\}_{n=0, \infty}$ es *completo* sobre cualquier intervalo $a \leq x \leq b$, lo que abrirá posteriormente nuevas posibilidades en ajustes por mínimos cuadrados.

Mencionadas estas razones operativas, enunciemos el famoso teorema de Weierstrass (Ralston, 1970):

Dada una función $f(x)$, continua en el intervalo cerrado $a \leq x \leq b$, se verifica que para todo número real $\varepsilon > 0$ existe un número natural $n = n(\varepsilon)$ que depende de ε y un polinomio $p_n(x)$ de grado n , tales que:

$$|f(x) - p_n(x)| < \varepsilon \quad \text{para todo } x: a \leq x \leq b \quad [1]$$

Este teorema garantiza que $f(x)$ puede ser aproximada uniformemente en $a \leq x \leq b$ por un polinomio de grado n . Es decir, para un nivel

de aproximación máximo permitido ε en todo el intervalo, existe un polinomio que aproxima a $f(x)$ dentro de él.

Escribamos ahora la forma típica de $p_n(x)$:

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n \quad [2]$$

desarrollo que en la terminología de espacios vectoriales indica que p_n es una combinación lineal de los elementos de la base polinómica:

$$\{x^n\}_{n=0, \infty} = 1, x, x^2, \dots \quad [3]$$

Pues bien, el conjunto dado por la sucesión [3] es completo sobre cualquier intervalo cerrado $a \leq x \leq b$. Esto quiere decir que para toda $f(x)$ continua en ese intervalo se verifica que, para todo número real $\varepsilon > 0$, existe un número natural $n = n(\varepsilon)$ dependiente de ε y un conjunto finito de números reales a_0, a_1, \dots, a_n , tales que:

$$\int_a^b \left[f(x) - \sum_{i=0}^n a_i x^i \right]^2 dx < \varepsilon \quad [4]$$

En definitiva, éste es un criterio de aproximación a $f(x)$ mediante un polinomio, conocido como aproximación en media (mínimos cuadrados), que hace el error cuadrático medio (integral) tan pequeño como se desee en el intervalo considerado. El tipo de aproximación del que hablamos resulta fundamental en los desarrollos matemáticos que se utilizan en Mecánica Cuántica y se volverá sobre él en el Tema 4. No es complicado comprobar que el criterio de aproximación uniforme garantiza necesariamente una aproximación en media, pero no viceversa (Apostol, 1972).

Naturalmente existen otros criterios de aproximación a $f(x)$ por polinomios $p(x)$ (osculación, splines, etc.), siendo característico de todos ellos la búsqueda de un error $|f(x) - p(x)|$ tan pequeño como sea posible (Scheid, 1972; Rice, 1983). En adelante nos ocuparemos de polinomios acordes al criterio de *colocación*, pues resultarán básicos para los dos temas posteriores.

Es importante resaltar que la función a aproximar $f(x)$ puede ser conocida o desconocida. Si es conocida, puede venir dada por una expresión analítica o por una tabla numérica. En el primer caso la aproximación polinómica puede revestir dos aspectos: la comodidad de

manejo y las aplicaciones de interés académico o metodológico. A veces es difícil distinguir estos tipos pues suelen aparecer fuertemente entremezclados. Por ejemplo, una función aparentemente tan sencilla como e^x se evalúa numéricamente en cálculos con ordenador a través de su desarrollo en serie:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots \quad [5]$$

en cada x_j que se esté interesado, utilizando tantos términos como sean necesarios para conseguir la precisión final que se exija al cálculo. Si la función viene definida por una tabla de valores (x_i, y_i) , circunstancia muy común, la aproximación polinómica resulta ventajosa por las razones ya mencionadas.

Un caso aparte lo constituyen las funciones desconocidas, que suelen ser soluciones de ecuaciones diferenciales dadas. Las aproximaciones polinómicas juegan aquí un papel destacado, pues si bien la solución general suele adoptar la forma de una serie funcional:

$$y(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i \quad ; \quad a \leq x \leq b \quad [6]$$

a la hora de realizar cálculos tales series son truncadas, según el error máximo permitido, de modo que acaban en un polinomio:

$$y(x_j) \simeq \sum_{i=0}^n a_i x_j^i \quad [7]$$

2. EL POLINOMIO DE COLOCACION Y SU ERROR

Centrándonos pues en el polinomio de colocación, $p(x)$ lo definiremos como aquel que coincide con $y = f(x)$ en una serie de puntos especificados por los valores tabulares, $\{(x_j, y_j)\}_{j=0, n}$:

$$y_j = y(x_j) = p(x_j) \quad ; \quad j = 0, 1, \dots, n \quad [8]$$

Notemos que el polinomio que se «coloca» con $f(x)$ en $(n + 1)$ puntos es de grado n y además único (Scheid, 1972). Tendrá, por tanto, como máximo n raíces reales y un error de ajuste en los argumentos de colocación x_j nulo (Ejercicio 1).

Para obtener la expresión del error asociada a un polinomio de colocación, es útil recordar el enunciado del teorema de Rolle:

Dada una función $f(x)$ continua en $a \leq x \leq b$ y derivable en (a, b) , tal que $f(a) = f(b) = 0$, se verifica que existe un número real c , $a < c < b$, que hace nula a la primera derivada de $f(x)$:

$$f'(c) = 0 \quad [9]$$

Sea pues $p_n(x)$ un polinomio de grado n que toma los mismos valores que $f(x)$ en $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$. La diferencia entre ambas funciones podría ser de la forma:

$$y(x) - p_n(x) = C\pi(x) = C(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n) \quad [10]$$

y será necesario encontrar una expresión para C .

Definamos $F(x)$, nula en los puntos de colocación, como:

$$F(x) = y(x) - p_n(x) - C\pi(x) \quad [11]$$

Tomemos ahora un argumento diferente de los anteriores x_{n+1} , dentro del intervalo de ajuste, y hagamos:

$$C = \frac{y(x_{n+1}) - p_n(x_{n+1})}{\pi(x_{n+1})} \quad [12]$$

siendo inmediato ver que $F(x_{n+1}) = 0$. Esto lleva a concluir que $F(x)$ posee al menos $n + 2$ ceros. El teorema de Rolle asegura entonces $n + 1$ ceros para F' entre los de F , n ceros para F'' entre los de F' , y así sucesivamente. En conclusión $F^{(n+1)}$ tiene al menos un cero dentro del intervalo $x_0 < x < x_n$, que denotaremos por ξ . Consecuentemente escribiremos:

$$F^{(n+1)}(x)|_{x=\xi} = y^{(n+1)}(\xi) - C(n + 1)! \quad [13]$$

resultando para C la expresión:

$$C = \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad [14]$$

Sin pérdida de generalidad puede escribirse el error como:

$$y(x) - p_n(x) = \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \pi(x) \quad ; \quad x_0 < \xi < x_n \quad [15]$$

pues $x_{n+1} = x \neq x_0, x_1, \dots, x_n$ y $x_0 < x_{n+1} < x_n$.

A pesar de que ξ suele ser indeterminado, el resultado [15] es muy útil, pues en muchas ocasiones se obtienen estimaciones de $y^{(n+1)}(\xi)$ independientemente de ξ .

3. CALCULO CON DIFERENCIAS FINITAS

3.1. Diferencias de avance

Dada una función $y = f(x)$ en forma de tabla numérica $\{(x_k, y_k)\}_{k=0, n}$ con argumentos x_k igualmente espaciados:

$$x_{k+1} - x_k = h = \text{constante} > 0 \quad [16]$$

se definen las primeras diferencias (de *avance* en este caso) como:

$$\Delta y_k = y_{k+1} - y_k \quad ; \quad k = 0, \dots, n-1 \quad [17]$$

Análogamente, las segundas diferencias se calculan a partir de las anteriores de la siguiente manera:

$$\Delta^2 y_k = \Delta(\Delta y_k) = \Delta y_{k+1} - \Delta y_k = y_{k+2} - 2y_{k+1} + y_k \quad [18]$$

y así sucesivamente. En general puede escribirse:

$$\Delta^n y_k = \Delta^{n-1} y_{k+1} - \Delta^{n-1} y_k \quad [19]$$

expresión que, en definitiva, resulta ser una combinación de los valores tabulares y_k .

Las diferencias finitas se suelen ordenar en lo que se llama tabla de diferencias o diagramas de Lozenge-Fraser:

k	x_k	y_k	Δy_k	$\Delta^2 y_k$	$\Delta^3 y_k$
0	x_0	y_0	$\Delta y_0 = y_1 - y_0$		
1	x_1	y_1	$\Delta y_1 = y_2 - y_1$	$\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0$	$\Delta^3 y_0 = \Delta^2 y_1 - \Delta^2 y_0$
2	x_2	y_2	$\Delta y_2 = y_3 - y_2$	$\Delta^2 y_1 = \Delta y_2 - \Delta y_1$	$\Delta^3 y_1 = \Delta^2 y_2 - \Delta^2 y_1$
3	x_3	y_3	$\Delta y_3 = y_4 - y_3$	$\Delta^2 y_2 = \Delta y_3 - \Delta y_2$	⋮
4	x_4	y_4	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

[20]

No es muy difícil comprobar por inducción la relación (Scheid, 1972):

$$\Delta^n y_0 = \sum_{i=0}^n (-1)^i \binom{n}{i} y_{n-i} \quad [21]$$

Es importante notar que el origen de la Tabla ($k = 0$) se ha tomado en el valor del argumento x más pequeño (x_0). Por esta razón las diferencias Δ se denominan de avance. Como veremos más adelante son posibles otras elecciones de origen que traen asociadas operaciones de diferencia distintas de Δ .

3.2. Carácter operacional de Δ

La operación de diferencia de avance Δ puede ser considerada como el resultado de la actuación de un operador abstracto Δ sobre la función y_k . Análogamente, las segundas diferencias Δ^2 son el resultado de la actuación del mismo operador Δ sobre una función $\Delta y_k \neq y_k$, y así sucesivamente. Podemos preguntarnos entonces por las propiedades algebraicas que posee Δ . Sin duda la más interesante es la linealidad, es decir, dadas dos funciones tabulares y_k, z_k y dos constantes reales cualesquiera c_1, c_2 , se tiene:

$$\Delta(c_1 y_k + c_2 z_k) = c_1 \Delta y_k + c_2 \Delta z_k \quad [22]$$

relación cuya comprobación resulta trivial.

Si la función tabular y_k es una combinación de dos o más funciones, pueden obtenerse relaciones entre las diferencias de y_k y las diferencias de las funciones de las que proviene (Ejercicio 2).

3.3. Propagación de errores en una tabla de diferencias

Pasemos ahora al importante punto de la propagación de errores en las tablas de diferencias. Supongamos que la función tabular (x_k, y_k) posee algunos valores y_k afectados de un error accidental, como por ejemplo un despiste en la transcripción del dato (0,6234 por 0,6324).

Veamos cómo se propaga este error en el supuesto de que sólo hubiera un dato erróneo $y_3 + \varepsilon$. El problema es equivalente al de construir la tabla de diferencias de la función:

$$y_k = \begin{cases} 0 & k \neq 3 \\ \varepsilon & k = 3 \end{cases}$$

que es sencillamente:

k	x_k	y_k	Δy_k	$\Delta^2 y_k$	$\Delta^3 y_k$
0	x_0	0	0		
1	x_1	0	0	0	
2	x_2	0	ε	ε	ε
3	x_3	ε	$-\varepsilon$	-2ε	-3ε
4	x_4	0	0	ε	3ε
5	x_5	0	0	0	$-\varepsilon$
6	x_6	0	0		

Observamos que: a) el error se propaga en forma cónica; b) de acuerdo a coeficientes binómicos; c) con alternancia de signos. Esta última característica es, en general, la pista que indica la existencia de posibles errores en la tabla. Un ejemplo numérico puede ser de ayuda para comprender cómo operar en estos casos. Sea la función definida por las parejas de valores: (0, 0), (1, 1), (2, 8), (3, 20), (4, 64), (5, 125), (6, 216). Su tabla de diferencias es:

x_k	y_k	Δy_k	$\Delta^2 y_k$	$\Delta^3 y_k$
0	0			
1	1	1		
2	8	7	6	
3	20	12	5	-1
4	64	44	32	27
5	125	61	17	-15
6	216	91	30	13

La alternancia de signos nos lleva al dato erróneo (3,20). Una vez localizado el error es posible dar marcha atrás y corregirlo, apoyándose en ciertas hipótesis sobre el comportamiento de la tabla. En este ejemplo es fácil de anticipar que la columna Δ^3 debe ser constante e igual a 6, por lo que retrocediendo llegamos a que $y_3 = 27$.

La tarea de identificación y corrección de errores se ve dificultada cuando hay dos o más datos defectuosos, pues se superponen los efectos de las propagaciones de error parciales (Ejercicio 3). En estos casos debemos proceder, en general, a través de procesos de ensayo-error. Como cada posible combinación de datos erróneos produce una tabla de diferencias con propagación de errores característica, la tarea consistirá en identificar el esquema de propagación que corresponde a cada caso en particular. A veces este trabajo se ve simplificado por la estructura particular de la tabla, como veremos en el apartado 2.2 del Tema 2. A toda la discusión anterior hay que añadir el efecto que los errores de redondeo pueden incorporar a las diferencias. En muchos casos estos errores rompen el esquema de propagación básico anterior y, por tanto, el análisis de la situación se complica de modo alarmante.

4. POLINOMIOS FACTORIALES Y NUMEROS DE STIRLING

El polinomio factorial de grado n ($n > 0$) se denota por $k^{(n)}$ y se define por la relación:

$$y_k = k^{(n)} = k(k-1)(k-2)\cdots(k-n+1) \quad [23]$$

extendiéndose la definición para grados $n < 0$ con la fórmula recurrente:

$$k^{(n)} = \frac{k^{(n+1)}}{(k-n)} \quad ; \quad n = 0, -1, -2, \dots \quad [24]$$

que no es sino [23] reescrita en otros términos (recuérdese la definición de variaciones de k elementos tomados de n en n). Las ecuaciones [23]-[24] sirven así para definir todos los polinomios factoriales sean éstos de grado positivo o negativo.

Es inmediato reconocer la estrecha relación que liga a estos polinomios con los coeficientes binómicos:

$$\binom{k}{n} = \frac{k^{(n)}}{n!}$$

por lo que las propiedades de unos tendrán su contrapartida en las de los otros (Ejercicio 4a).

La propiedad fundamental de los polinomios factoriales se expresa (Scheid, 1972):

$$y_{k+1} - y_k = \Delta k^{(n)} = nk^{(n-1)} \quad ; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad [25]$$

que indica que la diferencia de un polinomio factorial es otro polinomio factorial con un grado menos, en una fórmula análoga a la de derivación de funciones potenciales (x^n) (Ejercicio 4b).

Como se deduce de [23]-[24] un polinomio factorial no es sino una representación compacta de un polinomio en la variable k :

$$k^{(n)} = \sum_{i=1}^n s_i^{(n)} k^i \quad [26]$$

Los coeficientes $s_i^{(n)}$ que aparecen en [26] se llaman *números de Stirling de primera clase*, y obedecen a la recurrencia:

$$s_i^{(n+1)} = s_{i-1}^{(n)} - ns_i^{(n)} \quad [27]$$

la cual permite una rápida tabulación de éstos.

El proceso anterior es invertible, es decir las potencias de k pueden expresarse como combinaciones de polinomios factoriales:

$$k^n = \sum_{i=1}^n S_i^{(n)} k^{(i)} \quad [28]$$

apareciendo ahora los coeficientes $S_i^{(n)}$ que son los *números de Stirling de segunda clase*. La relación de recurrencia es en este caso:

$$S_i^{(n+1)} = S_{i-1}^{(n)} + iS_i^{(n)} \quad [29]$$

La representación de k^n dada por [28] es *única*. Por tanto, un polinomio cualquiera podrá ponerse como una combinación de polinomios factoriales, y el cálculo de sus diferencias será pues un asunto trivial:

$$\begin{aligned}
 p_n(k) &= a_0 + \sum_{i=1}^n a_i k^i = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i \left[\sum_{j=1}^i S_j^{(i)} k^{(j)} \right] = \\
 &= a_0 + \sum_{j=1}^n \left[\sum_{i=j}^n a_i S_j^{(i)} \right] k^{(j)} = p_n(k^{(j)}) \quad [30]
 \end{aligned}$$

$$\Delta p_n(k^{(j)}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^i a_i S_j^{(i)} \cdot j \cdot k^{(j-1)} \equiv \sum_{j=1}^n \left[\sum_{i=j}^n a_i S_j^{(i)} \right] j \cdot k^{(j-1)} \quad [31]$$

Por sustitución de [26] en [31] se obtiene sin dificultad la diferencia del polinomio en la base de las potencias k^j (Ejercicio 4c). Es de interés aquí mencionar la posibilidad de realizar «integraciones finitas» utilizando polinomios factoriales para resolver ecuaciones en diferencias del tipo

$$\Delta y_k = k^n$$

(Ejercicio 4d).

5. OPERADORES PARA ARGUMENTOS IGUALMENTE ESPACIADOS

5.1. Operador Δ y polinomio de avance de Newton

Reconsideremos la tabla de diferencias [20] y expresemos cada uno de los valores funcionales y_k según desarrollos del tipo:

$$y_k = \sum_{i=0}^k c_i \Delta^i y_0 \quad ; \quad k \geq 0 \quad [32]$$

en donde convenimos que $c_0 \Delta^0 y_0 = y_0$. Se obtienen entonces las relaciones siguientes:

$$\begin{aligned}
 y_0 &= y_0 \\
 y_1 &= y_0 + \Delta y_0 \\
 y_2 &= y_0 + 2\Delta y_0 + \Delta^2 y_0 \\
 y_3 &= y_0 + 3\Delta y_0 + 3\Delta^2 y_0 + \Delta^3 y_0 \\
 y_4 &= y_0 + 4\Delta y_0 + 6\Delta^2 y_0 + 4\Delta^3 y_0 + \Delta^4 y_0 \\
 &\dots\dots\dots
 \end{aligned}
 \tag{33}$$

en las que se reconocen en seguida a los coeficientes binómicos. Podemos anticipar entonces una fórmula general para y_k de la forma:

$$y_k = \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} \Delta^i y_0
 \tag{34}$$

cuya validez queda garantizada por *inducción* (Ejercicio 5).

Utilizando [34], el polinomio de grado n que coloca una colección de datos tabulares $\{(x_k, y_k)\}_{k=0, n}$ igualmente espaciados en el argumento x , se escribe:

$$\begin{aligned}
 p_k &= y_0 + k\Delta y_0 + \frac{1}{2!} k(k-1)\Delta^2 y_0 + \frac{1}{3!} k(k-1)(k-2)\Delta^3 y_0 + \dots \\
 &\dots + \frac{1}{n!} k(k-1)\dots(k-n+1)\Delta^n y_0
 \end{aligned}
 \tag{35}$$

Si se desea tener el polinomio en función del argumento x_k , bastará utilizar las relaciones:

$$k = \frac{x_k - x_0}{h} \quad ; \quad k-1 = \frac{x_k - x_1}{h} \quad ; \quad k-2 = \frac{x_k - x_2}{h}
 \tag{36}$$

y obtener:

$$p(x_k) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h} (x_k - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2h^2} (x_k - x_0)(x_k - x_1) + \dots
 \tag{37}$$

No obstante, es más cómoda de utilización [35], que puede compactarse en:

$$p_k = \sum_{i=0}^n \binom{k}{i} \Delta^i y_0 \quad [38]$$

gracias al carácter de operador que tiene Δ^i . Las expresiones [37]-[38] se conocen como *polinomio de colocación de avance de Newton*, que es una herramienta básica del Análisis Numérico.

Ejemplo de aplicación

Las primeras líneas del espectro de absorción de rotación pura de la molécula $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ aparecen a las frecuencias siguientes: $\nu(\text{cm}^{-1}) = 3,842; 7,684; 11,526; 15,368; 19,210$. Considerando que $\nu = E(J + 1) - E(J)$, donde J es un número cuántico entero que caracteriza a cada estado rotacional, anticipar la forma funcional que liga la energía E del estado rotacional con su correspondiente número J .

Para resolver esta cuestión comencemos disponiendo la tabla de frecuencias en forma de tabla de diferencias:

J	$E(J)(\text{cm}^{-1})$	$\nu = \Delta E$	$\Delta\nu = \Delta^2 E$
J_0	$E(J_0)$	3,842	
J_1	$E(J_1)$	7,684	3,842
J_2	$E(J_2)$	11,526	3,842
J_3	$E(J_3)$	15,368	3,842
J_4	$E(J_4)$	19,210	3,842
J_5	$E(J_5)$		

siendo inmediato anticipar a partir de aquí que la dependencia $E = E(J)$ será de tipo cuadrático:

$$E(J) = a_0 + a_1 J + a_2 J^2$$

ecuación que es independiente del origen J_0 que se tome para los números J . El Análisis Numérico no puede ir más allá de la expresión anterior y de los coeficientes que suministre para una elección dada de J_0 :

$$E(J) = E(J_0) + \frac{1}{2} \cdot 3,842 \cdot (J - J_0) (J - J_0 + 1)$$

quedando la indeterminación de E_0 y la arbitrariedad en J_0 como asuntos a resolver fuera de este dominio.

La relación $E(J)$ anterior apunta obviamente a la dada por Mecánica Cuántica ($J_0 = 0$):

$$E(J) = BJ(J + 1) \quad ; \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

en donde B es una constante que depende de la naturaleza de la molécula en cuestión. Podemos decir que en las condiciones con las que se obtuvieron las frecuencias anteriores (equipo experimental, etc.) para el CO, éste se comporta como un rotor rígido mecanocuántico.

En resumen, aunque la aproximación numérica no contiene en sí misma nada sobre la naturaleza física del problema, posee en cambio un alto valor indicativo sobre el fenómeno que reproduce.

5.2. Operadores E, ∇, μ, δ

Acabamos de ver cómo el operador Δ simplifica la tarea de obtener polinomios de colocación, evitándonos resolver tediosos sistemas de ecuaciones cuya resolución no siempre está libre de errores numéricos. Podemos igualmente definir otros operadores para trabajar con datos tabulares. Los más usuales son: E, ∇, μ y δ , siendo todos ellos lineales.

El operador E se define como un operador de salto:

$$Ey_k = y_{k+1} \quad [39]$$

El operador diferencia reversiva ∇ actúa de la manera siguiente:

$$\nabla y_k = y_k - y_{k-1} \quad [40]$$

diferentes polinomios de ajuste. Añadiremos a los ya vistos los dos siguientes que involucran a δ y μ (Scheid, 1972):

a) Gauss (avance) para polinomios de grado par $2n$, con $k = -n, \dots, 0, \dots, n$:

$$p_k = y_0 + \sum_{i=1}^n \left[\binom{k+i-1}{2i-1} \delta^{2i-1} y_{1/2} + \binom{k+i-1}{2i} \delta^{2i} y_0 \right] \quad [48]$$

y para grado impar $2n+1$, con $k = -n, \dots, 0, \dots, n+1$:

$$p_k = \sum_{i=0}^n \left[\binom{k+i-1}{2i} \delta^{2i} y_0 + \binom{k+i}{2i+1} \delta^{2i+1} y_{1/2} \right] \quad [49]$$

b) Stirling con $k = -n, \dots, 0, \dots, n$:

$$p_k = y_0 + \binom{k}{1} \delta \mu y_0 + \binom{k}{1} \frac{k}{2} \delta^2 y_0 + \binom{k+1}{3} \delta^3 \mu y_0 + \binom{k+1}{3} \frac{k}{4} \delta^4 y_0 + \dots$$

$$\dots + \binom{k+n-1}{2n-1} \delta^{2n-1} \mu y_0 + \binom{k+n-1}{2n-1} \frac{k}{2n} \delta^{2n} y_0 \quad [50]$$

Aparte de los polinomios ya expresados existe una gran variedad de ellos (Gauss de retroceso, Everett, etc. (Scheid, 1972)) hecho que se plasma en la regla del *zig-zag* (Ralston, 1970), según la cual pueden obtenerse polinomios a partir de la tabla de diferencias siguiendo caminos originados por combinaciones de operadores diseñadas a tal efecto (Ejercicio 7).

5.3. Utilidad de los diferentes polinomios de colocación

A la vista de tantas expresiones para los polinomios de ajuste surge una pregunta razonable: ¿realmente son necesarios todos ellos, teniendo en cuenta que el polinomio de colocación de grado n a $n+1$ datos es único? Para una tabla de diferencias dada todos los polinomios de colocación mencionados conducen a una misma función, ya que todos ellos son algebraicamente equivalentes.

La razón de la existencia de tantas fórmulas de aproximación es simple: flexibilidad. Este concepto puede entenderse bien con un sencillo ejemplo. Supongamos que se tiene una extensa colección de datos (x_k, y_k) de la cual nos interesa describir la región de la cabecera de la tabla. Este problema, denominado *interpolación* y del que hablaremos más en el Tema 2, puede abordarse con cualquiera de las fórmulas de aproximación mencionadas. Pero, y éste es el punto importante, para un nivel de error dado, el polinomio de avance de Newton necesitará menos términos a considerar en su desarrollo que los de Gauss o Stirling, y muchos menos aún que el de retroceso de Newton, para representar tal región. Dicho en otras palabras, utilizando hasta las diferencias $\Delta^2 y_0$ (3 términos), por ejemplo, el polinomio de avance de Newton puede dar una aproximación igual de buena que la que darían los otros polinomios pero usando un número mayor de términos. Naturalmente, con diferencias de tipo central o reversivas será necesario ir más lejos en el orden para describir lo que sucede lejos del origen de la tabla, situado en estos casos hacia el centro o en el extremo inferior. La esencia de la cuestión está pues en ahorrar el mayor número posible de cálculos y acotar la magnitud del error cometido cuando no se utilicen todos los datos tabulares. En este último caso, insistimos, todas las representaciones polinómicas serían equivalentes.

En resumen, si no deseamos utilizar completamente todos los datos tabulares, procederemos como sigue. Cuando se está interesado en reproducir la región superior de una tabla se utilizará un polinomio de avance de Newton, cuyo origen está en la cabecera. Si, por el contrario, se desea reproducir la región inferior, se empleará un polinomio de retroceso de Newton, con origen en el último elemento de la tabla. En los casos intermedios se pondrá el origen de la tabla en el dato que ocupe el lugar central del intervalo de interés y se utilizará una aproximación de diferencia central (Gauss, Stirling, etc.).

6. POLINOMIOS DE COLOCACION PARA ARGUMENTOS NO EQUISPACIADOS

Todos los polinomios de colocación vistos hasta aquí han sido para argumentos igualmente espaciados $x_{k+1} - x_k = h = \text{constante}$. Existen también versiones más generales que se emplean cuando el espaciado h no es constante (Scheid, 1972; Stroud, 1974; Press y col., 1988). De entre todas ellas, por brevedad, nos ocuparemos de dos: el polinomio de Lagrange y el de diferencias divididas de Newton, remitiendo a la bibliografía para otras posibilidades (Aitken, Neville, etc.).

6.1. Polinomio de Lagrange

Dada una colección de puntos $\{(x_k, y_k)\}_{k=0, n}$ cualesquiera, el polinomio de colocación de Lagrange se define como:

$$p(x) = \sum_{k=0}^n L_k(x)y_k = \sum_{k=0}^n \left[\prod_{j \neq k} \frac{(x - x_j)}{(x_k - x_j)} \right] y_k \quad [51]$$

en donde es fácil comprobar:

$$\left. \begin{array}{l} L_k(x_i) = 0 \quad i \neq k \\ L_k(x_k) = 1 \end{array} \right\} \Rightarrow p(x_k) = y_k \quad ; \quad k = 0, 1, \dots, n$$

La expresión de $L_k(x)$ puede escribirse:

$$L_k(x) = \frac{\pi(x)}{[(x - x_k) \cdot \pi'(x_k)]} \quad [52]$$

donde $\pi(x)$ es el conocido producto:

$$\pi(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$$

Es claro que [52] es un polinomio de grado n y, por lo tanto, lo mismo sucede para [51]. La expresión del error para este nuevo polinomio es idéntica a la ya deducida [15].

Por ejemplo, el polinomio de colocación de Lagrange para tres puntos $(a_0, f(a_0))$, $(a_1, f(a_1))$, $(a_2, f(a_2))$, viene dado por el desarrollo:

$$\begin{aligned} p_2(x) &= L_0(x)y_0 + L_1(x)y_1 + L_2(x)y_2 = \\ &= \frac{(x - a_1)(x - a_2)}{(a_0 - a_1)(a_0 - a_2)} f(a_0) + \frac{(x - a_0)(x - a_2)}{(a_1 - a_0)(a_1 - a_2)} f(a_1) + \\ &+ \frac{(x - a_0)(x - a_1)}{(a_2 - a_0)(a_2 - a_1)} f(a_2) \end{aligned}$$

6.2. Diferencias divididas

Las diferencias divididas constituyen una generalización de las diferencias de avance Δ . Se definen de la siguiente manera:

- i) Primera diferencia dividida entre x_k y x_{k+1} :

$$y(x_k, x_{k+1}) = \frac{y_{k+1} - y_k}{x_{k+1} - x_k}$$

- ii) Segunda diferencia dividida entre x_k, x_{k+1} y x_{k+2} :

$$y(x_k, x_{k+1}, x_{k+2}) = \frac{y(x_{k+1}, x_{k+2}) - y(x_k, x_{k+1})}{x_{k+2} - x_k}$$

- iii) La n -ésima diferencia dividida entre $x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+n}$:

$$y(x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+n}) = \frac{y(x_{k+1}, \dots, x_{k+n}) - y(x_k, \dots, x_{k+n-1})}{x_{k+n} - x_k}$$

Una tabla de diferencias divididas toma la forma:

k	x_k	y_k			
0	x_0	y_0			
1	x_1	y_1	$y(x_0, x_1)$		
2	x_2	y_2	$y(x_1, x_2)$	$y(x_0, x_1, x_2)$	
3	x_3	y_3	$y(x_2, x_3)$	$y(x_1, x_2, x_3)$	$y(x_0, x_1, x_2, x_3)$

Las diferencias divididas presentan ciertas propiedades interesantes que las hace útiles en el trabajo teórico. Revisaremos la de simetría, la de su relación con las diferencias finitas, un nuevo polinomio de Newton al que dan origen, y su utilidad para estudiar el comportamiento de $\Delta^n y_0$ cuando $n \rightarrow \infty$.

a) Por lo que respecta a la simetría, las diferencias divididas son invariantes bajo todas las permutaciones de los argumentos x_k , dado que los y_k se permutan de la misma manera:

$$\begin{aligned} y(x_0, x_1) &= y(x_1, x_0) \\ y(x_0, x_1, x_2) &= y(x_2, x_0, x_1) = \dots \\ &\dots \end{aligned}$$

(Ejercicio 8a).

b) En el caso de que los argumentos estén igualmente espaciados, $h = \text{constante}$, un cálculo directo (Ejercicio 8b) conduce a la relación:

$$y(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{\Delta^n y_0}{n! h^n} \quad [53]$$

para sucesivos valores $n = 1, 2, 3, \dots$, etc. La validez general se establece por inducción.

c) Con las diferencias divididas podemos escribir un nuevo polinomio de colocación de grado n que tome los valores y_k en los argumentos x_k arbitrarios ($k = 0, 1, \dots, n$). La expresión es la siguiente:

$$\begin{aligned} p(x) &= y_0 + (x - x_0) y(x_0, x_1) + (x - x_0)(x - x_1) y(x_0, x_1, x_2) + \dots + \\ &+ (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) y(x_0, x_1, \dots, x_n) \end{aligned} \quad [54]$$

Que [54] es el polinomio de colocación de grado n para los datos puede verificarse con rapidez:

$$p(x_0) = y_0$$

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

.....

y así sucesivamente. Obviamente, si los argumentos x_k están equiespaciados, la fórmula [54] se reduce a la de avance de Newton [37].

El error cometido con este polinomio en todo el intervalo de ajuste viene dado por [15]:

$$y(x) - p(x) = \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \pi(x)$$

Vamos, no obstante, a deducir una expresión equivalente a la anterior y basada en diferencias divididas, de modo que luego seamos capaces de relacionar éstas con las derivadas.

Tomemos un argumento x cualquiera dentro del intervalo (x_0, x_n) , no necesariamente uno de los x_k . De la definición de diferencia dividida se escribe la siguiente tanda de identidades:

$$\begin{aligned} y(x) &= y_0 + (x - x_0) y(x, x_0) \\ y(x, x_0) &= y(x_0, x_1) + (x - x_1) y(x, x_0, x_1) \\ &\dots\dots\dots \\ y(x, x_0, x_1, \dots, x_{n-1}) &= y(x_0, \dots, x_n) + (x - x_n) y(x, x_0, \dots, x_n) \end{aligned} \quad [55]$$

Una sencilla manipulación algebraica, que se deja a cargo del lector, conduce a:

$$\begin{aligned} y(x) &= y_0 + (x - x_0) y(x_0, x_1) + (x - x_0)(x - x_1) y(x_0, x_1, x_2) + \dots \\ &+ (x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) y(x_0, x_1, \dots, x_n) + (x - x_0) \dots (x - x_n) y(x, x_0, x_1, \dots, x_n) \end{aligned} \quad [56]$$

En [56] los $n + 1$ primeros sumandos son ya el polinomio de colocación [54], asimilándose el último sumando al término de error de esta aproximación polinómica. Por comparación entre este término y [15] establecemos:

$$y(x, x_0, x_1, \dots, x_n) = \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad [57]$$

que nos relaciona diferencias divididas con derivadas. Encontramos entonces (Ejercicio 8c):

$$\Delta^n y_0 = y^{(n)}(\xi) \cdot h^n \quad [58]$$

que nos servirá en el análisis siguiente.

d) El comportamiento de $\Delta^n y_0$ cuando $n \rightarrow \infty$ puede analizarse con ayuda de la expresión [58]. Es bastante intuitivo esperar que en una tabla de diferencias a órdenes elevados $\Delta^n y_0$ tienda a anularse cuando el espaciado h se hace más y más pequeño. Sin embargo, esto no es cierto en general pues tomando límites en [58]:

$$\lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ h \rightarrow 0}} \Delta^n y_0 = \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ h \rightarrow 0}} y^{(n)}(\xi) h^n \quad [59]$$

con lo que sólo si todas las derivadas $y^{(n)}(\xi)$ están acotadas independientemente de n , podremos garantizar la impresión intuitiva anterior:

$$\lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ h \rightarrow 0}} \Delta^n y_0 = 0 \quad [60]$$

Si esto no fuera así, el comportamiento de $\Delta^n y_0$ será decreciente al principio, para convertirse a partir de un determinado n en fuertemente oscilatorio (Ejercicio 9).

Bibliografía

1. APOSTOL, T. M., *Análisis Matemático*, Reverté, Barcelona, 1972, capítulos 13 y 15.
2. PRESS, W. H.; FLANNERY, B. P.; TEUKOLSKY, S. A., y VETTERLING, W. T., *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, Cambridge, 1988, capítulo 3.
3. RALSTON, A., *Introducción al Análisis Numérico*, Limusa-Wiley, México, 1970, capítulos 2 y 3.
4. RICE, J. R., *Numerical Methods, Software and Analysis*, McGraw-Hill, Nueva York, 1983, capítulos 4 y 5.
5. SCHEID, F., *Análisis Numérico*, McGraw-Hill, México, 1972, capítulos 2-11.
6. STROUD, A. H., *Numerical Quadrature and Solution of Ordinary Differential Equations*, Springer-Verlag, Nueva York, 1974, capítulo 2.

EJERCICIOS DE AUTOCOMPROBACION

1. Discutir la existencia y unicidad del polinomio de tercer grado $p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$ que ajuste a una función $y(x)$ en tres puntos arbitrarios: (x_1, y_1) , (x_2, y_2) , (θ, y_3) .
2. a) Calcular la primera diferencia de $y_k = z_k \cdot t_k$.
b) Demostrar que cuando h/x_k se hace muy pequeño entonces $\Delta(\ln x_k)$ tiende a h/x_k ($\ln =$ logaritmo neperiano).
3. Obtener el diagrama básico de propagación de errores en una tabla de diferencias que tenga dos valores afectados de error $y_3 + \varepsilon$ e $y_6 - \delta$.
4. a) Demostrar utilizando polinomios factoriales la relación entre coeficientes binómicos:

$$\binom{k+1}{n+1} = \binom{k}{n} + \binom{k}{n+1}$$

- b) Obtener las diferencias $\Delta^n k^{(n)}$ y $\Delta^{n+1} k^{(n)}$ ($n > 0$).
 - c) Determinar Δ y Δ^2 para el polinomio $3k^2 + 2k + 1$.
 - d) Hallar una función y_k para la que $\Delta y_k = k^4$.
5. Demostrar por inducción la relación [34].
 6. a) Obtener las relaciones que ligan entre sí a Δ, E y ∇ .

b) Demostrar las relaciones:

$$\Delta^k = \sum_{i=0}^k (-1)^i \binom{k}{i} E^{k-i}$$

$$E^k = \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} \Delta^i$$

c) Comprobar la linealidad de ∇ , μ y δ , así como la conmutatividad de sus productos dos a dos.

7. Comprobar que la fórmula de Stirling [50] efectúa en la tabla adjunta la selección de valores señalada.

k	x_k	y_k	Δ	Δ^2	Δ^3	Δ^4
-2	1	2				
-1	2	-2	-4			
0	3	1	3	7	-13	26
1	4	-2	-3	7	13	
2	5	2	4			

Diagrama de flechas circulares que muestra la selección de valores para la fórmula de Stirling:

- Una flecha va de $y_0 = 1$ a $\Delta^3 = -13$.
- Una flecha va de $y_1 = -2$ a $\Delta^2 = 7$.
- Una flecha va de $y_2 = 2$ a $\Delta = 3$.
- Una flecha va de $\Delta^3 = -13$ a $\Delta^4 = 26$.
- Una flecha va de $\Delta^2 = 7$ a $\Delta^3 = -13$.
- Una flecha va de $\Delta = 3$ a $\Delta^2 = 7$.

8. a) Comprobar que $y(x_0, x_1, x_2) = y(x_2, x_0, x_1)$.

b) Demostrar por inducción la relación [53].

c) Demostrar la relación [58].

9. a) Un gas ideal obedece a la ecuación de estado $P \cdot V = 1$. Analizar el comportamiento esperado para $\Delta^n P_0$ en la tabla de diferencias de la presión cuando $n \rightarrow \infty$, y se toma un espaciado h en el volumen V cada vez más pequeño.

b) Para la función $y = \sin x$ ¿qué valor se daría a la diferencia dividida de argumentos iguales $y(x_0, x_0)$?

SOLUCIONES A LOS EJERCICIOS DE AUTOCOMPROBACION

1. El problema está aparentemente bien determinado, hay tres incógnitas (a_0, a_1, a_3) y pueden escribirse tres ecuaciones:

$$y_1 = a_0 + a_1x_1 + a_3x_1^3$$

$$y_2 = a_0 + a_1x_2 + a_3x_2^3$$

$$y_3 = a_0$$

de donde $a_0 = y_3$ y el par (a_1, a_3) debe satisfacer el sistema:

$$y_1 - y_3 = a_1x_1 + a_3x_1^3$$

$$y_2 - y_3 = a_1x_2 + a_3x_2^3$$

En general este tipo de problemas involucra al denominado determinante de *Vandermonde* (Ralston, 1970).

Sabemos, sin embargo, que los sistemas lineales no siempre tienen solución única. Esto sí será así cuando el rango de la matriz de coeficientes coincida con el de la matriz ampliada con los términos independientes y, además, este rango sea igual al número de incógnitas (2 en nuestro caso):

$$\text{rng} \begin{pmatrix} x_1 & x_1^3 \\ x_2 & x_2^3 \end{pmatrix} = \text{rng} \begin{pmatrix} y_1 - y_3 & x_1 & x_1^3 \\ y_2 - y_3 & x_2 & x_2^3 \end{pmatrix}$$

Consecuentemente, si el determinante de la matriz de coeficientes es distinto de cero, la solución es única (rango = 2):

$$\begin{vmatrix} x_1 & x_1^3 \\ x_2 & x_2^3 \end{vmatrix} = x_1 x_2 (x_2^2 - x_1^2) \neq 0$$

lo que exige que simultáneamente:

$$x_1 \neq 0 \quad ; \quad x_2 \neq 0 \quad ; \quad x_1 \neq \pm x_2$$

Nótese que en el caso de solución múltiple con $x_1 = 0$ ó $x_2 = 0$, se sigue necesariamente $y_1 = y_3$ ó $y_2 = y_3$, dado que las funciones polinómicas son monovaluadas. En caso contrario tendríamos incompatibilidad y no habría solución alguna. De forma similar puede analizar el caso $x_1 = \pm x_2$, pero estas discusiones no ofrecen nada de interés sobre el problema de la unicidad del polinomio.

Como se ve, la existencia y unicidad de un polinomio de ajuste va ligada a: la forma del polinomio, el número de puntos de ajuste y los valores de las abscisas y ordenadas de tales puntos.

2. a) Aplicando la definición:

$$\Delta y_k = \Delta(z_k \cdot t_k) = z_{k+1} \cdot t_{k+1} - z_k \cdot t_k$$

de donde sumando y restando $z_k t_{k+1}$ obtenemos:

$$\begin{aligned} \Delta y_k &= z_{k+1} \cdot t_{k+1} - z_k \cdot t_{k+1} + z_k \cdot t_{k+1} - z_k \cdot t_k = \\ &= t_{k+1}(z_{k+1} - z_k) + z_k(t_{k+1} - t_k) = t_{k+1} \Delta z_k + z_k \Delta t_k \end{aligned}$$

expresión que recuerda a la derivada de un producto.

b) Bastará con demostrar que:

$$A = \lim_{h/x_k \rightarrow 0} \frac{\Delta \ln x_k}{h/x_k} = 1 \quad (\text{infinitésimos equivalentes})$$

lo que se hace como sigue:

$$\begin{aligned} A &= \lim_{h/x_k \rightarrow 0} \frac{\ln(x_k + h) - \ln(x_k)}{h/x_k} = \lim_{h/x_k \rightarrow 0} \frac{\ln(1 + h/x_k)}{h/x_k} = \left\{ y = \frac{h}{x_k} \right\} = \\ &= \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\ln(1 + y)}{y} = \lim_{y \rightarrow 0} \ln(1 + y)^{1/y} = \ln \left[\lim_{y \rightarrow 0} (1 + y)^{1/y} \right] = \ln e = 1 \end{aligned}$$

3. El diagrama pedido tendría la forma:

y_k	Error	Δ	Δ^2	Δ^3	Δ^4
y_0	0	0			
y_1	0	0	0		
y_2	0	ε	ε	ε	-4ε
y_3	ε	ε	-2ε	-3ε	6ε
y_4	0	$-\varepsilon$	ε	3ε	$-\delta - 4\varepsilon$
y_5	0	0	$-\delta$	$-\delta - \varepsilon$	$4\delta + \varepsilon$
y_6	$-\delta$	$-\delta$	2δ	3δ	-6δ
y_7	0	δ	$-\delta$	-3δ	4δ
y_8	0	0	0	δ	$-\delta$
y_9	0	0	0	0	
y_{10}	0	0	0		

Sería aquí fácil reconocer, por las propagaciones cónicas y las alternancias de signo, los datos erróneos partiendo de la tabla. Cuanto más separados estén los datos erróneos, tanto más rápido será identificarlos. Por el contrario, si están próximos (y_3 e y_5 , por ejemplo) la cuestión es menos inmediata. En el tema siguiente veremos cómo proceder en estos casos.

4. a) Para demostrar la relación:

$$\binom{k+1}{n+1} = \binom{k}{n} + \binom{k}{n+1}$$

desarrollaremos con polinomios factoriales la expresión:

$$\begin{aligned} \binom{k+1}{n+1} - \binom{k}{n+1} &= \frac{(k+1)^{(n+1)}}{(n+1)!} - \frac{k^{(n+1)}}{(n+1)!} = \\ &= \frac{\Delta k^{(n+1)}}{(n+1)!} = \frac{(n+1)k^{(n)}}{(n+1)!} = \frac{k^{(n)}}{n!} = \binom{k}{n} \end{aligned}$$

llegando al resultado buscado.

b) Por ser $k^{(n)}$ un polinomio en k de grado n (>0), la diferencia n -ésima será el análogo a la derivada n -ésima de tal polinomio:

$$\Delta^n k^{(n)} = \Delta^{n-1}(\Delta k^{(n)}) = \Delta^{n-1}[nk^{(n-1)}] = \dots = n(n-1)\dots 2 \cdot 1 = n!$$

En consecuencia:

$$\Delta^{n+1} k^{(n)} = \Delta(n!) = 0$$

c) La primera operación será expresar $3k^2 + 2k + 1$ en términos de los polinomios factoriales $k^{(2)}$, $k^{(1)}$. Con los números de Stirling de segunda clase se tiene:

$$\begin{aligned} k^2 &= k^{(1)} + k^{(2)} \\ k &= k^{(1)} \end{aligned}$$

y $p(k)$ se transforma en:

$$p(k^{(1)}) = 3k^{(2)} + 5k^{(1)} + 1$$

De aquí se calculan las diferencias

$$\begin{aligned} \Delta[3k^{(2)} + 5k^{(1)} + 1] &= 6k^{(1)} + 5 = 6k + 5 \\ \Delta^2[3k^{(2)} + 5k^{(1)} + 1] &= 6 \end{aligned}$$

d) Los polinomios factoriales pueden servir para realizar «integra-

ciones finitas», como es este caso. La ecuación en diferencias dada es equivalente a:

$$\Delta y_k = k^4 = k^{(1)} + 7k^{(2)} + 6k^{(3)} + k^{(4)}$$

e invirtiendo la fórmula $\Delta k^{(n)} = nk^{(n-1)}$, encontramos:

$$y_k = \text{Constante} + \frac{1}{2}k^{(2)} + \frac{7}{3}k^{(3)} + \frac{6}{4}k^{(4)} + \frac{1}{5}k^{(5)}$$

en donde incluimos una constante de «integración» por ser $\Delta(\text{constante}) = 0$.

5. Supuesto que [34] es cierta para todos los índices $1 \leq k$, habrá que demostrar que también se cumple para $k + 1$. Comenzaremos escribiendo:

$$y_{k+1} = y_k + \Delta y_k$$

expresión que se transforma en:

$$y_{k+1} = \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} \Delta^i y_0 + \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} \Delta^{i+1} y_0$$

utilizando [34] y propiedades de Δ . El segundo sumatorio de esta última ecuación correrá sobre un nuevo índice $j = i + 1$, con lo que reescribimos:

$$y_{k+1} = \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} \Delta^i y_0 + \sum_{j=1}^{k+1} \binom{k}{j-1} \Delta^j y_0$$

Si ahora se extrae del primer sumatorio el término $i = 0$ y del segundo sumatorio el último término $j = k + 1$, es directo poner:

$$y_{k+1} = y_0 + \sum_{i=1}^k \left[\binom{k}{i} + \binom{k}{i-1} \right] \Delta^i y_0 + \Delta^{k+1} y_0$$

que es sencillamente:

$$y_{k+1} = \sum_{i=0}^{k+1} \binom{k+1}{i} \Delta^i y_0$$

quedando demostrada la relación pedida.

6. a) De las definiciones:

$$\Delta y_k = y_{k+1} - y_k \quad ; \quad E y_k = y_{k+1} \quad ; \quad \nabla y_k = y_k - y_{k-1}$$

se obtiene:

$$\Delta = E - 1 \quad ; \quad \nabla = 1 - E^{-1}$$

pues

$$\begin{aligned} \Delta y_k &= (E - 1)y_k = y_{k+1} - y_k \\ \nabla y_k &= (1 - E^{-1})y_k = y_k - y_{k-1} \end{aligned}$$

b) Del apartado anterior, aplicando el desarrollo de la potencia de un binomio, se llega a:

$$\Delta^k = (E - 1)^k = \sum_{i=0}^k (-1)^i \binom{k}{i} E^{k-i}$$

$$E^k = (\Delta + 1)^k = \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} \Delta^i$$

c) La linealidad de ∇ está contenida en la deducción:

$$\begin{aligned} \nabla(c_1 y_k + c_2 z_k) &= (c_1 y_k + c_2 z_k) - (c_1 y_{k-1} + c_2 z_{k-1}) = \\ &= c_1 (y_k - y_{k-1}) + c_2 (z_k - z_{k-1}) = c_1 \nabla y_k + c_2 \nabla z_k \end{aligned}$$

y análogamente para μ y δ en:

$$\begin{aligned}\mu(c_1 y_k + c_2 z_k) &= \frac{1}{2}(E^{1/2} + E^{-1/2})(c_1 y_k + c_2 z_k) = \\ &= \frac{1}{2}[(c_1 y_{k+1/2} + c_2 z_{k+1/2}) + (c_1 y_{k-1/2} + c_2 z_{k-1/2})] = c_1 \mu y_k + c_2 \mu z_k\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\delta(c_1 y_k + c_2 z_k) &= (E^{1/2} - E^{-1/2})(c_1 y_k + c_2 z_k) = \\ &= [(c_1 y_{k+1/2} + c_2 z_{k+1/2}) - (c_1 y_{k-1/2} + c_2 z_{k-1/2})] = c_1 \delta y_k + c_2 \delta z_k\end{aligned}$$

El producto de estos operadores es conmutativo:

$$\begin{aligned}\nabla \mu y_k &= \nabla \left[\frac{1}{2}(y_{k+1/2} + y_{k-1/2}) \right] = \\ &= \frac{1}{2}[y_{k+1/2} - y_{k-1/2} + y_{k-1/2} - y_{k-3/2}] = \\ &= \frac{1}{2}[y_{k+1/2} - y_{k-3/2}] = \mu \nabla y_k\end{aligned}$$

$$\nabla \delta y_k = \nabla [y_{k+1/2} - y_{k-1/2}] = [y_{k+1/2} - 2y_{k-1/2} + y_{k-3/2}] = \delta \nabla y_k$$

$$\delta \mu y_k = \delta \left[\frac{1}{2}(y_{k+1/2} + y_{k-1/2}) \right] = \frac{1}{2}[y_{k+1} - y_{k-1}] = \mu \delta y_k$$

7. Hay que determinar los valores tabulares:

$$\delta \mu y_0, \quad \delta^2 y_0, \quad \delta^3 \mu y_0, \quad \delta^4 y_0$$

Con un cálculo elemental encontramos:

$$\delta \mu y_0 = \frac{1}{2}(y_1 - y_{-1}) = \frac{1}{2}(\Delta y_0 + \Delta y_{-1})$$

$$\begin{aligned}\delta^2 y_0 &= (E^{1/2} - E^{-1/2})^2 y_0 = (E - 2 + E^{-1})y_0 = \\ &= y_1 - 2y_0 + y_{-1} = \Delta^2 y_{-1}\end{aligned}$$

$$\delta^3 \mu y_0 = \frac{1}{2}(E^{1/2} - E^{-1/2})^3 (E^{1/2} + E^{-1/2})y_0 =$$

$$= \frac{1}{2}(\Delta^3 y_{-2} + \Delta^3 y_{-1})$$

$$\delta^4 y_0 = (E^{1/2} - E^{-1/2})^4 y_0 = \Delta^4 y_{-2}$$

que son los datos marcados en la tabla.

8. a) La comprobación de simetría es trivial. Comencemos expresando $y(x_0, x_1, x_2)$ como:

$$\begin{aligned} y(x_0, x_1, x_2) &= \frac{y(x_1, x_2) - y(x_0, x_1)}{x_2 - x_0} = \frac{\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0} = \\ &= \frac{y_0}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + \frac{y_1}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + \frac{y_2}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \end{aligned}$$

La permutación que pasa de $(0, 1, 2) \rightarrow (2, 0, 1)$, puede descomponerse en: $(0, 1, 2) \rightarrow (2, 1, 0) \rightarrow (2, 0, 1)$, es decir en dos transformaciones sucesivas: intercambio de 2 por 0; intercambio de 0 por 1.

El primer intercambio $2 \leftrightarrow 0$ actúa sobre $y(x_0, x_1, x_2)$:

$$\begin{aligned} y(x_2, x_1, x_0) &= [2 \leftrightarrow 0] y(x_0, x_1, x_2) = \\ &= \frac{y_2}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_0)} + \frac{y_1}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_0)} + \frac{y_0}{(x_0 - x_2)(x_0 - x_1)} \end{aligned}$$

expresión que es idéntica a la anterior:

$$y(x_2, x_1, x_0) = y(x_0, x_1, x_2)$$

Operando de manera análoga con el segundo intercambio $0 \leftrightarrow 1$, se llega a:

$$\begin{aligned} y(x_2, x_0, x_1) &= [0 \leftrightarrow 1] y(x_2, x_1, x_0) = \\ &= \frac{y_2}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} + \frac{y_0}{(x_0 - x_2)(x_0 - x_1)} + \frac{y_1}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_0)} \end{aligned}$$

por lo que:

$$y(x_0, x_1, x_2) = y(x_2, x_1, x_0) = y(x_2, x_0, x_1) = \dots$$

Este resultado es completamente general para diferencias divididas de cualquier orden n .

b) Supuesta cierta la relación

$$y(x_0, x_1, \dots, x_n) = \frac{\Delta^n y_0}{n! h^n}$$

hasta orden n , veamos que también lo es para orden $n + 1$:

$$\begin{aligned} y(x_0, x_1, \dots, x_{n+1}) &= \frac{y(x_1, x_2, \dots, x_{n+1}) - y(x_0, x_1, \dots, x_n)}{x_{n+1} - x_0} = \\ &= \frac{\frac{\Delta^n y_1}{n! h^n} - \frac{\Delta^n y_0}{n! h^n}}{h(n+1)} = \frac{1}{(n+1)! h^{n+1}} (\Delta^n y_1 - \Delta^n y_0) = \frac{\Delta^{n+1} y_0}{(n+1)! h^n} \end{aligned}$$

quedando demostrada por inducción la propiedad.

c) De la ecuación [57] podemos poner:

$$y(x, x_0, x_1, \dots, x_{n-1}) = \frac{y^{(n)}(\xi)}{n!}$$

o lo que es igual, haciendo $x_n = x$ y reordenando:

$$y(x_0, x_1, \dots, x_n) = \frac{y^{(n)}(\xi)}{n!} \quad ; \quad x_0 < \xi < x_n$$

Comparando con b) establecemos:

$$\Delta^n y_0 = h^n \cdot y^{(n)}(\xi)$$

9. a) Utilizaremos el resultado anterior para calcular el límite pedido tomando $x = V$, $y = P$:

$$\lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ h \rightarrow 0}} \Delta^n P_0 = \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ h \rightarrow 0}} \{h^n y^{(n)}(\xi)\}$$

La derivada n -ésima de $P = 1/V$ no está acotada para todo valor de n :

$$P^{(n)}(V) = \frac{(-1)^n n!}{V^{n+1}}$$

y por tanto el límite depende de n :

$$\lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ h \rightarrow 0}} \Delta^n P_0 = \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ h \rightarrow 0}} \left[\frac{(-1)^n \cdot h^n \cdot n!}{V^{n+1}} \right]$$

lo que revela que las primeras diferencias tenderán a hacerse pequeñas al principio para, alcanzado un cierto momento a órdenes elevados, oscilar y crecer desmesuradamente. Queda claro entonces que las diferencias no siempre tienden a cero al crecer el orden, como sería intuitivo esperar.

b) Una diferencia dividida de argumentos iguales puede definirse mediante un límite en el que un argumento tiende al otro:

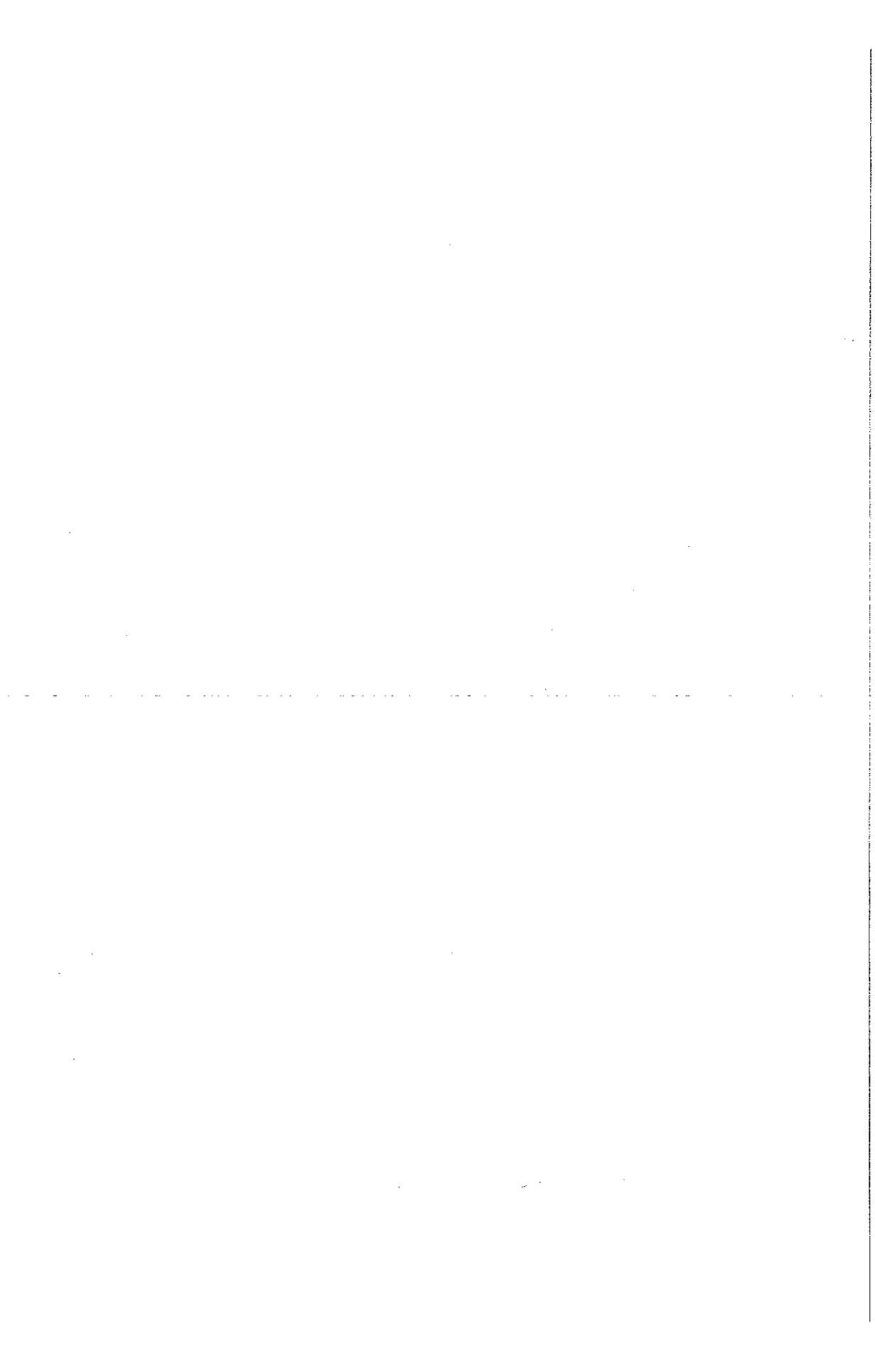
$$y(x_0, x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0} y(x, x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{y(x) - y(x_0)}{x - x_0} = y'(x_0)$$

resultando la derivada de la función en el argumento dado. Para $\text{sen } x$ se tiene:

$$\text{sen}(x_0, x_0) = \cos(x_0)$$

Tema 2

APLICACIONES DE LA APROXIMACION POLINOMICA



En este tema completaremos el conocimiento adquirido sobre la aproximación polinómica de colocación aplicándola a los problemas clásicos: interpolación, extrapolación, derivación e integración numéricas.

La *interpolación* constituye la base del Análisis Numérico convencional debido a las necesidades del cálculo manual. A partir de funciones tabuladas se desea determinar los valores aproximados de la función para argumentos no tabulados. La necesidad de interpolar es, sin embargo, poco frecuente hoy día pues o bien la expresión analítica de la función es conocida y se efectúa el cálculo en ordenador, o bien las tablas numéricas funcionales son tan precisas que una interpolación lineal da ya un resultado muy aceptable. ¿Cuál es la utilidad entonces de estudiar la interpolación? La razón es contundente: las fórmulas de interpolación constituyen, entre otras cosas, el punto de partida para diferenciar e integrar numéricamente. Con esta perspectiva, se tratarán las interpolaciones directa e inversa y la subtabulación. Además consideraremos la estimación de valores de la función fuera del intervalo de ajuste, operación conocida como *extrapolación*, y veremos un ejemplo de aplicación relativo a los calores específicos de sólidos a bajas temperaturas.

La *diferenciación numérica* nos permitirá aproximar las derivadas de una función tabular a través de las derivadas del polinomio de colocación. Esta operación está, generalmente, afectada de gran error. A pesar de sus defectos, la diferenciación numérica convenientemente adaptada resulta útil para resolver ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (Ralston, 1970). Como aplicación trataremos con la ecuación diferencial cuyas soluciones son los polinomios de Hermite, fundamentales en el estudio de la vibración molecular.

La *integración numérica* cierra estas aplicaciones. El proceso consiste en reemplazar la integral definida de una función $y(x)$ en un intervalo $a \leq x \leq b$ por la correspondiente integral del polinomio aproximador $p(x)$, o mejor aún por la de la combinación de polinomios aproximadores de orden no muy elevado (≤ 3) definidos en diferentes subintervalos del $a \leq x \leq b$. A diferencia de la derivación, la integración suele dar resultados bastante buenos. Se revisan varios algoritmos integradores (no necesariamente basados en colocación) y cómo tratar las integrales con singularidades y las fuertemente oscilantes. Para concluir evaluaremos como aplicación la integral de Debye.

1. INTERPOLACION Y EXTRAPOLACION

1.1. Interpolación directa

Una vez resuelto el problema del polinomio de colocación resulta muy simple interpolar, dentro del intervalo de ajuste, el valor de la función para valores no tabulados del argumento. Sea una función definida por $\{(x_k, y_k)\}_{k=0, n}$ con $x_{k+1} - x_k = h = \text{constante}$. Se desea estimar $y(x_j) = y_j$ con $x_m < x_j < x_{m+1}$ ($0 \leq m \leq n - 1$).

Sabemos que el polinomio de colocación es una función del argumento k :

$$p(k) = a_0 + a_1k + a_2k^2 + \dots + a_nk^n \quad [1]$$

donde los coeficientes a_i dependen de la elección del origen de la tabla ($k = 0$). Obtenido el polinomio que más interese, según la situación de x_j , la interpolación para este punto puede realizarse determinando el valor fraccionario k_j del índice k que corresponde a x_j :

$$k_j = \frac{x_j - x_0}{h} \quad ; \quad m < k_j < m + 1 \quad [2]$$

y sustituyendo tal valor en [1]:

$$y(x_j) \simeq p(k_j) = a_0 + a_1k_j + a_2k_j^2 + \dots + a_nk_j^n \quad [3]$$

En el caso de argumentos equiespaciados es claro, de la discusión sobre elección de polinomio en el tema previo, que no resulta muchas veces necesario escoger por adelantado el grado de polinomio aproximador. Aprovechando cálculos anteriores nos bastará con ir añadiendo términos sucesivos de diferencias hasta obtener la precisión deseada. Es común que aproximaciones cuadráticas o cúbicas suministren buenos resultados. Notemos que cuando las diferencias de orden superior tienden a cero puede estimarse el error cometido al realizar aproximaciones truncadas de este tipo.

Si los argumentos están desigualmente espaciados, la interpolación se realiza mediante los polinomios al efecto (Lagrange, etc.). En el caso del polinomio de Lagrange hay que elegir de entrada el grado del polinomio y sustituir en él el valor x_j a interpolar. Tal elección a priori es un inconveniente cuando el grado elegido no es el máximo posible. Por ejemplo, dada una tabla con 10 puntos (x_k, y_k) , la interpolación de la función en $x_4 < x_j < x_5$ podría hacerse usando únicamente los puntos $i = 3, 4, 5, 6$ (tercer grado) despreciando la influencia del resto de los puntos. En otros términos esto quiere decir que el hábito de la curva $y = f(x)$ no se tiene en cuenta completamente, lo que podría resultar nocivo para la estimación. Si incluyéramos más puntos para mejorar ésta, encontraríamos que los cálculos ya realizados no son aprovechables, debiendo empezar de nuevo desde cero. En general, en la medida en que el granulado (espaciado) de la tabla sea muy fino los efectos derivados de tomar pocos puntos serán más y más despreciables. En el cálculo manual estos problemas se presentan en toda su crudeza. Sin embargo, en cálculos con ordenador los inconvenientes mencionados desaparecen en su mayor parte.

Ejercicio de aplicación

Para ilustrar la discusión precedente tomemos la tabla

x	0,10	0,15	0,30	0,35
y	1,10517	1,16183	1,34986	1,41907

que corresponde a la función $y = e^x$, y calculemos $y(x = 0,2)$. Veamos cómo evolucionan los resultados usando interpolación lagrangiana a medida que aumenta el número de puntos incluidos.

Con interpolación lineal entre $x = 0,15$ y $x = 0,30$ obtenemos:

$$y_1(0,2) \simeq \frac{(0,2-0,3)}{(0,15-0,3)} \cdot 1,16183 + \frac{(0,2-0,15)}{(0,3-0,15)} \cdot 1,34986 = 1,22451$$

Si se toman $x = 0,10$; $x = 0,15$; $x = 0,30$ (interpolación cuadrática):

$$y_2(0,2) \simeq \frac{(0,2-0,15)(0,2-0,3)}{(0,1-0,15)(0,1-0,3)} \cdot 1,10517 + \frac{(0,2-0,1)(0,2-0,3)}{(0,15-0,1)(0,15-0,3)} \cdot 1,16183 + \\ + \frac{(0,2-0,1)(0,2-0,15)}{(0,3-0,1)(0,3-0,15)} \cdot 1,34986 = 1,22150$$

Finalmente la aproximación cúbica que utiliza toda la tabla conduce a:

$$y_3(0,2) \simeq \frac{(0,2-0,15)(0,2-0,3)(0,2-0,35)}{(0,1-0,15)(0,1-0,3)(0,1-0,35)} \cdot 1,10517 + \\ + \frac{(0,2-0,1)(0,2-0,3)(0,2-0,35)}{(0,15-0,1)(0,15-0,3)(0,15-0,35)} \cdot 1,16183 + \\ + \frac{(0,2-0,1)(0,2-0,15)(0,2-0,35)}{(0,3-0,1)(0,3-0,15)(0,3-0,35)} \cdot 1,34986 + \\ + \frac{(0,2-0,1)(0,2-0,15)(0,2-0,3)}{(0,35-0,1)(0,35-0,15)(0,35-0,3)} \cdot 1,41907 = 1,22139$$

El valor exacto redondeado a cinco cifras decimales es $y(0,2) = 1,22140$ y la aproximación mejora al avanzar en la sucesión y_1, y_2, y_3 :

n	y_n	$ y_n - y_{\text{exacto}} $
1	1,22451	0,00311
2	1,22150	0,00010
3	1,22139	0,00001

Este comportamiento es, salvo en casos patológicos (funciones fuertemente oscilantes), el esperado generalmente.

Para terminar, consideremos ahora el efecto del granulado de la tabla sobre $y(0,2)$ procediendo a interpolar linealmente este valor entre los puntos extremos de la tabla:

$$y_{1'}(0,2) \simeq \frac{(0,2-0,35)}{(0,1-0,35)} \cdot 1,10517 + \frac{(0,2-0,1)}{(0,35-0,1)} \cdot 1,41907 = 1,23073$$

estimación que arroja un error superior a cualquiera de los anteriores pues (en términos geométricos) se ha sustituido un arco de curva por un segmento de recta:

$$|y_{1'} - y_{\text{exacto}}| = 0,00933$$

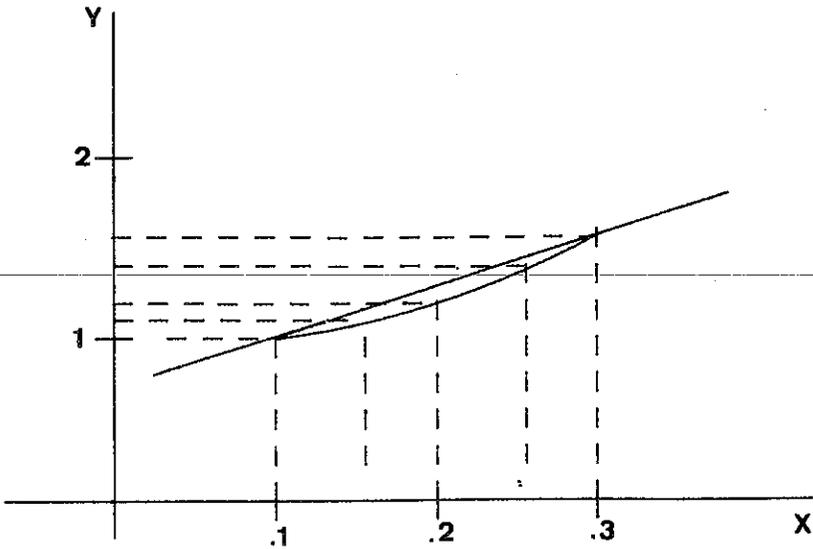


Figura 1.—Gráfica del ejercicio de aplicación de interpolación lagrangiana.

1.2. Subtabulación

Siguiendo en la misma línea se desea, dada una tabla, ampliarla rellenando los huecos entre cada dos x_k consecutivos tanto como queramos. Esta operación de interpolación múltiple se denomina *subtabulación*, y es un asunto directo de llevar a cabo con los polinomios que ya conocemos (Ejercicio 1).

1.3. Interpolación inversa

Se plantea un problema diferente si lo que se busca es determinar el valor del argumento x_m que corresponde a un valor y_m no tabulado. Este es el problema de la *interpolación inversa* que se resuelve intercambiando los papeles entre x e y para emplear un polinomio de Lagrange que coloque los puntos (y_k, x_k) con argumentos desigualmente espaciados y_k (Ejercicio 2).

1.4. El error en interpolación

Las fuentes principales de error son las típicas en Análisis Numérico: errores de *entrada*, de *redondeo* y de *algoritmo*. Su influencia conjunta sobre el resultado final es determinable sólo hasta un cierto punto, quedando limitados a dar estimaciones del error final. Consideremos cada una de las fuentes anteriores.

a) Errores de entrada

Los datos funcionales y_k vienen normalmente afectados de cierto error ε_k (experimental, redondeos, etc.). A este nivel se puede dar una estimación del error global de entrada a través de los polinomios cota del de colocación a la tabla dada $p(+\varepsilon)$, $p(-\varepsilon)$ y calculando $|p(+\varepsilon) - p(-\varepsilon)|$.

b) Errores de redondeo

Son los derivados de la necesidad de trabajar con la representación decimal, ya que el número de cifras decimales máximo que admiten las máquinas para calcular es, forzosamente, finito. Notemos que existen ya ordenadores que trabajan con 32, 64 o más dígitos significativos y lo que digamos a continuación será tanto más irrelevante cuanto mayor sea este número. Obviamente todos los excesos que se produzcan por encima de ese número máximo, como resultado de las operaciones aritméticas, se pierden. Esto puede llevar a errores en las estimaciones numéricas finales que pueden resultar significativos cuanto mayor sea el número de operaciones a realizar (en cálculos habituales en Química Cuántica, por ejemplo, tal número se cuenta por millones).

Puede ser ilustrativo considerar el siguiente caso. Un cálculo químico cuántico (CNDO/2) para la molécula de CCl_4 en su estado electrónico fundamental, si se realiza con ocho dígitos significativos (precisión simple) da un valor para el momento dipolar distinto de cero a partir de la cuarta cifra decimal. Utilizando dieciséis dígitos (doble precisión) se obtiene un momento dipolar nulo, como debe, a ocho cifras significativas.

El análisis del error de redondeo es de una alta complejidad y no hay resultados teóricos completamente fiables, sino esquemas de trabajo aproximado (aproximación probabilista, teoría del dígito más significativo, etc.) (Ralston, 1970; Rice, 1983). El error de redondeo es común a todos los cálculos numéricos y su importancia es relativa a cada uno de ellos. En interpolación y dadas las facilidades de cálculo actuales (calculadoras de sobremesa trabajan con 12 ó 13 dígitos significativos) este error suele ser despreciable comparado con los de entrada y algoritmo.

c) *Error de algoritmo*

Por error de algoritmo entendemos al derivado de tomar una técnica numérica específica para resolver un problema en particular. En nuestro caso hemos elegido como polinomio aproximador el de colocación, aunque ya sabemos que éste no es el único medio posible. Distinguido esto, el error típico asociado a las aproximaciones polinómicas es el error de truncación. Este es el error cometido al aceptar como aproximación a $y(x)$ un polinomio $p_n(x)$ de grado n , y vendrá dado por la expresión ya conocida:

$$|y(x) - p_n(x)| = \left| \frac{\pi(x)}{(n+1)!} y^{(n+1)}(\xi) \right| ; x_0 < \xi < x_n \quad [4]$$

que escribimos en valor absoluto. Aunque el valor ξ es desconocido, la fórmula anterior resulta muy útil para obtener cotas del error cometido.

Ejercicio de aplicación

Ocupémonos ahora de dar una cota para el error de truncamiento cometido al aproximar una función tabular mediante un polinomio de avance de Newton de segundo grado.

El error de truncamiento vendrá dado por:

$$|y(x) - p_2(x)| = \left| \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)}{3!} y^{(3)}(\xi) \right|$$

expresión que en términos de k es:

$$|y(x) - p_2(x)| = \left| \frac{k(k-1)(k-2)}{3!} h^3 y^{(3)}(\xi) \right|$$

Si no se conoce nada sobre $y(x)$, sólo podremos acotar el polinomio en k : dentro del intervalo $0 \leq k \leq 2$. Para ello bastará con calcular los máximos y mínimos de p_k y quedarnos con el mayor de ellos en valor absoluto. Un cálculo sencillo da:

$$k_{\min} = 1 + \frac{1}{\sqrt{3}} \quad ; \quad p(k_{\min}) = -\frac{2\sqrt{3}}{9}$$

$$k_{\max} = 1 - \frac{1}{\sqrt{3}} \quad ; \quad p(k_{\max}) = \frac{2\sqrt{3}}{9}$$

por lo que para todo el intervalo (x_0, x_2) se acotará el error en la forma:

$$|y(x) - p_2(x)| \leq \frac{2\sqrt{3}}{9} h^3 \cdot |y^{(3)}(\xi)|$$

Nótese que el valor del espaciado h puede optimizarse para mantener el error de interpolación tan bajo como sea preciso. Esto implicaría realizar más «experimentos» para construir la tabla si se desea mantener la aproximación cuadrática. El término de la derivada de la función $|y^{(3)}(\xi)|$ sólo puede acotarse cuando $y(x)$ es conocida (Ejercicio 3). En otro caso lo más que es posible hacer es dar estimaciones muy dudosas de esa cantidad (derivación numérica).

1.5. Extrapolación

La *extrapolación* consiste en predecir los valores de la función para argumentos x situados fuera del intervalo de ajuste conocido. Hasta aquí se ha supuesto que la función se comporta suficientemente bien (suavidad, continuidad, etc.) dentro del intervalo de ajuste. De este modo la interpolación de valores se efectúa vía polinomios de colocación que son aproximaciones suaves (¡los polinomios de grado elevado presentan oscilaciones fuertes en los extremos del intervalo!) en respuesta a que son siempre infinitamente derivables. En consecuencia, el proceso de interpolación es casi siempre controlable por lo que respecta al error que se comete. Por el contrario, el error en extrapolación será crítico, pues $\pi(x) = (x - x_0) \dots (x - x_n)$ en [4] suele alcanzar valores exageradamente grandes fuera del intervalo de ajuste.

La validez del polinomio de colocación está restringida al intervalo de ajuste, y las estimaciones fuera de él, en principio, carecen de sentido. La extrapolación sólo posee un significado definido cuando la forma funcional $y = f(x)$ es conocida por argumentos ajenos al Análisis Numérico. En estos casos la tabla numérica que define a la función sirve para determinar los coeficientes, o los parámetros ajustables, de la forma funcional anterior de modo que se reproduzca el fenómeno particular que estudiamos. A partir de ahí es fiable realizar extrapolaciones, ya que la ley física está perfectamente definida, siendo los errores los habituales en interpolación (Ejercicio 4).

2. EJEMPLO DE APLICACION: CALOR ESPECIFICO DE SOLIDOS A BAJA TEMPERATURA

La siguiente tabla recoge valores del calor específico a volumen constante del sodio en función de la temperatura absoluta:

T (K)	1,0	1,3	1,6	1,9	2,2	2,5	2,8
$10^3 C_v$ (jul/mol · K)	1,863	2,864	4,111	5,984	8,283	11,128	14,659
	3,1	3,4	3,7				
	18,936	24,039	30,048				

Existen dos errores que vamos a localizar y corregir, así como calcularemos el polinomio en T que reproduzca dicha tabla para interpolar en $T = 2,1$ K.

Empecemos calculando la tabla de diferencias:

$T(K)$	$C_v \cdot 10^3$	Δ	Δ^2	Δ^3	Δ^4
1,0	1,863				
1,3	2,864	1,001			
1,6	4,111	1,247	0,246		
1,9	5,984	1,873	0,626	0,380	
2,2	8,283	2,299	0,426	-0,200	-0,580
2,5	11,128	2,845	0,546	0,120	0,320
2,8	14,659	3,531	0,686	0,140	0,020
3,1	18,936	4,277	0,746	0,060	-0,080
3,4	24,039	5,103	0,826	0,080	0,020
3,7	30,048	6,009	0,906	0,080	0,000

Por las alternancias de signo formulamos la hipótesis de que los datos erróneos están en $T = 1,6 K$ y $T = 2,2 K$. Notamos que ambos son impares, por lo que cabe pensar que la tabla reducida de los datos pares será correcta. Calculemos la tabla de diferencias asociada a los datos pares:

$T(K)$	$C_v \cdot 10^3$	Δ	Δ^2	Δ^3
1,3	2,864			
1,9	5,984	3,120		
2,5	11,128	5,144	2,024	0,640
3,1	18,936	7,808	2,664	0,640
3,7	30,048	11,112	3,304	

que vemos da constancia en las terceras diferencias $\Delta^3 = 0,640$ y se confirman así nuestras hipótesis.

Concluimos de lo anterior dos cosas: que el polinomio en T será de grado tres ($n = 3$), y que la tabla de diferencias de los datos impares será tal que también mostrará la misma constancia en Δ^3 . Esto se debe a que el coeficiente conductor (el del término cúbico) del polinomio de los datos pares debe coincidir con el del polinomio de los datos impares.

Dando marcha atrás en los cálculos, evaluando los errores ε y δ en los datos erróneos, encontramos que los valores correctos son:

$$T = 1,6 \text{ K} \text{----} C_v(\text{erróneo}) \times 10^3 = 4,111 \quad C_v(\text{correcto}) \times 10^3 = 4,211$$

$$T = 2,2 \text{ K} \text{----} C_v(\text{erróneo}) \times 10^3 = 8,283 \quad C_v(\text{correcto}) \times 10^3 = 8,263$$

Una vez corregidos estos valores es trivial obtener el polinomio en T vía método de avance de Newton:

$$C_v = (4,93T^3 + 13,7T) \times 10^{-4} \text{ jul}/(\text{mol} \cdot \text{K})$$

de donde interpolamos en $T = 2,1 \text{ K}$ (es el polinomio exacto):

$$C_v(T = 2,1) = 7,443 \times 10^{-3} \text{ jul}/(\text{mol} \cdot \text{K})$$

La expresión obtenida es la ley de Debye-Sommerferld:

$$C_v = \alpha T^3 + \gamma T = \frac{12\pi^4 R}{5\theta^3} T^3 + \gamma T$$

que incluye dos contribuciones al calor específico del sólido a bajas temperaturas: la vibracional (término T^3) y la debida a los electrones de conducción (término T). De los resultados obtenidos aquí para el sodio (superconductor), podemos calcular su temperatura característica de Debye $\theta = 158 \text{ K}$ y la constante electrónica $\gamma = 1,37 \times 10^{-3} \text{ jul}/(\text{mol} \cdot \text{K}^{-2})$. La ecuación que nos ocupa es aplicable al sodio en el intervalo 0 K-4K (Weast y Astle, 1981) (Ejercicio 5).

3. DIFERENCIACION NUMERICA

Las derivadas de una función $y(x)$ pueden estimarse a partir de las aproximaciones polinómicas $p_n(x)$ a $y(x)$. Basta para ello admitir que $y'(x) \simeq p'_n(x)$; $y''(x) \simeq p''_n(x)$; y así sucesivamente. Con el polinomio de colocación de Newton:

$$p_k = y_0 + k\Delta y_0 + \frac{k(k-1)}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{k(k-1)(k-2)}{6}\Delta^3 y_0 + \dots$$

se obtiene la derivada:

$$p'_k = \frac{dp_k}{dk} = \Delta y_0 + \left(k - \frac{1}{2}\right)\Delta^2 y_0 + \frac{3k^2 - 6k + 2}{6}\Delta^3 y_0 + \dots \quad [5]$$

o en términos de $x(k = (x_k - x_0)/h)$:

$$p'(x) = \frac{dp}{dx} = \frac{dp}{dk} \cdot \frac{dk}{dx} = \frac{1}{h} \cdot p'_k \quad [6]$$

Análogamente, las derivadas segunda y tercera son:

$$p''_k = \frac{d^2 p_k}{dk^2} = \Delta^2 y_0 + (k-1)\Delta^3 y_0 + \frac{6k^2 - 18k + 11}{12}\Delta^4 y_0 + \dots \quad [7]$$

$$p''(x) = \frac{1}{h^2} \cdot p''_k \quad [8]$$

$$p'''_k = \frac{d^3 p_k}{dk^3} = \Delta^3 y_0 + \frac{2k-3}{2}\Delta^4 y_0 + \dots \quad [9]$$

$$p'''(x) = \frac{1}{h^3} \cdot p'''_k \quad [10]$$

y así sucesivamente. Lo mismo puede hacerse para otros polinomios de colocación.

El análisis del error aquí presenta una nueva característica con respecto a los errores en interpolación. Por supuesto, están los errores de entrada, truncamiento y redondeo, pero además existe un fuerte argumento en contra de la diferenciación numérica con polinomios de colocación. La razón estriba en que si bien la distancia entre $y(x)$ y $p_n(x)$ (error de interpolación) puede ser pequeña, no tiene por qué suceder lo mismo con las derivadas y' , p'_n . En el primer caso tenemos diferencias entre ordenadas, en tanto que en el segundo las diferencias son entre las pendientes de las curvas. Claramente, este comportamiento se ve agravado cuanto mayor es el orden de derivación. Aclaremos este comportamiento con un sencillo ejemplo.

Ejercicio de aplicación

Considérense las funciones $y = x^{1/3}$ y el polinomio $p_1 = x$ dentro del intervalo $-1 \leq x \leq 1$. p_1 es un polinomio de colocación a $y(x)$ en los puntos $x = -1, 0, 1$. Dentro del intervalo la máxima distancia entre p_1 e y es:

$$d_M = |x^{1/3} - x|_M = \left\{ \frac{1}{3}x^{-2/3} - 1 = 0 \Rightarrow x = \pm 0,19245 \right\} = 0,38490$$

$$d_M(x = 0) = 0$$

mientras que la distancia entre sus sucesivas derivadas evoluciona en la forma:

$$d_{M'} = \left| \frac{1}{3}x^{-2/3} - 1 \right|_{M'} = \left\{ -\frac{2}{9}x^{-5/3} = 0 \Rightarrow \right.$$

$$\Rightarrow \text{ningún } x \text{ del intervalo lo cumple} \left. \right\}$$

$$x = 0 \Rightarrow d_{M'} \rightarrow +\infty$$

$$d_{M''} = \left| -\frac{2}{9}x^{-5/3} \right|_{M''} = \{x = 0\} = +\infty$$

.....

La existencia de singularidad en las derivadas de $y(x)$ no es la única causa por la que se da este efecto. Hay ejemplos (Scheid, 1972) en los que se

pone de manifiesto también sin recurrir a singularidades ($y = e^x$, $\text{sen } x$, etcétera).

Con los resultados obtenidos en este epígrafe cabría pensar que a mayor grado del polinomio de colocación los efectos de error en las derivadas se trasladarían a órdenes más y más altos, no dañando así el cálculo de las primeras derivadas de modo grave. Esta impresión es, no obstante, errónea, pues los polinomios de colocación de grado elevado suelen presentar con frecuencia comportamientos no deseados (gran error) en las regiones extremas del ajuste. Un ejemplo clásico es el de Runge (Rice, 1983), en el que se representa a la función:

$$y(x) = \frac{1}{1+x^2} \quad ; \quad -5 \leq x \leq 5$$

por polinomios de avance de Newton. Para grado $n = 10$, el error de ajuste en el intervalo no excede de 2, en tanto que para $n = 16$ se hace de 14, alcanzándose estos valores en las regiones extremas $-5 \leq x \leq -4$ y $4 \leq x \leq 5$. Es sencillo entonces imaginar lo que sucedería con las derivadas.

La consideración del resto de las fuentes de error, redondeo, truncamiento, entrada, es análoga a lo ya visto incluyendo ahora algunas peculiaridades. Los errores de entrada son dominantes en estos cálculos, pues el algoritmo los amplifica. Basta observar las expresiones [5]-[10] para ver que hay divisiones por potencias enteras positivas del espaciado h , que suele ser $0 < h < 1$. Por otra parte, el error de truncamiento, como se deduce de [4], es directamente proporcional a potencias enteras positivas de h . Tenemos entonces dos factores, dependientes de h en forma opuesta, que condicionan en buena medida el error final. En estas circunstancias, a veces, es posible optimizar la combinación de ambos efectos (optimización del paso h) para lograr un error tan pequeño como se pueda.

Las dificultades que presenta este algoritmo han propiciado el desarrollo de otros métodos para derivar numéricamente: polinomios mini-máx, osculación, series trigonométricas, etc. En el Tema 4 nos ocuparemos de las series trigonométricas.

4. EJEMPLO DE APLICACION: ECUACION DIFERENCIAL DE LOS POLINOMIOS DE HERMITE

Los polinomios de Hermite $H_n(\eta)$ ($n = \text{grado}$) intervienen en la construcción de las funciones de onda del oscilador armónico monodimensional (Schiff, 1981):

$$\psi_n(\eta) = N_n H_n(\eta) \exp[-\eta^2/2] \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

y son soluciones de una ecuación diferencial del tipo:

$$(d^2H/d\eta^2) + b\eta(dH/d\eta) + cH = 0$$

con coeficientes numéricos b y c enteros no nulos.

En la tabla siguiente aparecen valores, redondeados a cinco cifras decimales, asociados a varios H_n :

η	0,092	0,184	0,276	0,368	0,460	0,552
$H_0(\eta)$	1,96614	1,86458	1,69530	1,45830	1,15360	0,78118
$H_1(\eta)$	1,09777	2,15816	3,14380	4,01731	4,74131	5,27843
$H_2(\eta)$	11,59487	10,39325	8,43640	5,79308	2,55960	-1,14028

Utilizando diferenciación numérica trataremos de inferir la ecuación diferencial de esta clase polinómica.

El primer paso será efectuar las tablas de diferencias de H_0, H_1 y H_2 . Por brevedad desarrollaremos únicamente los cálculos asociados a H_1 . Encontramos la tabla:

η	$H(\eta)$	Δ	Δ^2	Δ^3	Δ^4
0,092	1,09777				
		1,06039			
0,184	2,15816		-0,07475		
		0,98564		-0,03738	
0,276	3,14380		-0,11213		0,00000
		0,87351		-0,03738	
0,368	4,01731		-0,14951		0,00001
		0,72400		-0,03737	
0,460	4,74131		-0,18688		
		0,53712			
0,552	5,27843				

En este caso $\Delta^4 = 0$, y por tanto H_j es un polinomio de tercer grado (H_3). Procediendo de igual modo obtendríamos $H_i = H_2$ (segundo grado) y $H_m = H_4$ (cuarto grado).

Hay que calcular ahora b y c para cada caso, recordando que sólo tienen sentido como solución valores enteros. De nuevo mostraremos los cálculos para $H_{j=3}$, dejando al lector la realización de los restantes.

Al ser dos incógnitas necesitaremos dos ecuaciones lineales en ellas, que se obtienen de:

$$\begin{cases} H_3''(\eta_0) + b\eta_0 H_3'(\eta_0) + cH_3(\eta_0) = 0 \\ H_3''(\eta_1) + b\eta_1 H_3'(\eta_1) + cH_3(\eta_1) = 0 \end{cases}$$

Los coeficientes numéricos H_3'' , H_3' , H_3 , se calculan con ayuda del polinomio de avance de Newton y utilizando al máximo la tabla de diferencias. Estas operaciones quedan resumidas en:

k	η	H_3''	H_3'	H_3
0	0,092	-4,41517	11,79679	1,09777
1	0,184	-8,83152	11,18745	2,15816

resultando finalmente:

$$\tilde{b} = -2,0158888 \quad ; \quad \tilde{c} = 6,0149427$$

que tras truncar a valor entero:

$$b = -2 \quad ; \quad c = 6$$

Es interesante notar la magnitud del error global.

De igual manera se obtendrían los parámetros b y c de H_2 y H_4 . Recolectando toda la información:

	H_2	H_3	H_4
b	-2	-2	-2
c	4	6	8

de donde concluimos que la ecuación diferencial de Hermite podría ser muy bien, como de hecho es, de la forma:

$$\frac{d^2 H_n}{d\eta^2} - 2\eta \frac{dH_n}{d\eta} + 2nH_n = 0$$

Más adelante (Tema 4) volveremos sobre estos polinomios.

Aunque la aplicación desarrollada es sencilla (dos incógnitas, H_n es un polinomio, etc.), ilustra la manera de proceder en situaciones mucho más generales. Por ejemplo, supongamos un cierto fenómeno del que conocemos la forma general de la ecuación diferencial que lo rige y una serie de resultados numéricos experimentales. Siguiendo el método mostrado podemos intentar aproximar la forma particular de la ecuación diferencial. Recordemos que el error inherente al procedimiento es grande por lo que habrá que trabajar con cautela.

5. INTEGRACION NUMERICA

La aproximación polinómica vista va a llevarnos a obtener fórmulas aproximadas para *integrar numéricamente* funciones que no poseen integral analítica. Nos ceñiremos al caso de una variable, dejando las

integrales múltiples para más adelante (Tema 7). Como antes reemplazaremos la función a integrar $y(x)$ por un polinomio $p_n(x)$:

$$\int_a^b y(x) dx \simeq \int_a^b p_n(x) dx \quad [11]$$

siendo los resultados de este tipo de operación bastante aceptables en muchos casos.

Empecemos obteniendo algoritmos de integración usando el polinomio de Newton (avance) con grados crecientes y argumentos equiespaciados, siendo los límites $a = x_0$ y $b = x_n$ puntos tabulares (fórmulas cerradas). Con una colocación de primer grado $n = 1$ se tiene:

$$\int_{x_0}^{x_1} y(x) dx \simeq \int_{x_0}^{x_1} p_1(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} \left(y_0 + \frac{x - x_0}{h} \Delta y_0 \right) dx = \frac{h}{2} [y_0 + y_1] \quad [12]$$

Como siempre, resultará más cómodo trabajar con la variable reducida k que con x . Así para grado $n = 2$:

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_2} y(x) dx &\simeq \int_{x_0}^{x_2} p_2(x) dx = h \int_0^2 p_2(k) dk = \\ &= h \int_0^2 \left(y_0 + k \Delta y_0 + \frac{k(k-1)}{2} \Delta^2 y_0 \right) dk = \\ &= h \left[2y_0 + 2\Delta y_0 + \frac{1}{3} \Delta^2 y_0 \right] = \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2) \end{aligned} \quad [13]$$

y, en general, para grado n arbitrario:

$$\int_{x_0}^{x_n} y(x) dx \simeq \int_{x_0}^{x_n} p_n(x) dx = Ch(c_0 y_0 + c_1 y_1 + \dots + c_n y_n) \quad [14]$$

expresión en la que C, c_0, c_1, \dots, c_n , son coeficientes numéricos calculables de modo análogo a los que aparecen en [12]-[13].

La expresión [14] recibe el nombre de fórmula de cuadratura de Newton-Côtes y es muy útil cuando $y(x)$ se da en forma de tabla

equiespaciada. Cuando los límites de integración no son puntos x tabulares, la fórmula general [14] se dice *abierta* (Ralston, 1970). El uso de estas fórmulas abiertas, en principio, no reporta grandes ventajas sobre cálculos, con versiones cerradas que empleen el mismo número de abscisas. La función de peso $\omega(x)$ asociada a esta integración es la unidad, ya que:

$$\int_a^b y(x)\omega(x) dx = \int_a^b y(x) dx \quad [15]$$

Pueden formularse también integraciones de Newton-Côtes con funciones peso $\omega(x) \neq 1$, aunque sólo son útiles en casos especiales como el cálculo con singularidades en el integrando (Mineur, 1952).

La utilización de fórmulas [14] con n elevado no es muy recomendable pues la exactitud no es muy buena (Ejercicio 6). Es por eso preferible emplear versiones restringidas de [14] limitadas a subintervalos del intervalo de integración (x_0, x_n) . En lo que sigue nos ocuparemos primero de versiones cerradas y seguidamente de algoritmos de integración (no basados en colocación) que emplean $\omega(x) \neq 1$.

5.1. Regla del trapecio

Dada una función tabular $\{(x_k, y_k)\}_{k=0, n}$ con argumentos equiespaciados h , la regla del trapecio para integrarla en el intervalo $x_0 \leq x \leq x_n$ consiste en reemplazar $y(x)$ por una línea quebrada, construida por segmentos de recta entre cada dos puntos (x, y) de abscisas consecutivas, y asimilar la integral de la quebrada a la de la función $y(x)$. Dicho en otros términos, por aplicación reiterada de la fórmula de Newton-Côtes para $n = 1$ en los intervalos sucesivos (x_0, x_1) , (x_1, x_2) , ..., (x_{n-1}, x_n) , aproximaremos la integral de $y(x)$ por:

$$\int_{x_0}^{x_n} y(x) dx \simeq \int_{x_0}^{x_1} p_1(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} p_1(x) dx + \dots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} p_1(x) dx \quad [16]$$

que utilizando el resultado [12] se transforma en la conocida expresión:

$$\int_{x_0}^{x_n} y(x) dx \simeq \frac{h}{2} [y_0 + 2y_1 + 2y_2 + \dots + 2y_{n-1} + y_n] \quad [17]$$

El error de truncamiento para esta regla puede obtenerse como sigue. Estimaremos primero el error en (x_0, x_1) de:

$$\int_{x_0}^{x_1} y(x) dx \simeq \int_{x_0}^{x_1} p_1(x) dx \quad [18]$$

con ayuda de la relación:

$$y(x) - p_1(x) = \frac{1}{2}(x - x_0)(x - x_1)y^{(2)}(\xi) \quad [19]$$

que integrada entre x_0 y x_1 lleva a:

$$\int_{x_0}^{x_1} y(x) dx - \int_{x_0}^{x_1} p_1(x) dx = \frac{1}{2} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)y^{(2)}(\xi) dx \quad [20]$$

Si $y^{(2)}(\xi)$ es continua en $x_0 < x < x_1$, como $(x - x_0)(x - x_1)$ no cambia de signo en él aplicando el teorema del valor medio del cálculo integral (Apostol, 1972) encontramos:

$$\int_{x_0}^{x_1} y(x) dx - \int_{x_0}^{x_1} p_1(x) dx = \frac{1}{2} \cdot y^{(2)}(\xi) \cdot h^3 \int_0^1 k(k-1) dk = -\frac{h^3}{12} y^{(2)}(\xi) \quad [21]$$

El error global de truncamiento para la integral completa es entonces:

$$\begin{aligned} & \int_{x_0}^{x_n} y(x) dx - \int_{x_0}^{x_n} p(x) dx = \\ & = -\frac{h^3}{12} [y^{(2)}(\xi_0) + y^{(2)}(\xi_1) + \dots + y^{(2)}(\xi_{n-1})] \end{aligned} \quad [22]$$

Si la segunda derivada $y^{(2)}$ está acotada en todo el intervalo:

$$|y^{(2)}(\eta)| \leq M \quad ; \quad x_0 < \eta < x_n \quad [23]$$

y es continua para todo η , escribiremos [22] como:

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} y(x) dx - \int_{x_0}^{x_n} p(x) dx &\simeq -\frac{h^3}{12} ny^{(2)}(\xi) = \\ &= -\frac{(x_n - x_0)}{12} h^2 y^{(2)}(\xi) \quad ; \quad x_0 < \xi < x_n \end{aligned} \quad [24]$$

expresión que nos da el error de truncamiento para la regla del trapecio (Ejercicio 7).

Analicemos ahora los errores de entrada. Si los datos vienen afectados de error $y_k \pm \varepsilon_k$, podemos poner que para todo índice k :

$$|\varepsilon_k| \leq E = \max_k \{|\varepsilon_k|\} \quad [25]$$

con lo que el error total de entrada es:

$$\varepsilon_{\text{entrada}} = \frac{h}{2} (\varepsilon_0 + 2\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 + \dots + 2\varepsilon_{n-1} + \varepsilon_n) \leq (x_n - x_0)E \quad [26]$$

desigualdad que indica que este error está acotado y que el algoritmo no amplifica (al contrario que en derivación) los errores individuales (Ejercicio 8).

5.2. Regla de Simpson

En esta regla se reemplaza la función $y(x)$ por arcos de parábola cada tres puntos, realizando la integral a trozos. Aplicando la fórmula de Newton con $n = 2$ a parejas sucesivas de subintervalos $(x_0, x_1) - (x_1, x_2)$; $(x_2, x_3) - (x_3, x_4)$; ..., etc., se llega a:

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} y(x) dx &\simeq \int_{x_0}^{x_2} p_2(x) dx + \int_{x_2}^{x_4} p_2(x) dx \dots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} p_2(x) dx = \\ &= \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2) + \frac{h}{3} (y_2 + 4y_3 + y_4) + \dots + \frac{h}{3} (y_{n-2} + 4y_{n-1} + y_n) = \\ &= \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + \dots + 2y_{n-2} + 4y_{n-1} + y_n) \end{aligned} \quad [27]$$

Es importante no olvidar que en [27] n debe ser par, es decir el número de puntos (x_k, y_k) tabulares para integrar debe ser impar.

Para evaluar el error de truncamiento de esta nueva regla hay que recurrir a métodos basados en la serie de Taylor (Ejercicios 9-10), llegando a:

$$\text{Error de truncamiento de Simpson} \simeq -\frac{(x_n - x_0)}{180} h^4 y^{(4)}(\xi) \quad [28]$$

$$x_0 < \xi < x_n$$

Por lo que respecta al error global de entrada se obtiene sin dificultad una expresión análoga a la del trapecio [26], no viéndose estos errores amplificados por el algoritmo de Simpson.

5.3. Método de los coeficientes indeterminados

Abandonamos los algoritmos integradores basados en colocación y abordamos ahora el método de los coeficientes indeterminados. Esta posibilidad se usa para postular algoritmos adaptados a diversas circunstancias, siendo útiles en la integración de funciones que oscilan rápidamente. Como valor de la integral de la función tabular $y(x) = y(x_k)$, de la que pueden conocerse además ciertos valores y'_k, y''_k , etc., se proponen expresiones del tipo:

$$\int_{x_0}^{x_n} y(x) dx \simeq h \sum_{k=0}^n c_k y(x_k) + h^2 \sum_{k=0}^n d_k y'(x_k) + \dots \quad [29]$$

y se determinan los coeficientes c_k, d_k , etc., haciendo que [29] sea exacta para las funciones polinómicas simples $1, x, x^2, \dots, x^n, \dots$, tantas como coeficientes haya. Se obtiene así un sistema de ecuaciones para determinar los c_k, d_k .

Puede darse el caso de que la función $y(x)$ venga dada por una expresión analítica y su integración deba ser realizada por vía numérica. En este caso los puntos x_k deben ser elegidos de antemano y equiespaciados (Ejercicio 11).

5.4. Integración gaussiana

Hasta aquí se han descrito algoritmos de integración numérica que utilizan argumentos x_k igualmente espaciados, bien sean los valores tabulares o bien otros que deban anticiparse para realizar los cálculos. Sin embargo, y siempre con vistas a minimizar el error numérico de este tipo de evaluaciones, podría ser mejor tomar argumentos desigualmente espaciados para aproximar la integral definida por una suma del tipo:

$$\int_{x_0}^{x_n} y(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n C_i y(x_i) \quad [30]$$

en la cual tanto los coeficientes C_i como los argumentos x_i deben ser determinados según ciertos criterios. Esta es, en esencia, la idea directora de la cuadratura gaussiana.

Elecciones óptimas de los C_i y x_i pueden realizarse de muchas maneras. Si como en el caso de los coeficientes indeterminados exigimos exactitud para $1, x, x^2, \dots, x^{2n-1}$, del sistema de $2n$ ecuaciones con $2n$ incógnitas surgen los $2n$ valores buscados. Esta elección corresponde a la integración Gauss-Legendre que resulta de la expresión general de integración gaussiana:

$$\int_{x_0}^{x_n} \omega(x) y(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n C_i y(x_i) \quad [31]$$

tomando como función de peso $\omega(x) = 1$. En este caso conviene reducir el intervalo de integración $x_0 \leq x \leq x_n$ al intervalo $-1 \leq x \leq 1$:

$$\int_{-1}^1 y(t) dt \simeq \sum_{i=1}^n C_i^L y(x_i^L) \quad [32]$$

De esta manera los argumentos x_i^L a emplear son los ceros de los polinomios ortogonales de Legendre $P_n(x)$, que se pueden determinar con la fórmula de Rodrigues (Ejercicio 12):

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n \cdot n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [33]$$

siendo los coeficientes C_i^L calculables con:

$$C_i^L = \frac{2(1 - (x_i^L)^2)}{n^2(P_{n-1}(x_i^L))^2} \quad [34]$$

Los ceros x_i^L están dentro del intervalo $(-1, 1)$ y sus valores se hallan tabulados en recopilaciones de datos matemáticos (Abramowitz y Stegun, 1972). En el Tema 5 estudiaremos el cálculo de las raíces reales de un polinomio. La tabla 1 recoge los datos necesarios para realizar una cuadratura de Gauss-Legendre hasta $n = 6$ (precisión de cinco decimales en argumentos y coeficientes).

TABLA 1

Datos C_i^L, x_i^L , para la integración de Gauss-Legendre

n	x_i^L	C_i^L
2	$\pm 0,57735$	1,00000
3	0	0,88889
	$\pm 0,77460$	0,55556
4	$\pm 0,33998$	0,65214
	$\pm 0,86114$	0,34785
5	0	0,56889
	$\pm 0,53847$	0,47863
	$\pm 0,90618$	0,23693
6	$\pm 0,23862$	0,46791
	$\pm 0,66121$	0,36076
	$\pm 0,93247$	0,17132

El error numérico de esta cuadratura viene dado por (Ralston, 1970):

$$E_{GL} = \frac{y^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_{-1}^1 P_n^2(x) dx \quad [35]$$

donde, como siempre, aparece un valor $x = \xi$ desconocido $(-1 < \xi < 1)$.

Otras elecciones de la función de peso $\omega(x)$ conducen a otros tipos de integración gaussiana:

i) Integración de Gauss-Tchebycheff:

$$\omega(x) = (1 - x^2)^{-1/2} \quad ; \quad -1 \leq x \leq 1 \quad [36]$$

ii) Integración de Gauss-Hermite:

$$\omega(x) = e^{-x^2} \quad ; \quad -\infty < x < +\infty \quad [37]$$

iii) Integración de Gauss-Laguerre:

$$\omega(x) = e^{-x} \quad ; \quad 0 \leq x < +\infty \quad [38]$$

La idea de estas integraciones es la misma que la anterior, pero cambiando los intervalos de integración y los polinomios ortogonales a utilizar (Tchebycheff, Hermite y Laguerre, respectivamente). Un análisis más en detalle de la integración gaussiana requeriría un conocimiento amplio de la Teoría de Polinomios Ortogonales, tema sobre el que volveremos más adelante al tratar de la Aproximación por Mínimos Cuadrados (Tema 4).

5.5. Integrales singulares

Supongámonos enfrentados a un problema de integración numérica en el que la función a integrar posee *singularidades* dentro del intervalo de integración, como por ejemplo:

$$I = \int_0^1 \frac{e^x dx}{(x-1)^{1/3}} \quad [39]$$

integral con singularidad en $x = 1$. La aplicación directa de las técnicas de integración anteriores puede conducirnos a resultados erróneos.

Esta situación puede repetirse cuando sean las derivadas de la función, y no ésta, las que posean singularidades. La explicación del fallo está en que las aproximaciones polinómicas son de naturaleza suave y, por tanto, ni los polinomios ni sus derivadas pueden mostrar características singulares. Existen varias formas de atacar el tratamiento de este tipo

dísculo de integral (Mineur, 1952; Scheid, 1972) y veremos aquí sólo algunas de las más usadas.

a) *Substracción de la singularidad*

Consiste en desdoblarse la integral en dos, una parte singular, tratable por análisis matemático clásico, y otra parte no singular calculable numéricamente. Por ejemplo, para la integral [39] podemos hacer:

$$I = \int_0^1 \frac{e^x - e}{(x - 1)^{1/3}} dx + \int_0^1 \frac{e}{(x - 1)^{1/3}} dx$$

en donde la primera integral carece de singularidad en $x = 1$, en tanto que la segunda es directamente integrable y convergente. La primera integral puede entonces aproximarse numéricamente y sumar el resultado con la segunda. Si notamos ahora que el integrando de la primera tiene su derivada con singularidad en $x = 1$, podemos repetir el proceso corriendo la singularidad a derivadas de orden superior.

b) *Cambio de variable*

Esta es una herramienta muy empleada en análisis. Sea la integral:

$$I = \int_0^1 \frac{e^x}{(1 - x)^{1/2}} dx \quad [40]$$

con singularidad en $x = 1$. Si encontramos un cambio de variable admisible que elimine la singularidad, habremos resuelto el problema. Para ello, debe recordarse que dentro del intervalo de integración $0 \leq x \leq 1$ la relación funcional entre x y la nueva variable β debe ser tal que:

- i) $x(\beta)$ tenga primera derivada continua en $0 \leq x \leq 1$
- ii) $(dx/d\beta) \neq 0$ para todo $0 \leq x \leq 1$

es decir, $x(\beta)$ debe ser una función (suave) monótona con derivada continua en $0 \leq x \leq 1$. Señalemos que la condición ii) puede ser relajada

obteniéndose una formulación menos restrictiva (Apostol, 1972). Es posible entonces proponer el cambio $x = \text{sen}^2 \beta$ que conduce a:

$$I = \left\{ \begin{array}{l} x = \text{sen}^2 \beta \Rightarrow dx = 2 \text{sen} \beta \cos \beta d\beta \\ x = 0 \Rightarrow \beta = 0 ; x = 1 \Rightarrow \beta = \pi/2 \end{array} \right\} =$$

$$= \int_0^{\pi/2} \frac{\exp[\text{sen}^2 \beta]}{\cos \beta} 2 \text{sen} \beta \cos \beta d\beta = 2 \int_0^{\pi/2} \exp[\text{sen}^2 \beta] \text{sen} \beta d\beta$$

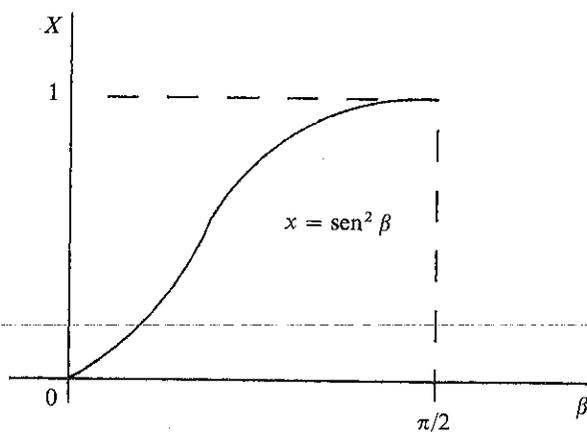


Figura 2.—Cambio de variable monótono.

con lo que la integral sobre β carece de singularidades y, numéricamente, cualquiera de los métodos que hemos visto valdrá para evaluarla.

c) Desarrollos en serie de potencias

También es ésta otra manera general de abordar problemas en análisis. Consiste en desarrollar parte del integrando (o todo él) en serie e integrar término a término. Para hacer esto con garantía hay que estar seguro de que la serie final obtenida convergerá uniformemente dentro de un cierto dominio (intervalo), único lugar en donde el desarrollo es válido. Su aplicación se realiza sobre integrales singulares y no singulares.

Como ejemplo consideremos la integral:

$$I = \int_0^{\pi/2} \frac{\operatorname{sen} x}{x^{3/2}} dx \quad [41]$$

El desarrollo en serie de Taylor de $\operatorname{sen} x$ en torno a $x = 0$ es:

$$\operatorname{sen} x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots \quad [42]$$

cuyo radio de convergencia es infinito, es decir [42] es válido para todo x tal que $|x| < +\infty$ (Knopp, 1952). Por sustitución obtenemos:

$$I = \int_0^{\pi/2} \left[x^{-1/2} - \frac{x^{3/2}}{3!} + \frac{x^{7/2}}{5!} - \frac{x^{11/2}}{7!} + \dots \right] dx$$

encontrando el resultado final a cuatro términos con un error (quinto término):

$$I = 2,314022 (7,53 \times 10^{-6})$$

(Ejercicio 13).

5.6. Integración numérica de funciones oscilantes. Fórmula de Filon

Concluimos la presentación de los algoritmos de integración con un caso especialmente interesante que aparece cuando el integrando es una función que oscila rápidamente, por ejemplo: cuando contiene un factor de tipo seno o coseno. En estas circunstancias la selección de abscisas es crucial para que la solución numérica se aproxime al valor exacto: el área encerrada por la función con el eje de las x . Si el integrando se conoce analíticamente una solución numérica óptima puede conseguirse, como ya sabemos (Ejercicio 7), vía regla del trapecio disminuyendo el espaciado h . Sin embargo, si la función es fuertemente oscilante y se conoce sólo en forma tabular las dificultades se plantean en toda su crudeza.

El método de los coeficientes indeterminados ofrece muy buenas aproximaciones para este problema. Por ejemplo, consideremos la integral de la función $y(x) = f(x) \cdot \operatorname{sen}(2x)$ entre $[0, 2\pi]$ que aproximaremos en la forma simple:

$$\int_0^{2\pi} f(x) \cdot \text{sen } 2x \cdot dx \simeq c_0 f(0) + c_1 f(\pi) + c_2 f(2\pi) \quad [43]$$

obligando a que sea exacta para $f(x) = 1, x, x^2$. Esto conduce al sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \text{sen } 2x \cdot dx &= c_0 + c_1 + c_2 = 0 \\ \int_0^{2\pi} x \cdot \text{sen } 2x \cdot dx &= \pi c_1 + 2\pi c_2 = -\pi \\ \int_0^{2\pi} x^2 \cdot \text{sen } 2x \cdot dx &= \pi^2 c_1 + 4\pi^2 c_2 = -2\pi^2 \end{aligned} \quad [44]$$

cuya solución es:

$$c_0 = 1/2 \quad ; \quad c_1 = 0 \quad ; \quad c_2 = -1/2$$

con lo que la evaluación numérica de la integral queda:

$$\int_0^{2\pi} f(x) \cdot \text{sen } 2x \cdot dx \simeq \frac{1}{2} f(0) - \frac{1}{2} f(2\pi) \quad [45]$$

Dado que las integrales oscilantes de tipo senoidal aparecen con gran frecuencia en la teoría de la difracción de la luz (*light scattering*) por materia condensada (ver Tema 4, Ejercicio 10) reproducimos a continuación la aproximación de Filon (Scheid, 1972):

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_m} f(x) \cdot \text{sen } kx \cdot dx &\simeq h [A_1 f(x_0) \cdot \cos kx_0 - A_1 f(x_m) \cdot \cos kx_m + \\ &+ A_2 S_2 + A_2' S_2'] \end{aligned} \quad [46]$$

en donde

$$x_m - x_0 = 2nh \quad [47]$$

$$A_1 = \frac{1}{kh} + \frac{\text{sen } 2kh}{2k^2 h^2} - \frac{2 \text{sen}^2 kh}{k^3 h^3} \quad [48]$$

$$A_2 = \frac{1 + \cos^2 kh}{k^2 h^2} - \frac{\text{sen } 2kh}{k^3 h^3} \quad [49]$$

$$A'_2 = -\frac{4 \cos kh}{k^2 h^2} + \frac{4 \text{sen } kh}{k^3 h^3} \quad [50]$$

$$S_2 = -f(x_0) \text{sen } kx_0 - f(x_m) \text{sen } kx_m + 2 \sum_{i=0}^n f(x_0 + 2ih) \cdot \text{sen } (kx_0 + 2ikh) \quad [51]$$

$$S'_2 = \sum_{i=1}^n f(x_0 + (2i-1)h) \cdot \text{sen } (kx_0 + (2i-1)kh) \quad [52]$$

y el error de truncamiento resultante es $(x_0 < \xi < x_m)$

$$E_n = \frac{h^3}{12} (x_m - x_0) \left[1 - \frac{1}{16 \cos(kh/4)} \right] \text{sen } \frac{kh}{2} \cdot f^{(4)}(\xi) \quad [53]$$

6. EJEMPLO DE APLICACION: CALCULO DE LA INTEGRAL DE DEBYE

En la teoría de calores específicos de sólidos aparece la integral de Debye:

$$I_D = \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad [54]$$

que no puede ser evaluada analíticamente. El límite superior x_D es la temperatura reducida θ/T , y nos proponemos calcular tal integral para $x_D = 1,5$.

Aparentemente, el integrando posee singularidad en $x = 0$, pero una sencilla aplicación de la regla de L'Hôpital nos muestra que no es así. Es posible entonces emplear los algoritmos aproximados del trapecio, Simpson o de Gauss-Legendre para calcular la integral. Tomaremos para

todos ellos cinco puntos equiespaciados ($h = 0,375$) al objeto de comparar sus resultados ($y(0) = 0$).

Para la regla del trapecio se obtiene:

$$I_D = \frac{0,375}{2} [y_0 + 2y_1 + 2y_2 + 2y_3 + y_4] = 1,031940$$

y para la regla de Simpson:

$$I_D = \frac{0,375}{3} [y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + y_4] = 1,007757$$

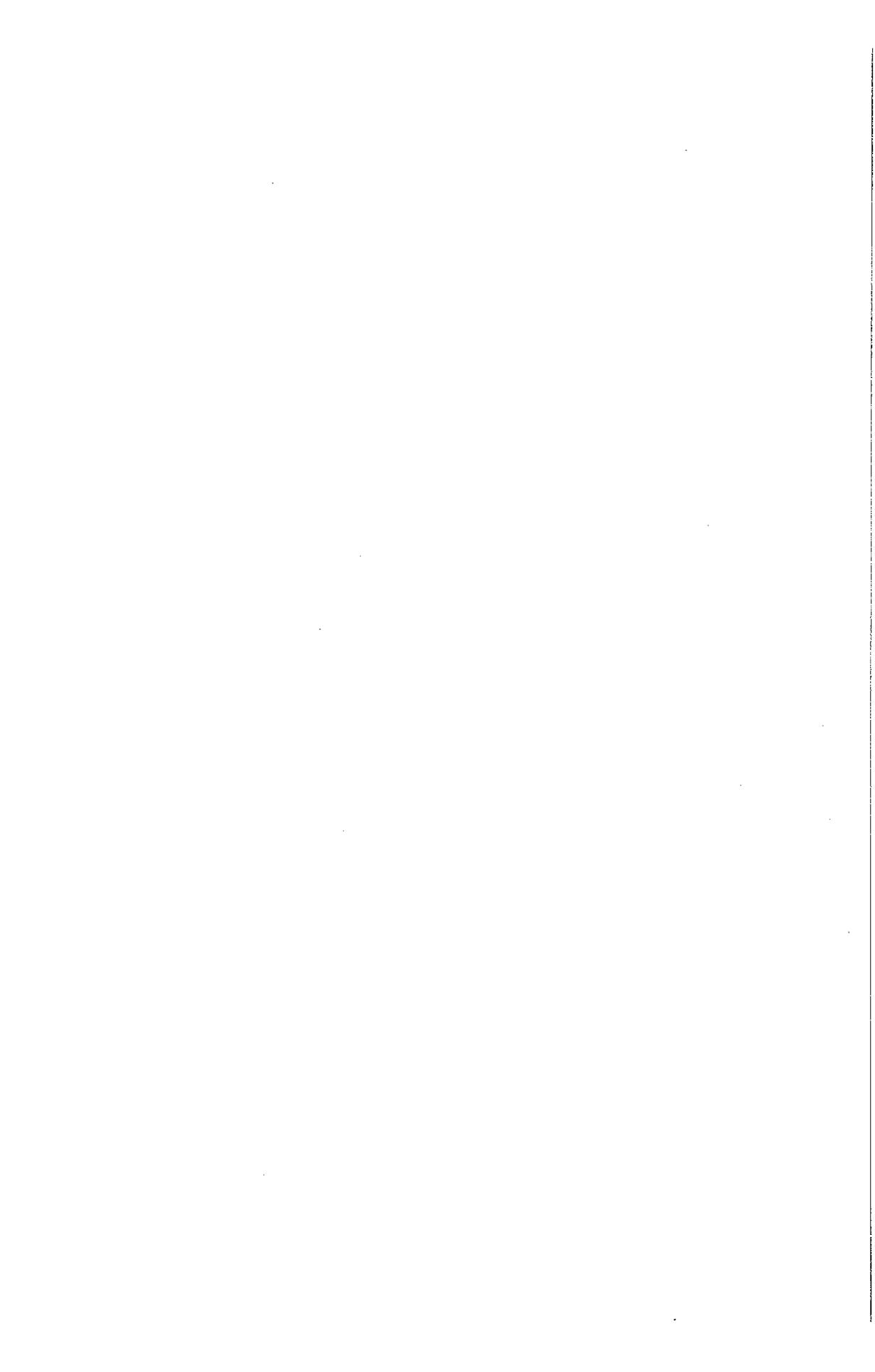
La integración de Gauss-Legendre requiere el cambio $0 \leq x \leq 1,5 \rightarrow -1 \leq x \leq 1$, que se consigue mediante una simple transformación lineal:

$$t = \frac{2}{x_D} x - 1 \quad ; \quad dt = \frac{2}{x_D} dx$$

Usando los datos de la tabla 1 para $n = 5$, un cálculo directo da:

$$\begin{aligned} I_D &= \left(\frac{x_D}{2}\right)^5 \int_{-1}^1 \frac{(t+1)^4 \exp\left[\frac{x_D}{2}(t+1)\right]}{\left(\exp\left[\frac{x_D}{2}(t+1)\right] - 1\right)^2} dt = \\ &= \sum_{i=1}^5 C_i^L x_i^L = 1,007944 \end{aligned}$$

En consecuencia, vemos que los algoritmos de Simpson y Gauss-Laguerre con 5 puntos dan una mejor aproximación que la regla del trapecio (resultado exacto = 1,007944). Con particiones más y más finas esta última, no es aventurado añadir, aventajaría a las primeras en calidad (Ejercicio 7) y arrojaría un resultado con tanta exactitud en cifras decimales como se deseara. Notemos, no obstante, la gran calidad de la integración gaussiana cuando la función a integrar no cambia de signo en el intervalo de integración.



Bibliografía

1. ABRAMOWITZ, M., y STEGUN, I. A., *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables*, Wiley, Nueva York, 1972.
2. APOSTOL, T. M., *Análisis Matemático*, Reverté, Barcelona, 1972, capítulos 13 y 15.
3. KNOPP, K., *Elements of The Theory of Functions*, Dover, Nueva York, 1952, capítulo 13.
4. MINEUR, H., *Techniques de Calcul Numérique*, Librairie Polytechnique, Paris, 1952.
5. RALSTON, A., *Introducción al Análisis Numérico*, Limusa-Wiley, México, 1970, capítulos 1-4.
6. RICE, J. R., *Numerical Methods, Software and Analysis*, McGraw-Hill, Nueva York, 1983, capítulos 3, 5 y 7.
7. SCHEID, F., *Análisis Numérico*, McGraw-Hill, México, 1972, capítulo 14.
8. SCHIFF, L., *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, Nueva York, 1981, capítulo 4.
9. WEAST, R. C., y ASTLE, M. J. (editores), *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press, Boca Ratón (Florida), 1981.

EJERCICIOS DE AUTOCOMPROBACION

1. Dada la tabla numérica:

x	0	1	2	3
y	0	1	8	27

subtabularla entre 0 y 1 utilizando un subintervalo $h' = 0,25$.

2. a) Dada la tabla:

k	0	1	2
x_k	0	2	4
y_k	0	6	20

encontrar el valor de x que hace $y(x) = 12$.

b) Con la tabla anterior determinar el polinomio interpolador de avance de Newton (segundo grado) y calcular el valor que da para x cuando $y = 12$. ¿Por qué el x así calculado es diferente del obtenido en a)?

3. ¿Qué h es preciso para construir una tabla de la función $\ln(x)$, $1 \leq x \leq 2$, que mantenga el error de truncamiento cuadrático por debajo de 5×10^{-7} ?

4. A partir de los datos del Ejemplo de aplicación del apartado 5.1 del Tema 1 correspondientes a las frecuencias de rotación del CO, tomando $E(J_0 = 0) = 0$, extrapolar el valor $E(J = 8)$. ¿Es correcta esta operación? ¿Sería correcto subtabular dicha tabla para valores J espaciados entre sí $1/4$?
5. La siguiente tabla contiene valores de las energías de los estados vibracionales v de la molécula de nitrógeno en su estado electrónico fundamental y contiene dos errores:

v	0	1	2	3	4
$E(\text{cm}^{-1})$	1175,475	3505,275	5806,875	8000,275	10300,475
	5	6	7	8	9
	12542,475	14731,275	16891,875	19024,275	21128,475

Determinar y corregir estos errores. Asimismo, identificar el modelo de vibración mecanocuántico que reproduce la tabla.

6. Obtener hasta $n = 6$ los coeficientes de Newton-Côtes (cerrados) para la fórmula de cuadratura [14]. Dar, asimismo, un argumento para explicar por qué no suele mejorar la exactitud con esta integración al aumentar el grado n .
7. En tanto $y^{(2)}(\xi)$ esté acotada en el intervalo de integración, el error de la regla del trapecio puede hacerse arbitrariamente pequeño. ¿Cómo se haría esta operación y por qué tiene sentido desde el punto de vista del Análisis Matemático?
8. Usando la tabla que se suministra, calcular el número medio N de moléculas de nitrógeno, supuestas esféricas con diámetro $\sigma = 3,5 \text{ \AA}$, que rodean a una dada dentro del nitrógeno líquido a una temperatura $T = 66 \text{ K}$ y densidad $n = 0,0183 \text{ moléculas/\AA}^3$ hasta una distancia $R = 4,15 \text{ \AA}$. El valor de N viene dado por:

$$N = 4\pi n \int_{\sigma}^R g(r) r^2 dr$$

$r(\text{\AA})$	3,55	3,65	3,75	3,85	3,95	4,05	4,15
$g(r)$	3,6	3,1	2,6	2,3	2,0	1,8	1,6

9. Obtener el error de truncamiento para la regla de Simpson.
10. Calcular con un error relativo $\varepsilon_N < 2\%$ la constante de normalización N de la función de onda $\psi(x)$ para una partícula monodimensional en el estado fundamental de una caja de potencial de longitud unidad. Realizar las integraciones oportunas por el método de Simpson.

$$\text{Datos: } \begin{cases} \psi(x) = N \operatorname{sen}(\pi x) \\ \text{normalización: } \int_0^1 \psi^2(x) dx = 1 \end{cases}$$

11. Aplicar el método de los coeficientes indeterminados para calcular la integral:

$$\int_0^{0,9} \frac{\sqrt{1+x}}{2+x} dx \simeq c_0 y(0) + c_1 y(0,3) + c_2 y(0,6) + c_3 y(0,9)$$

habiéndose elegido los argumentos

$$x_0 = 0 \quad ; \quad x_1 = 0,3 \quad ; \quad x_2 = 0,6 \quad ; \quad x_3 = 0,9$$

12. a) Deducir aplicando la fórmula de Rodrigues [33] los cinco primeros polinomios de Legendre.
- b) Comprobar la ortogonalidad entre P_2 y P_3 verificando:

$$\int_{-1}^1 P_2(x) \cdot P_3(x) dx = 0$$

13. En el estudio de sistemas macroscópicos atómicos con efectos cuánticos moderados puede utilizarse el potencial semiclásico de interacción entre dos partículas debido a Feynman y Hibbs:

$$V_{GFH}(r) = \left[\frac{6\mu}{\pi\beta\hbar^2} \right]^{3/2} \iiint_{-\infty}^{\infty} dx V_L(|\mathbf{r} + \mathbf{x}|) \exp \left[-\frac{6\mu}{\beta\hbar^2} x^2 \right]$$

en donde $\mu = m/2$ es la masa reducida de las dos partículas (idénticas), $\beta = 1/kT$ es el inverso de la temperatura absoluta T ($k =$ constante de Boltzmann), y V_{LJ} es el potencial clásico Lennard-Jones asociado. La expresión anterior involucra singularidades en el integrando, ya que el potencial clásico las presenta para $\mathbf{x} = -\mathbf{r}$. Obtener una fórmula analítica aproximada para evaluar V_{GFH} que obvie el problema de las singularidades mediante el desarrollo en serie de Taylor en la variable \mathbf{x} del potencial clásico $V_{LJ}(|\mathbf{r} + \mathbf{x}|)$. Incluir en el desarrollo hasta términos de segundo orden inclusive y realizarlo en torno a $\mathbf{x} = 0$.

SOLUCIONES A LOS EJERCICIOS DE AUTOCOMPROBACION

1. Escribamos la tabla de diferencias asociada:

k	x_k	y_k	Δy_k	$\Delta^2 y_k$	$\Delta^3 y_k$
0	0	0			
1	1	1	1	6	
2	2	8	7	12	6
3	3	27	19		

Utilizando el polinomio de avance de Newton de tercer grado, tenemos:

$$p_k = k + \frac{6}{2}k(k-1) + \frac{6}{6}k(k-1)(k-2) = k^3$$

resultado obvio y que podría haberse anticipado por simple inspección de la tabla. La subtabulación exige interpolar y para $x = 0,25$; $0,50$; $0,75$. Así pues los argumentos fraccionarios k son:

$$k(x = 0,25) = \frac{0,25 - 0}{1} = 0,25$$

$$k(x = 0,50) = \frac{0,50 - 0}{1} = 0,50$$

$$k(x = 0,75) = \frac{0,75 - 0}{1} = 0,75$$

Sustituyendo en el polinomio y renumerando índices llegamos a:

k'	0	1	2	3	4
k	0	0,25	0,50	0,75	1
x	0	0,25	0,50	0,75	1
y	1	0,0156	0,1250	0,4219	1

2. a) Intercambiando $x_k \leftrightarrow y_k$, el polinomio de colocación lagrangiano se escribe:

$$x = \tilde{p}_L(y) = \sum_{k=0}^n \left[\prod_{j \neq k} \frac{(y - y_j)}{(y_k - y_j)} \right] \cdot x_k$$

expresión en la que se excluye de los denominadores a los términos que produzcan singularidades y de los numeradores al término asociado. En este caso resulta un polinomio de segundo grado:

$$\begin{aligned} x = \tilde{p}_L(y) &= \frac{(y - 6)(y - 20)}{(0 - 6)(0 - 20)} \cdot 0 + \frac{(y - 0)(y - 20)}{(6 - 0)(6 - 20)} \cdot 2 + \\ &+ \frac{(y - 0)(y - 6)}{(20 - 0)(20 - 6)} \cdot 4 = \frac{41y - y^2}{105} \end{aligned}$$

que suministra el valor $x(y = 12) \simeq 3,314$.

- b) A partir de la tabla

k	x	y	Δ	Δ^2
0	0	0		
1	2	6	6	8
2	4	20	14	

es inmediato obtener:

$$y = 0 + 6k + \frac{8}{2}k(k-1) \equiv x^2 + x$$

por lo que en el intervalo de ajuste para $y = 12$:

$$x = \frac{-1 + \sqrt{49}}{2} = 3$$

La discrepancia obedece a que los polinomios de colocación $x = p(y)$, $y = p(x)$, usando y ó x como variables independientes no son, evidentemente, la misma función. Esto no contradice en modo alguno el que el polinomio de colocación sea único, pues esta afirmación se refiere a una vez seleccionada la variable independiente.

3. El error de truncamiento de un polinomio de segundo grado es:

$$E = \frac{2\sqrt{3}}{9} h^3 |y^{(3)}(\xi)|$$

Para la función $y = \ln(x)$ encontramos que su tercera derivada, en valor absoluto, dentro de $1 < x < 2$ está acotada por:

$$|y^{(3)}(\xi)| < \frac{2}{\xi^3} \Big|_{\xi=1} = 2$$

Mantener el error E menor que 5×10^{-7} nos obligaría a adoptar un espaciado h en el intervalo tal que:

$$\frac{2\sqrt{3}}{9} h^3 \cdot 2 < 5 \times 10^{-7} \Rightarrow h < 8,66 \times 10^{-3}$$

4. La expresión para $E(J)$ en las condiciones dadas es:

$$E(J) = \frac{3,842}{2} J(J + 1)$$

La extrapolación a $J = 8$ da una energía $E(J = 8) \simeq 138,312 \text{ cm}^{-1}$, y se trata de una operación completamente correcta por ser la ley interpolatoria $E(J)$ la relación exacta para el CO considerado como rotor rígido. Recordemos que en el rotor rígido cuántico $J = 0, 1, 2, \dots$, es decir siempre entero. Una subtabulación con espaciado $h_J = 1/4$ carece pues de sentido físico en este contexto.

5. El procedimiento a seguir es similar al desarrollado en el epígrafe 2. Se construye primero la tabla de diferencias y se localizan los datos erróneos en $v = 3$ y $v = 4$:

v	$E(\text{cm}^{-1})$	Δ	Δ^2	Δ^3
0	1175,475			
1	3505,275	2329,8		
2	5806,875	2301,6	-28,2	
3	8000,275	2193,4	-108,2	-80
4	10300,475	2300,2	106,8	215
5	12542,475	2242,0	-58,2	-165
6	14731,275	2188,8	-53,2	5
7	16891,875	2160,6	-28,2	25
8	19024,275	2132,4	-28,2	0
9	21128,475	2104,2	-28,2	0

En vista de los resultados bajo Δ^2 , parece razonable hacer la hipótesis $\Delta^2 = -28,2 = \text{constante}$. Con esto y dando marcha atrás en los cálculos se corrigen los valores erróneos:

$$v = 3 \ E(\text{cm}^{-1})\text{-erróneo-} = 8000,275 \quad ; \quad E(\text{cm}^{-1})\text{-corregido-} = 8080,275$$

$$v = 4 \ E(\text{cm}^{-1})\text{-erróneo-} = 10300,475 \quad ; \quad E(\text{cm}^{-1})\text{-corregido-} = 10325,475$$

con lo que la tabla queda ahora perfectamente consistente.

El polinomio en v que representa la tabla es:

$$p(v) = 1175,475 + 2329,8 v - 14,1 v(v-1)$$

que se corresponde con la fórmula mecanocuántica para los niveles de energía del oscilador lineal anarmónico:

$$E_v(\text{cm}^{-1}) = v_e(v + \frac{1}{2}) - v_e x_e(v + \frac{1}{2})^2$$

con frecuencia armónica asociada

$$v_e(cm^{-1}) = h\bar{\nu}_e(s^{-1})/hc = 2358 \quad (c = \text{velocidad de la luz})$$

y constante de anarmonicidad

$$v_e x_e(cm^{-1}) = 14,1$$

6. Los coeficientes de Newton-Côtes para $n = 6$ se obtienen integrando término a término el polinomio de avance de Newton de grado seis:

$$\int_{x_0}^{x_6} p_6(x) dx = h \int_0^6 p_6(k) dk = Ch \sum_{i=0}^6 c_i y_i$$

resultando:

$$C = 1/140 \quad ; \quad c_0 = c_6 = 41 \quad ; \quad c_1 = c_5 = 216 \quad ; \\ c_2 = c_4 = 27 \quad ; \quad c_3 = 272$$

Los polinomios de colocación de grado elevado sabemos que muestran un comportamiento fuertemente oscilante, alrededor del eje x , en los extremos del intervalo. Esto puede conducir a errores numéricos elevados en el cálculo de integrales definidas (áreas con signo entre la curva y el eje x).

7. El método a seguir sería disminuir progresivamente el espaciado h , lo que obligaría a disponer de más puntos tabulares, hasta conseguir la precisión final deseada. La operación descrita tiene el máximo sentido dentro del Análisis Matemático, pues se sustituye la integral por sumas de Riemann sobre particiones del intervalo de integración cada vez más finas y, claramente, con mejores resultados. Recordemos que, en el límite, la suma de Riemann con partición infinita es justamente la integral definida:

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{h \rightarrow 0} \sum_{a < x_i < b} f(x_i)h$$

8. La integración a realizar involucra a una región, $3,5 \leq r(\text{Å}) < 3,55$, para la que no hay datos tabulares. El primer paso será, pues, extrapolar el valor de $g(r)$ para $r = 3,5 \text{ Å}$ (*punto de contacto*). Aunque existen métodos sofisticados para realizar esta operación, muy importante en el estudio

de sistemas con partículas esféricas rígidas, nos conformaremos con realizarla de forma muy simplificada utilizando sólo los dos primeros datos de la tabla. La extrapolación lineal a partir de los valores en $r = 3,55$ y $r = 3,65$ arroja el valor:

$$r = 3,5 \text{ \AA} \quad ; \quad g(r = 3,5 \text{ \AA}) = 3,85$$

La nueva tabla que incluye el valor recién calculado ya no posee sus argumentos equiespaciados y la integral total habrá que descomponerla en dos partes:

$$N = 4\pi n \left[\int_{3,5}^{3,55} g(r) r^2 dr + \int_{3,55}^{4,15} g(r) r^2 dr \right]$$

Para el cálculo manual de estas integrales conviene confeccionar una tabla de r frente a $r^2g(r)$:

r	3,5	3,55	3,65	3,75	3,85
$r^2g(r)$	47,1625	45,369	41,29975	36,5625	34,09175
	3,95	4,05	4,15		
	31,205	29,5245	27,556		

Aplicando la regla del trapecio a ambas integrales se obtiene el resultado:

$$N \simeq 5,3416$$

indicando así que el número de moléculas pedido está entre 5 y 6 (el valor N es un resultado estadístico).

9. En este caso, dentro de cada intervalo (x_0, x_2) , (x_2, x_4) , etc., la función $\pi(x) = (x - x_i)(x - x_{i+1})(x - x_{i+2})$ cambia de signo. Por ello no es posible aplicar el teorema del valor medio como en la regla del trapecio. Centrémonos en (x_0, x_2) y evaluemos su error de truncamiento parcial:

$$\int_{x_0}^{x_2} y(x) dx - \int_{x_0}^{x_2} p_2(x) dx = F(x_2) - F(x_0) - \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2)$$

siendo $F(x)$ una función primitiva de $y(x)$. La diferencia $F(x_2) -$

— $F(x_0)$ puede desarrollarse en serie de Taylor tomando como origen x_0 :

$$F(x_2) - F(x_0) = 2hy_0 + 2h^2y'_0 + \frac{4}{3}h^3y''_0 + \frac{2}{3}h^4y'''_0 + \dots$$

Y lo mismo puede hacerse con el término restante:

$$\begin{aligned} & -\frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) = \\ & = -\frac{h}{3}\left[y_0 + 4\left(y_0 + hy'_0 + \frac{h^2}{2}y''_0 + \frac{h^3}{6}y'''_0 + \dots\right) + \right. \\ & \quad \left. + \left(y_0 + 2hy'_0 + 2h^2y''_0 + \frac{4}{3}h^3y'''_0 + \dots\right)\right] \end{aligned}$$

Efectuando la operación indicada en el error de truncamiento de arriba y quedándonos con el primer término resulta:

$$\int_{x_0}^{x_2} y(x) dx - \int_{x_0}^{x_2} p_2(x) dx \simeq -\frac{1}{90}h^5y_0^{(4)} = -\frac{(x_2 - x_0)}{180}h^4y_0^{(4)}$$

El error total de truncamiento para todo el intervalo de integración, asumiendo que $y^{(4)}$ es continua en él, es entonces:

$$\int_{x_0}^{x_n} y(x) dx - \int_{x_0}^{x_n} p(x) dx \simeq -\frac{(x_n - x_0)}{180}h^4y^{(4)}(\xi); \quad x_0 < \xi < x_n$$

en donde se ha hecho uso, por la continuidad aludida, de:

$$(y_0^{(4)} + y_2^{(4)} + \dots + y_{n-4}^{(4)} + y_{n-2}^{(4)}) = \frac{n}{2}y^{(4)}(\xi)$$

10. Si llamamos:

$$I = \int_0^1 \text{sen}^2 \pi x dx$$

la constante de normalización es $N = I^{-1/2}$. En consecuencia, el error absoluto de N estará relacionado con el de I a través de:

$$\Delta I = 2\Delta N \cdot I^{3/2} \Rightarrow \frac{\Delta I}{I} = \frac{2\Delta N}{N}$$

siendo entonces la relación entre los errores relativos ε :

$$\varepsilon_I = 2\varepsilon_N$$

La condición $\varepsilon_N < 0,02$ equivale a decir $\varepsilon_I < 0,04$. Se tratará de localizar el espaciado h que mantenga el error relativo anterior. Procederemos aquí de modo constructivo.

Para $h = 1/2$ la regla de Simpson da:

$$I = \frac{1}{6} \left[\text{sen}^2 \pi \cdot 0 + 4 \text{sen}^2 \frac{\pi}{2} + \text{sen}^2 \pi \cdot 1 \right] = 2/3 = 0,6666\dots$$

considerando el truncamiento como la fuente primordial de error, el resultado anterior está afectado por:

$$\Delta I \leq \frac{h^4}{180} \left| -8\pi^4 \cos 2\pi x \right|_{x=0} = \frac{8\pi^4}{180} \left(\frac{1}{2} \right)^4 \approx 0,2706$$

cuyo error relativo es $\varepsilon_I \leq 0,4059 \equiv 40,6\%$, límite diez veces superior al permitido.

Tomemos $h = 1/4$, lo que nos lleva a:

$$I = \frac{1}{12} \left[\text{sen}^2 \pi \cdot 0 + 4 \text{sen}^2 \frac{\pi}{4} + 2 \text{sen}^2 \frac{\pi}{2} + 4 \text{sen}^2 \frac{3\pi}{4} + \text{sen}^2 \pi \right] = 0,5$$

(por una afortunada coincidencia ¡el resultado exacto!). El error relativo es ahora:

$$\varepsilon_I = \frac{\Delta I}{I} \leq 0,0338 \equiv 3,38\% < 4\%$$

habiendo realizado con esto el cálculo pedido ($N = \sqrt{2}$). Existen más h comprendidas entre las dos anteriores que también cumplirían la condición pedida y que se podrían calcular optimizando, pero no nos ocuparemos de ello aquí.

11. Para calcular los cuatro coeficientes c_k utilizaremos las funciones $y(x) = 1, x, x^2, x^3$. Para $y = 1$ se tiene:

$$\int_0^{0,9} 1 \cdot dx = c_0 \cdot 1 + c_1 \cdot 1 + c_2 \cdot 1 + c_3 \cdot 1 = 0,9$$

Análogamente para $y = x, y = x^2, y = x^3$ surgen las ecuaciones:

$$c_0 \cdot 0 + c_1(0,3) + c_2(0,6) + c_3(0,9) = 0,9^2/2$$

$$c_0 \cdot 0 + c_1(0,3)^2 + c_2(0,6)^2 + c_3(0,9)^2 = 0,9^3/3$$

$$c_0 \cdot 0 + c_1(0,3)^3 + c_2(0,6)^3 + c_3(0,9)^3 = 0,9^4/4$$

Resolviendo el sistema de las cuatro ecuaciones encontramos:

$$c_0 = c_3 = 0,1125 \quad ; \quad c_1 = c_2 = 0,3375$$

Por lo tanto, sustituyendo estos valores en la fórmula postulada, el valor aproximado de la integral resulta:

$$\begin{aligned} \int_0^{0,9} \frac{\sqrt{1+x}}{2+x} dx &= 0,1125 \left(\frac{\sqrt{1+0}}{2+0} \right) + 0,3375 \left(\frac{\sqrt{1+0,3}}{2+0,3} \right) + \\ &+ 0,3375 \left(\frac{\sqrt{1+0,6}}{2+0,6} \right) + 0,1125 \left(\frac{\sqrt{1+0,9}}{2+0,9} \right) = 0,4412 \end{aligned}$$

12. a) Por aplicación reiterada de la fórmula de Rodrigues:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n \cdot n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

se obtiene:

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$$

en donde es de notar la simetría de las funciones: las pares son simétricas y las impares antisimétricas. Esta propiedad es general para todo el conjunto $P_n(x)$ de Legendre.

b) La ortogonalidad entre P_2 y P_3 se establece con rapidez:

$$\int_{-1}^1 P_2(x) \cdot P_3(x) dx = 0$$

en base a la paridad del integrando que es impar sobre un intervalo simétrico sobre el origen. En general ésta es también una propiedad que cumplen dos a dos todos los $P_n(x)$ (ortogonalidad del conjunto) independientemente de la paridad del integrando $P_n \cdot P_m (n \neq m)$.

13. Los potenciales de interacción dados dependen sólo del módulo de la distancia entre las partículas:

$$V_{LJ}(|\mathbf{r} + \mathbf{x}|) = V_{LJ} \left[\{ (r_1 + x_1)^2 + (r_2 + x_2)^2 + (r_3 + x_3)^2 \}^{1/2} \right]$$

y desarrollando en serie en torno a $\mathbf{x} = 0$ tenemos:

$$V_{LJ}(|\mathbf{r} + \mathbf{x}|) \simeq V_{LJ}(r) + \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial V_{LJ}}{\partial x_i} \right)_{\mathbf{x}=0} \cdot x_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial^2 V_{LJ}}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{\mathbf{x}=0} \cdot x_i x_j$$

con lo que el potencial GFH queda:

$$V_{GFH}(r) \simeq \left(\frac{6\mu}{\pi\beta\hbar^2} \right)^{3/2} \iiint_{-\infty}^{\infty} V_{LJ}(r) \cdot \exp \left[-6\mu x^2 / \beta\hbar^2 \right] dx_1 dx_2 dx_3 +$$

$$+ \left(\frac{6\mu}{\pi\beta\hbar^2} \right)^{3/2} \iiint_{-\infty}^{\infty} \left\{ \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial V_{LJ}}{\partial x_i} \right)_{\mathbf{x}=0} \cdot x_i \right\} \cdot \exp \left[-6\mu x^2 / \beta\hbar^2 \right] \cdot dx_1 dx_2 dx_3 +$$

$$+ \left(\frac{6\mu}{\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2} \iiint_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial V_{LJ}}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{x=0} \cdot x_i x_j \right\} \cdot \exp \left[-6\mu x^2 / \beta \hbar^2 \right] \cdot dx_1 dx_2 dx_3$$

La expresión anterior se reduce a

$$V_{GFH}(r) \simeq V_{LJ}(r) + \frac{1}{2} \left(\frac{6\mu}{\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \iiint_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial^2 V_{LJ}}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{x=0} \cdot x_i x_j \cdot \exp \left[-6\mu x^2 / \beta \hbar^2 \right] \cdot dx_1 dx_2 dx_3$$

ya que el factor preintegral coincide con la constante de normalización de la función exponencial (gaussiana) empleada y además, por paridad, los términos lineales en x_i se anulan.

Para evaluar las integrales restantes conviene separar la doble suma en i y j en dos partes: una sobre $i=j$ y otra sobre $i \neq j$:

$$\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 = \sum_{i=1}^3 + \sum_{i \neq j}$$

con lo que únicamente sobreviven las integrales en las que $i=j$, pues de nuevo por paridad las otras se anulan.

En resumen, el potencial gaussiano GFH queda reducido a:

$$V_{GFH}(r) \simeq V_{LJ}(r) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{6\mu}{\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2} \iiint_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial^2 V_{LJ}}{\partial x_i^2} \right)_{x=0} \cdot x_i^2 \cdot \exp \left[-6\mu x^2 / \beta \hbar^2 \right] \cdot dx_1 dx_2 dx_3 = V_{LJ}(r) + \frac{1}{2} \left(\frac{6\mu}{\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial^2 V_{LJ}}{\partial x_i^2} \right)_{x=0} \iiint_{-\infty}^{\infty} x_i^2 \cdot \exp \left[-6\mu x^2 / \beta \hbar^2 \right] \cdot dx_1 dx_2 dx_3$$

La simetría implícita entre las variables x_i ($x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = x^2$) hace que la integral pueda factorizarse fuera del sumatorio sobre i , siendo su valor ($i=1$):

$$\iiint_{-\infty}^{\infty} x_1^2 \exp[-6\mu x^2/\beta\hbar^2] dx_1 dx_2 dx_3 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \left(\frac{\beta\hbar^2}{6\mu}\right)^{3/2} \cdot \left(\frac{\pi\beta\hbar^2}{6\mu}\right)$$

Por sustitución directa se llega a:

$$V_{GFH}(r) \simeq V_{QFH}(r) = V_{LJ}(r) + \frac{\beta\hbar^2}{24\mu} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial^2 V_{LJ}}{\partial x_i^2} \right)_{\mathbf{x}=0}$$

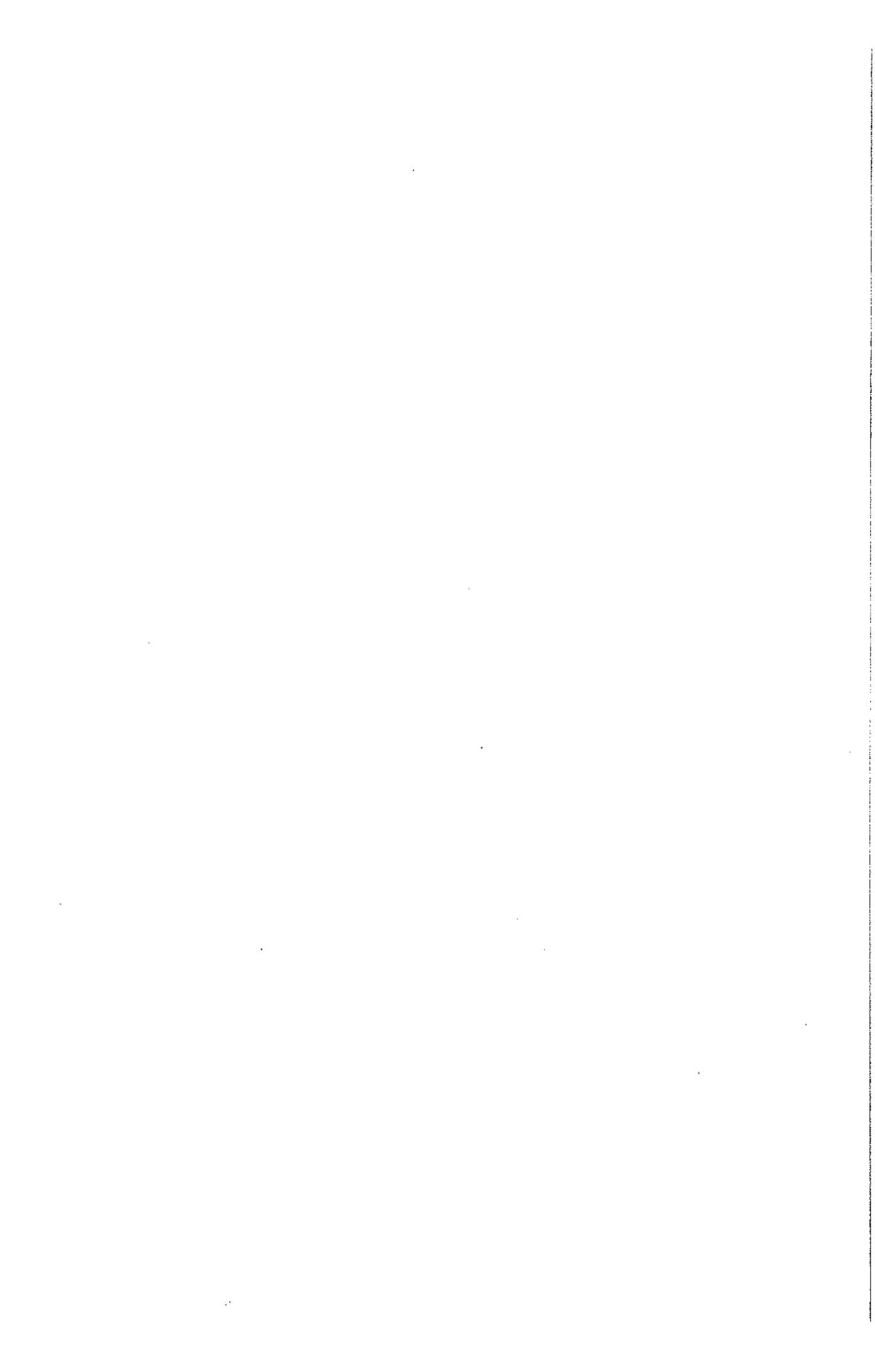
siendo inmediato establecer ($\mathbf{x} = 0 \rightarrow x_1 = x_2 = x_3 = 0$):

$$V_{QFH}(r) = V_{LJ}(r) + \frac{\beta\hbar^2}{24\mu} \left(\frac{d^2 V_{LJ}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{dV_{LJ}(r)}{dr} \right)$$

fórmula que se conoce como potencial cuadrático de Feynman-Hibbs. Esta aproximación no contiene singularidades salvo en la situación imposible en la que dos partículas ocupen el mismo lugar del espacio ($r = 0$).

Tema 3

RESOLUCION NUMERICA DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS



Vamos a ocuparnos ahora de la resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias, dividiendo al estudio en dos secciones: a) ecuaciones de primer orden; b) ecuaciones de orden superior y sistemas de ecuaciones diferenciales.

En la primera sección introduciremos los fundamentos de la metodología propia de este apartado del Análisis Numérico. El problema que deseamos resolver puede resumirse en: dada una ecuación diferencial de primer orden $y' = f(x, y)$, ¿cuál de sus soluciones $y(x)$ pasa por el punto (x_0, y_0) ? Se trata pues de un *problema de valores iniciales*. El Análisis Matemático indica que tal solución existe y es única bajo hipótesis bastante razonables que debe cumplir $f(x, y)$. La respuesta numérica a este problema, muchas veces la única posible, admite un gran número de variantes según el método empleado. Cada uno de ellos está afectado de sus propios errores, al margen de los que la misma ecuación diferencial pueda llevar asociados. Este es un asunto de la mayor trascendencia.

Comenzaremos presentando el *método de Euler* que es el más sencillo. Consiste en reemplazar la ecuación diferencial por una ecuación en diferencias de primer orden, para con ella calcular un conjunto de valores discretos y_k en los argumentos equiespaciados x_k . Aprovechando la idea anterior la generalizaremos introduciendo la *serie de Taylor* como segundo método. Esta posibilidad será aplicable siempre y cuando $f(x, y)$ sea infinitamente derivable (*analítica*). De esta manera la solución $y(x)$ se obtiene mediante un desarrollo en serie. Seguidamente estudiaremos el *método de Runge-Kutta*, más preciso que el de Euler. Aquí la sustitución de arcos de curva por segmentos de tangente (Euler) se cambia por segmentos de recta con pendiente más realista. Para concluir analizaremos el fundamento de los métodos *predictor-corrector*. La idea que los

inspira es distinta de la de los anteriores, y consiste en calcular cada nueva ordenada y_k con una elevada precisión, pretendiéndose de este modo minimizar la propagación de errores por precisión insuficiente. Como algoritmo estudiaremos el *predictor-corrector de Euler*, y como ejemplo aplicaremos varios de los métodos mencionados al estudio de una cinética de isomerización del 1,2-dimetil-ciclopropano.

El estudio de las ecuaciones diferenciales de orden superior y de los sistemas de ecuaciones diferenciales es paralelo. Una ecuación diferencial de orden n es reducible a un sistema de n ecuaciones diferenciales de primer orden con n funciones, bastando considerar como nuevas funciones incógnitas a las $(n - 1)$ primeras derivadas de la función original. La generalización de los métodos anteriores es inmediata, y estudiaremos la aplicación del *método de Runge-Kutta* y el *predictor-corrector de Milne*. Se dedicará también un epígrafe al estudio de los *problemas de contorno*, los cuales son muy comunes en las aplicaciones de la Mecánica Cuántica (partículas en cajas de potencial, etc.). Como ejemplo de aplicación se revisarán brevemente los principios del *método de la Dinámica Molecular* que es de gran ayuda en el estudio de la fase líquida.

1. ESTABILIDAD Y ERROR

Un problema muy delicado que subyace a todo este tema es el del análisis del error cometido en los cálculos. En general, los métodos que se utilizan, bien sustituyen el problema a resolver por otro más simple, o bien sustituyen la solución por una serie truncada. Todos los errores inherentes al cálculo numérico (entrada, redondeo, etc.) se ven mezclados aquí en una forma altamente compleja. En consecuencia, el seguimiento del error a lo largo de la aplicación de los diversos algoritmos está severamente limitado, quedando constreñidos casi siempre a dar estimaciones del error realmente toscas.

Es fundamental el concepto de *estabilidad* de los métodos, pues si el algoritmo no está bien adaptado al problema en cuestión, entonces pequeñas perturbaciones (errores) en los datos de entrada pueden conducir a soluciones muy apartadas de las que se buscan, tanto cualitativa como cuantitativamente. Pero hay más aún. Existen ecuaciones diferenciales *intrínsecamente inestables*, es decir, que independientemente del método aproximado elegido para resolverla, la solución obtenida siempre aparece muy separada de la realidad (Demidowitsch y col., 1980). En

estas circunstancias ¿cómo podemos garantizar la exactitud de las operaciones realizadas? Las siguientes recomendaciones resultan bastante útiles:

- i) Análisis cualitativo del problema, por ejemplo a través de métodos gráficos (isóclinas, isopolares) (Puig, 1974) que nos den una idea del hábito de las soluciones y así ayuden en la elección del método numérico.
- ii) Verificación del grado de exactitud entre la ecuación diferencial dada $y' = f(x, y)$, y la tabla de valores (x_k, y_k) obtenida vía el método numérico seleccionado.
- iii) Resolución de la ecuación diferencial por dos o tres métodos diferentes.
- iv) Manipular el espaciado $h = x_{k+1} - x_k$, aumentándolo o disminuyéndolo según convenga (Rice, 1983).

2. ECUACIONES DE PRIMER ORDEN

2.1. Método de Euler

Enunciemos sin demostración (Elsgolzt, 1977) el *teorema básico de existencia y unicidad*:

Si la ecuación diferencial $y' = f(x, y)$ con la condición inicial $y_0 = y(x_0)$ es tal que $f(x, y)$ verifica:

- i) ser continua en el rectángulo D

$$|x - x_0| \leq a \quad ; \quad |y - y_0| \leq b$$

- ii) satisfacer la condición de Lipschitz en D

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq L |y_1 - y_2| \quad ; \quad L > 0 \quad [1]$$

siendo L una constante, entonces existe una solución única $y = y(x)$, que

satisface el problema de valores iniciales anterior en el dominio $|x - x_0| \leq H$, en donde:

$$H < \min \{a, b/M, 1/L\}$$

$$M = \max_D \{|f(x, y)|\} \quad [2]$$

Dada pues una ecuación diferencial $y' = f(x, y)$ con la condición inicial (x_0, y_0) que verifique el teorema anterior, con el método de Euler aproximaremos y' por el cociente:

$$y'_k \simeq \frac{\Delta y_k}{h} = \frac{y_{k+1} - y_k}{h} \quad ; \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad [3]$$

siendo $h = x_{k+1} - x_k$ el paso de integración. Procediendo recursivamente se tiene:

$$y_{k+1} \simeq y_k + hf(x_k, y_k) \quad ; \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad [4]$$

y la solución aproximada viene dada por la sucesión:

$$(x_0, y_0) = \text{condición inicial}$$

$$x_1 = x_0 + h \quad ; \quad y_1 \simeq y_0 + hf(x_0, y_0)$$

$$x_2 = x_1 + h \quad ; \quad y_2 \simeq y_1 + hf(x_1, y_1)$$

$$x_3 = x_2 + h \quad ; \quad y_3 \simeq y_2 + hf(x_2, y_2)$$

..., etc. (Ejercicio 1).

Es fácil ver que [4] equivale a la parte lineal del desarrollo de Taylor de $y = y(x)$ en torno a los puntos (x_k, y_k) sucesivos, ya que la pendiente y' se mantiene constante entre cada pareja x_k, x_{k+1} . El error local de truncamiento en y_{k+1} vendrá por tanto dado por $h^2 y^{(2)}(\xi)/2$, con $x_k < \xi < x_{k+1}$. Para reducir su magnitud conviene usar h pequeños. El interés de este método no estriba tanto en su utilidad como en su valor instructivo, ya que proporciona una demostración del teorema de existencia.

2.2. Serie de Taylor

La generalización inmediata del método previo es proponer una serie de Taylor para aproximar la solución de la ecuación diferencial, en tanto

que $y' = f(x, y)$ sea una función analítica en el dominio que nos interese. Dentro de esta posibilidad podemos emplear dos esquemas de aproximación: a) *numérico*; b) *coeficientes indeterminados*.

a) *Solución numérica*

Dada la ecuación diferencial $y' = f(x, y)$ con la condición inicial (x_0, y_0) , calcularemos $y(x)$ como la sucesión de puntos (x_k, y_k) :

$$y_{k+1} \simeq y_k + hf(x_k, y_k) + \frac{1}{2}h^2 \left[\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} + \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \cdot f(x, y) \right]_k + \dots \quad [5]$$

Nótese que cada nuevo punto calculado (x_{k+1}, y_{k+1}) se utiliza como nuevo centro de desarrollo en la determinación del siguiente. Claramente, esto es mejor que mantener fijo el centro en (x_0, y_0) (Ejercicio 2). La convergencia de este método es más rápida que la del de Euler, y el error local de truncamiento viene dado por el último término despreciado en la serie (resto de Lagrange). Así, si en [5] nos restringimos hasta segundo orden inclusive, el error local será:

$$E = \frac{h^3}{6} |y^{(3)}(\xi)| \quad ; \quad x_k < \xi < x_{k+1} \quad [6]$$

b) *Coeficientes indeterminados*

Consiste esta alternativa en suponer que la solución al problema de valores iniciales puede ser representada vía una serie de potencias (función analítica). Supondremos en lo que sigue $x_0 = 0$ sin pérdida de generalidad y escribiremos:

$$y = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i \quad [7]$$

Utilizando este desarrollo, la ecuación diferencial original $y' = f(x, y)$ se transforma en:

$$\sum_{i=1}^{\infty} i a_i x^{i-1} = f\left(x, \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i\right) \quad [8]$$

expresión que conviene replantear en la forma:

$$\sum_{j=0}^{\infty} (j+1)a_{j+1}x^j = f\left(x, \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j\right) \quad [9]$$

al objeto de que todos los sumatorios recorran los mismos índices. Evidentemente, la forma de la función $f(x, y)$ obligará a realizar nuevos cambios como el anterior de [9]. Hecho esto se tendrán dos series de potencias que deben ser iguales término a término. Comparando los coeficientes de x^j uno a uno se llegará a un sistema de ecuaciones recursivo del que por la condición inicial se conoce el primer valor a_0 :

$$y_0 = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x_0^i = \{x_0 = 0\} = a_0$$

El resto de los a_i son normalmente combinaciones aritméticas de valores precedentes a_0, a_1, \dots, a_{i-1} .

Este método resulta ser muy utilizado (oscilador armónico cuántico, etc.) (Schiff, 1981), pero para garantizar la validez del resultado hay que determinar la región en donde el desarrollo en serie [7] es convergente. Esto se logra evaluando el radio de convergencia R que se determina por cualquiera de los criterios (Knopp, 1956; Spiegel, 1971):

$$R = \frac{1}{H} \begin{cases} H = \lim_{i \rightarrow \infty} \left| \frac{a_i}{a_{i-1}} \right| & \text{(D'Alembert)} \\ H = \limsup_{i \rightarrow \infty} \sqrt[i]{|a_i|} & \text{(Cauchy-Hadamard)} \end{cases} \quad [10]$$

El desarrollo en serie [7] será pues (absolutamente) convergente, al menos, en el intervalo abierto:

$$-R < x < R \quad [11]$$

o con mayor generalidad para centros arbitrarios x_0 :

$$y = \sum_{i=0}^{\infty} a_i (x - x_0)^i \quad ; \quad x_0 - R < x < x_0 + R \quad [12]$$

Precisando más [11], diremos que para $H = 0$, la serie converge absolutamente en todas partes; para $H = +\infty$, la serie diverge para todo $x \neq 0$; y, finalmente, para $0 < H < +\infty$ la serie diverge para $|x| > R$.

Repárese en que el criterio de D'Alembert exige la existencia del límite expresado. En general se tiene siempre que:

$$\liminf_{i \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{i-1}}{a_i} \right| \leq R \leq \limsup_{i \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{i-1}}{a_i} \right|$$

Resta por considerar lo que sucede en los bordes del intervalo, es decir si la convergencia se amplía al intervalo cerrado:

$$-R \leq x \leq R$$

Para responder a esta pregunta (Ejercicio 3) suelen utilizarse criterios de comparación de series. Haciendo en la serie de potencias $|x| = R$ tenemos una serie numérica. Si existe alguna otra serie numérica, absolutamente convergente, que sea mayorante (mayor o igual término a término en valor absoluto) de la primera, ésta convergerá en los bordes.

2.3. Método de Runge-Kutta

La falta de aproximación que muestra el método de Euler (linealidad sobre la tangente) puede enmendarse, en parte, tomando el incremento $\Delta y_k = y_{k+1} - y_k$ en la forma modificada (primera fórmula de Runge):

$$\Delta^{(1)}y_k = y_{k+1} - y_k = hf(x_k + h/2, y_k + hf(x_k, y_k)/2) \quad [13]$$

Esto equivale a tomar la pendiente del campo direccional en el punto medio M del segmento de tangente que consideraría el método de Euler (Fig. 1). El arco de curva quedaría pues aproximado por una cuerda a tal arco. Con la expresión [13] el error cometido es de tercer orden $O(h^3)$ (Ejercicio 4).

Todavía pueden darse otras expresiones para Δy (Puig, 1974). Así la segunda fórmula de Runge:

$$\Delta^{(2)}y_k = y_{k+1} - y_k = \frac{h}{2}f(x_k, y_k) + \frac{h}{2}f(x_k + h, y_k + R_1) = \frac{1}{2}(R + R_2)$$

donde: [14]

$$\begin{aligned} R &= hf(x_k, y_k) \\ R_1 &= hf(x_k + h, y_k + R) \\ R_2 &= hf(x_k + h, y_k + R_1) \end{aligned} \quad [15]$$

es de error también $O(h^3)$ y proviene de corregir dos veces Δy_k .

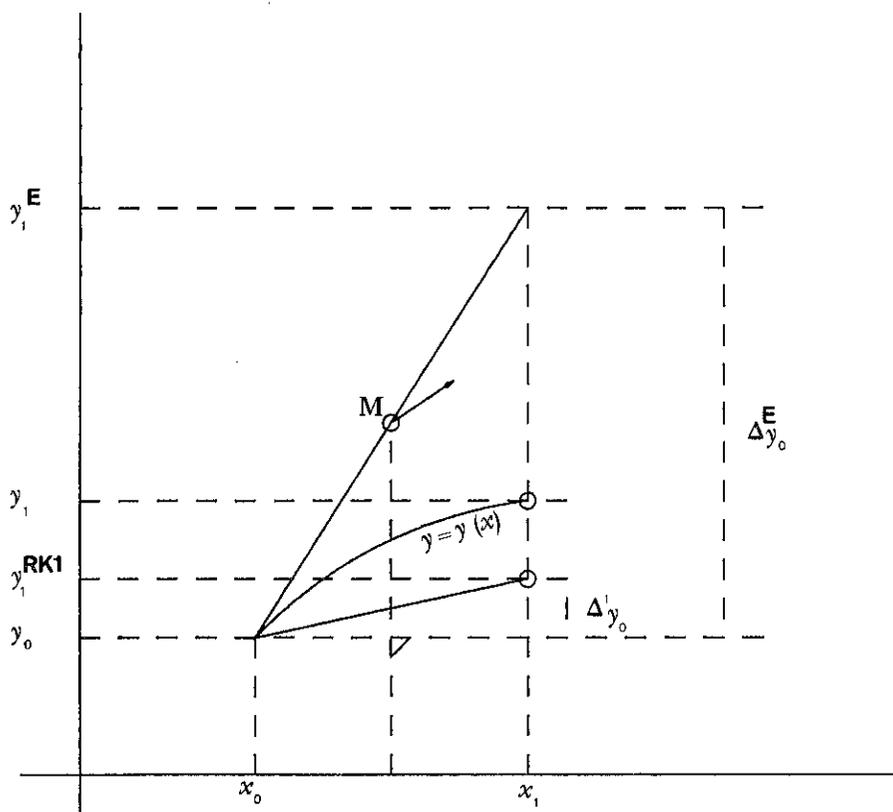


Figura 1.—Diagrama comparativo entre el algoritmo de Euler (E) y el de Runge (1.ª fórmula RK1).

Si ahora combinamos $\Delta^{(1)}$ con $\Delta^{(2)}$ en la forma:

$$\Delta^{(3)}y_k = y_{k+1} - y_k = \frac{2}{3}\Delta^{(1)}y_k + \frac{1}{3}\Delta^{(2)}y_k \quad [16]$$

tenemos la tercera fórmula de Runge que coincide con el Δy de Taylor («verdadero») hasta términos en h^3 inclusive (error $O(h^4)$).

Finalmente, aumentando las correcciones, surge la popular expresión de Runge-Kutta que da errores de quinto orden $O(h^5)$:

$$\Delta_{RK}y_k = y_{k+1} - y_k = \frac{1}{6}R + \frac{1}{3}R_1 + \frac{1}{3}R_2 + \frac{1}{6}R_3 \quad [17]$$

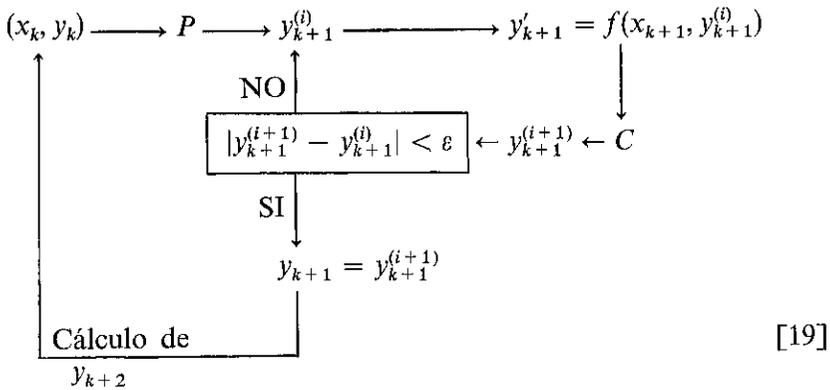
en donde (Ejercicio 5):

$$\begin{aligned}
 R &= hf(x_k, y_k) \\
 R_1 &= hf(x_k + h/2, y_k + R/2) \\
 R_2 &= hf(x_k + h/2, y_k + R_1/2) \\
 R_3 &= hf(x_k + h, y_k + R_2)
 \end{aligned}
 \tag{18}$$

2.4. Método predictor-corrector de Euler

La idea subyacente a los métodos *predictor-corrector* es distinta de las anteriores. Se comienza utilizando una fórmula predictora P para evaluar inicialmente la ordenada y_k del paso en que estemos. Posteriormente se refina este resultado a través de una fórmula correctora C que, mediante un proceso iterativo que involucra a la ecuación diferencial misma, arrojará el valor y_k con la precisión ε deseada.

Una vez conocido un punto (x_k, y_k) , el cálculo de y_{k+1} puede esquematizarse como sigue:



El predictor-corrector más sencillo es el de Euler:

— fórmula predictora P :

$$y_{k+1} \simeq y_k + hf(x_k, y_k)$$

— fórmula correctora C:

$$y_{k+1}^{(i+1)} \simeq y_k + \frac{1}{2}h[f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1}^{(i)})] \quad [20]$$

Notemos que en la fórmula correctora y_{k+1} aparece en los dos miembros pero con superíndices (*pasos de convergencia*) diferentes. La corrección se itera hasta convergencia en y_{k+1} y se pasa después al punto siguiente y_{k+2} (Ejercicio 6).

3. EJEMPLO DE APLICACION: CINETICA DE ISOMERIZACION CIS-TRANS

Consideremos ahora como aplicación el seguimiento de la cinética de isomerización cis-trans del 1,2-dimetil-ciclopropano a $T = 453^\circ\text{C}$. La formación del isómero trans viene expresada por la ecuación diferencial:

$$\frac{dc}{dt} = 2,35 \times 10^{-3}(a - c) - 1,01 \times 10^{-3}c$$

en donde a es el porcentaje inicial de cis, c el de trans en el instante $t(\text{sg})$ y $(a - c)$ el de cis también en t . Dada la condición inicial $t_0 = c_0 = 0$, lo que hace $a = 100$, resolveremos la sencilla ecuación anterior por los métodos de Euler, predictor-corrector de Euler y Runge-Kutta. Utilizaremos un paso de integración $h = 45 \text{ sg}$ y compararemos con la solución exacta:

$$c = \frac{2,35 \times 10^{-1}}{3,36 \times 10^{-3}} [1 - \exp(-3,36 \times 10^{-3}t)]$$

que se determina rápidamente por integración.

Los resultados quedan resumidos en la tabla adjunta:

t(seg)	EULER	P-C EULER	RUNGE-KUTTA	EXACTA
45	10,575000	9,831722	9,814300	9,814345
90	19,551060	18,233079	18,251422	18,251500
135	27,169940	25,460185	25,504617	25,504717
180	33,636845	31,677163	31,740017	31,740131
225	39,125954	37,025199	37,100444	37,100566
270	43,785110	41,625744	41,708676	41,708802
315	47,739801	45,583273	45,670264	45,670391
360	51,096543	49,987662	49,075948	49,076072

Son de notar la mejor aproximación que realiza Runge-Kutta y la peor correspondiente a los de Euler, incluso cuando se emplea la predicción-corrección.

4. ECUACIONES DE ORDEN SUPERIOR Y SISTEMAS DE ECUACIONES DIFERENCIALES

La clave para abordar el estudio de estas nuevas cuestiones está en darse cuenta de que una ecuación diferencial de orden n es reducible a un sistema de n ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden. Dada la ecuación diferencial:

$$y^{(n)} = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}) \quad [21]$$

el problema de valor inicial consiste en calcular una solución $y = y(x)$ tal que:

$$y(x_0) = y_0 \quad ; \quad y'(x_0) = y'_0 \quad ; \quad \dots \quad ; \quad y^{(n-1)}(x_0) = y_0^{(n-1)} \quad [22]$$

en donde $x_0, y_0, y'_0, \dots, y_0^{(n-1)}$, son números dados. Ahora, si en [21] introducimos las variables auxiliares:

$$y_1 = y' \quad ; \quad y_2 = y'' \quad ; \quad \dots \quad ; \quad y_{n-1} = y^{(n-1)} \quad [23]$$

tal ecuación diferencial se transforma en el sistema normal equivalente:

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= y_1 \\ \frac{dy_1}{dx} &= y_2 \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{dy_{n-2}}{dx} &= y_{n-1} \\ \frac{dy_{n-1}}{dx} &= f(x, y, y_1, \dots, y_{n-1}) \end{aligned} \quad [24]$$

que no es más que un caso particularmente sencillo del más general de un sistema de ecuaciones de primer orden:

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dx} &= f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \frac{dy_2}{dx} &= f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{dy_n}{dx} &= f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \end{aligned} \quad [25]$$

Debido a esta equivalencia el estudio de ambos problemas puede realizarse conjuntamente.

Para que el sistema [25] *tenga solución y ésta sea única*, debe satisfacer para un entorno generalizado D de la condición inicial:

$$D = \{|x - x_0| < a; |y_1 - y_1^{(0)}| < b_1 ; \dots ; |y_n - y_n^{(0)}| < b_n\} \quad [26]$$

las siguientes condiciones (Elsgolts, 1977):

i) Las funciones f_1, f_2, \dots, f_n deben ser continuas y definidas en el entorno D .

ii) Cada función f_i ($i = 1, n$) debe satisfacer en D la condición general de Lipschitz:

$$|f_i(x, \tilde{y}_1, \dots, \tilde{y}_n) - f_i(x, y_1, \dots, y_n)| \leq L \cdot \sum_{j=1}^n |\tilde{y}_j - y_j| \quad ; \quad i = 1, 2, \dots, n \quad [27]$$

siendo L la constante de Lipschitz válida para todo i , y teniendo:

$$(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \in D \quad ; \quad (x, \tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \dots, \tilde{y}_n) \in D$$

Verificadas estas condiciones existirá una única solución que pase por el punto generalizado $P_0(x_0, y_1^{(0)}, y_2^{(0)}, \dots, y_n^{(0)})$, y que poseerá el significado deseado dentro de un intervalo $|x - x_0| < h$ (normalmente $h < a$).

4.1. Método de Runge-Kutta

Los métodos numéricos ya dados para ecuaciones de primer orden son fácilmente aplicables a los sistemas de ecuaciones diferenciales de primer orden. Por simplicidad consideremos el caso de un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas:

$$\begin{aligned} y' &= f(x, y, z) = \frac{dy}{dx} \\ z' &= g(x, y, z) = \frac{dz}{dx} \end{aligned} \quad [28]$$

con la condición inicial (x_0, y_0, z_0) . La importancia de esta particularización es clara recordando que una buena parte de los problemas en mecánica clásica y cuántica involucran ecuaciones diferenciales de segundo orden.

Veamos cómo enfocar la resolución del sistema anterior mediante el método de Runge-Kutta analizando con algún detalle el cálculo de (x_1, y_1, z_1) . Los cálculos restantes consistirían en repetir sistemáticamente lo que sigue, tomando como inicial el último punto calculado. El esque-

ma está orientado a calcular los incrementos Δy , Δz , para $x_1 = x_0 + h$, necesitando los valores previos:

$$\begin{aligned}
 R^y &= hf(x_0, y_0, z_0) \\
 R^z &= hg(x_0, y_0, z_0) \\
 R_1^y &= hf(x_0 + h/2, y_0 + R^y/2, z_0 + R^z/2) \\
 R_1^z &= hg(x_0 + h/2, y_0 + R^y/2, z_0 + R^z/2) \\
 R_2^y &= hf(x_0 + h/2, y_0 + R_1^y/2, z_0 + R_1^z/2) \\
 R_2^z &= hg(x_0 + h/2, y_0 + R_1^y/2, z_0 + R_1^z/2) \\
 R_3^y &= hf(x_0 + h, y_0 + R_2^y, z_0 + R_2^z) \\
 R_3^z &= hg(x_0 + h, y_0 + R_2^y, z_0 + R_2^z)
 \end{aligned} \tag{29}$$

obteniéndose:

$$\begin{aligned}
 y_1 &= y_0 + \frac{1}{6}R^y + \frac{1}{3}R_1^y + \frac{1}{3}R_2^y + \frac{1}{6}R_3^y \\
 z_1 &= z_0 + \frac{1}{6}R^z + \frac{1}{3}R_1^z + \frac{1}{3}R_2^z + \frac{1}{6}R_3^z
 \end{aligned} \tag{30}$$

Con ayuda de este algoritmo puede resolverse el ejercicio 7, cuya solución analítica puede encontrarse indicada en (Platt, 1974).

4.2. Predictor-corrector de Milne

Como antes, si deseamos que la precisión de nuestros cálculos se mantenga dentro de unos límites establecidos de antemano, utilizaremos un método predictor-corrector. Vamos a ocuparnos ahora del *predictor-corrector de Milne* que presenta un error de truncamiento de quinto orden $O(h^5)$. Para una ecuación diferencial de primer orden $y' = f(x, y)$, a partir de la condición inicial (x_0, y_0) , haremos:

— fórmula predictora

$$y_{k+1} \simeq y_{k-3} + \frac{4}{3}h(2y'_{k-2} - y'_{k-1} + 2y'_k) \tag{31}$$

— fórmula correctora

$$y_{k+1} \simeq y_{k-1} + \frac{h}{3}(y'_{k+1} + 4y'_k + y'_{k-1}) \quad [31]$$

(Ejercicio 8). Por inspección comprobamos que se requieren cuatro valores y_k previos a cualquier comienzo del cálculo: $y_{-3}, y_{-2}, y_{-1}, y_0$. Dado que sólo se dispone del inicial (x_0, y_0) , los tres restantes pueden determinarse con la serie de Taylor o con el método de Runge-Kutta.

Las ecuaciones [31] aplicadas al caso típico de sistema:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= f(x, y, z) \\ \frac{dz}{dx} &= g(x, y, z) \end{aligned} \right\} (x_0, y_0, z_0) = \text{condición inicial} \quad [32]$$

necesitarán de ocho valores previos (4 para y , 4 para z). La predicción se realiza conjuntamente en la forma:

$$\begin{aligned} y_{k+1} &\simeq y_{k-3} + \frac{4}{3}h(2f_{k-2} - f_{k-1} + 2f_k) \\ z_{k+1} &\simeq z_{k-3} + \frac{4}{3}h(2g_{k-2} - g_{k-1} + 2g_k) \end{aligned} \quad [33]$$

y a continuación se lleva a cabo el ciclo iterativo corrector con:

$$\begin{aligned} y_{k+1} &\simeq y_{k-1} + \frac{h}{3}(f_{k+1} + 4f_k + f_{k-1}) \\ z_{k+1} &\simeq z_{k-1} + \frac{h}{3}(g_{k+1} + 4g_k + g_{k-1}) \end{aligned} \quad [34]$$

Es interesante darse cuenta de que la fórmula predictora proviene, en este caso, de integrar un polinomio de Stirling de segundo grado ($k = -1, 0, 1$) sobre un intervalo mayor que el de colocación ($k = -2, -1, 0, 1, 2$). La corrección es, sin embargo, la regla de Simpson aplicada a $y'(x)$. La comprobación de estos detalles es rutinaria y se deja a cargo del lector.

4.3. Problemas de contorno

Hasta aquí nos hemos ocupado de los problemas de valores iniciales. Sin embargo, una gran cantidad de problemas de interés conducen a ecuaciones diferenciales de segundo orden con valores definidos para la función en la frontera. Se conoce a estos problemas como de *valores de contorno o de frontera*, y están estrechamente emparentados con el cálculo variacional y el de valores propios. El planteamiento es el siguiente:

Determinar la solución $y(x)$ de la ecuación diferencial de segundo orden:

$$y'' = f(x, y, y') \quad [35]$$

definida en el intervalo $a \leq x \leq b$ y sujeta a las condiciones:

$$y(a) = A \quad ; \quad y(b) = B \quad [36]$$

El estudio en profundidad de este problema es intrincado, pues exige un conocimiento extensivo del álgebra matricial y de los teoremas de existencia. Por ello, nos dedicaremos aquí a buscar la solución numérica de [35]-[36] por los métodos ya presentados en un caso en el que estos procedimientos son posibles (Scheid, 1972).

Si la ecuación diferencial es lineal:

$$y'' = f_1(x)y' + f_2(x)y + f_3(x) \quad [37]$$

el problema de valores en la frontera es reducible a uno de valores iniciales. Basta recordar que la solución general de [37] puede expresarse como la superposición de una solución particular $Y(x)$ de ella y la solución general $y^h(x)$ de la homogénea asociada:

$$y'' = f_1(x)y' + f_2(x)y \quad [38]$$

que se expresa:

$$y^h(x) = c_1 y_1(x) + c_2 y_2(x) \quad [39]$$

donde c_1 y c_2 son constantes arbitrarias (reales o complejas) y las funciones $y_1(x)$ e $y_2(x)$ son dos soluciones particulares de [38] linealmente independientes.

La solución general de [37] con las condiciones [36] la expresaremos como:

$$y(x) = c_1 y_1(x) + c_2 y_2(x) + Y(x) \quad [40]$$

La tarea es ahora determinar $c_1, c_2, y_1(x), y_2(x)$ e $Y(x)$ para obtener la solución individual que buscamos. Comencemos por las soluciones particulares y_1, y_2 , de la homogénea. Como ambas deben ser linealmente independientes, basta que el wronskiano asociado sea distinto de cero para algún x del dominio $a \leq x \leq b$:

$$W(y_1, y_2) = \begin{vmatrix} y_1(x) & y_1'(x) \\ y_2(x) & y_2'(x) \end{vmatrix} \neq 0 \quad ; \quad a \leq x \leq b \quad [41]$$

En realidad esta condición es más fuerte, ya que si existe un x que verifica [41], entonces $W \neq 0$ para todo x (Platt, 1974). Para garantizar [41] bastará calcular y_1 e y_2 tales que verifiquen:

$$\begin{aligned} y_1(a) &= 1 & y_1'(a) &= 0 \\ y_2(a) &= 0 & y_2'(a) &= 1 \end{aligned} \quad [42]$$

con lo que:

$$W(x = a) = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 1 \neq 0 \quad [43]$$

De esta manera, ambas soluciones particulares de la ecuación homogénea [38] pueden evaluarse numéricamente utilizando cualquiera de los métodos ya vistos.

La determinación de $Y(x)$ se lleva a cabo numéricamente con la ecuación original [37], empleando las condiciones iniciales más sencillas:

$$Y(a) = 0 \quad ; \quad Y'(a) = 0 \quad [44]$$

Finalmente, las constantes c_1 y c_2 se obtienen del sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} A &= c_1 y_1(a) + c_2 y_2(a) + Y(a) \\ B &= c_1 y_1(b) + c_2 y_2(b) + Y(b) \end{aligned} \quad [45]$$

que conduce a:

$$\begin{aligned}c_1 &= A \\c_2 &= (B - Ay_1(b) - Y(b))/y_2(b)\end{aligned}\quad [46]$$

en donde suponemos que $y_2(b) \neq 0$.

Es importante resaltar que en todo el desarrollo previo hemos supuesto que la solución buscada $y(x)$ existe y es única. Sin embargo, la complejidad subyacente a este problema es, como ya se dijo, muy grande. Efectivamente, un problema de valores en la frontera puede (Elsogoltz, 1977):

- i) No tener solución.
- ii) Tener una o varias soluciones.
- iii) Tener infinitas soluciones.

Como ejemplo podemos considerar el conocido problema balístico, en el que se pide la trayectoria de un móvil sujeto a la ecuación diferencial:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}(t, \mathbf{r}, d\mathbf{r}/dt) \quad [47]$$

con las condiciones de contorno $\mathbf{r}(t_0) = \mathbf{r}_0$; $\mathbf{r}(t_1) = \mathbf{r}_1$. En general, este problema no posee solución única. Recuérdese el caso del tiro oblicuo, sin rozamiento del aire, en el que desde un origen dado O y con una misma velocidad inicial $|\mathbf{v}_0|$ un mismo punto P puede alcanzarse siguiendo dos trayectorias diferentes (Fig. 2) con ángulos de inclinación α una de ellas, y $(90 - \alpha)$ la otra. Aún más, si la \mathbf{v}_0 inicial es muy grande, el punto P podría alcanzarse desde O después de haber dado varias vueltas a la Tierra.

Por último, señalaremos que si la ecuación [35] no es lineal, el método considerado aquí no sirve. En estos casos podría obtenerse una estimación a la solución de [35]-[36] resolviendo un gran número de problemas de valores iniciales con distintos valores $y'(a)$, para por interpolación determinar el valor $y'_i(a)$ que pertenezca a la solución $y(x)$ tal que $y(b) = B$. Obviamente, este método es altamente inexacto. Por otra parte, existen caminos mucho más apropiados para resolver el problema general del que hablamos (Scheid, 1972; Demidowitsch y col., 1980).

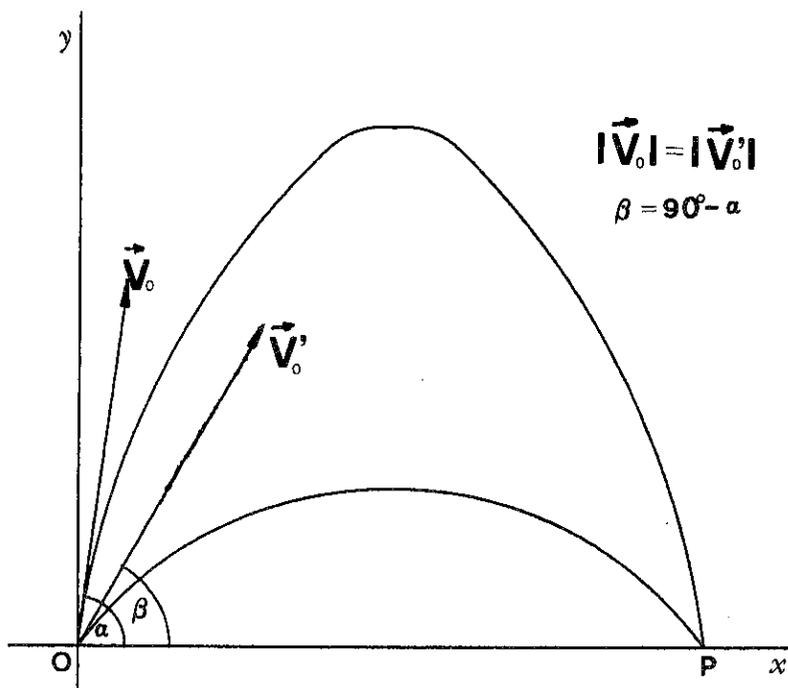


Figura 2.—El problema del tiro oblicuo como uno de valores en la frontera con, al menos, dos soluciones.

5. EJEMPLO DE APLICACION: EL METODO DE LA DINAMICA MOLECULAR PARA ESTUDIOS SOBRE LA FASE LIQUIDA

Desde la aparición de los ordenadores, con posibilidades de cálculo veloz y almacenamiento ingente de datos, han podido abordarse un gran número de estudios interesantes en la Química Física. Dentro de la perspectiva teórica, estos estudios están mayormente ligados al conocido problema de los N cuerpos (determinación de funciones de onda moleculares, propiedades de sistemas macroscópicos, etc.). En este contexto vamos a ocuparnos aquí de la descripción somera de un método de cálculo numérico que es extremadamente útil en el estudio mecanoestático de la fase líquida: *la Dinámica Molecular*.

La Dinámica Molecular es un tipo de «experimento numérico» basado en los conceptos de promedio temporal de Maxwell y Boltzmann.

La aplicación aquí será, dentro de la Mecánica Estadística Clásica, plantear el estudio de un líquido compuesto por partículas esféricas (Ar, Kr, etc.) idénticas. Cabe decir que el comportamiento de los líquidos (exceptuando los líquidos cuánticos como el He, H₂, etc.) queda suficientemente bien descrito por la aproximación clásica (Sesé y Criado, 1990) *siempre y cuando* la longitud de onda de De Broglie λ asociada a sus partículas sea mucho menor que la mínima dimensión significativa (clásica) s_0 del sistema:

$$\lambda = \frac{\hbar}{p} \ll s_0 \quad ; \quad p = \text{impulso} \quad [48]$$

De esta forma, los efectos cuánticos (siempre presentes) pueden tomarse como despreciables. Alternativamente, la condición anterior puede expresarse en la forma:

$$kT \gg \Delta E \quad [49]$$

que nos dice que la aproximación clásica es lícita cuando el ruido térmico kT es mucho mayor que el espaciado medio entre los niveles de energía cuánticos del sistema.

La esencia del método de la Dinámica Molecular consiste en resolver las ecuaciones de movimiento clásicas de Newton para todas y cada una de las partículas i , sumergidas en el «mar» creado por el resto de sus compañeras j . De esta resolución deberemos guardar la información concerniente a las posiciones $\mathbf{q}_i(t)$, impulsos $\mathbf{p}_i(t)$ y aceleraciones $\mathbf{a}_i(t)$:

$$\frac{d\mathbf{q}_i}{dt} = \frac{\mathbf{p}_i}{m} \quad i = 1, 2, \dots \quad [50]$$

$$m\mathbf{a}_i = \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij}(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) \quad i, j = 1, 2, \dots \quad [51]$$

en donde m es la masa de una partícula y \mathbf{F}_{ij} la fuerza que actúa entre i y j , que se calcula según:

$$\mathbf{F}_{ij} = -\text{grad } u_{ij} = -\nabla \cdot u_{ij} \quad [52]$$

siendo u_{ij} el potencial intermolecular (Lennard-Jones, etc.) entre ambas partículas.

Se ha supuesto que no hay campos externos actuando sobre el sistema. Por lo tanto, tenemos las constantes de movimiento siguientes: energía total E e impulso lineal total \mathbf{M} , que vienen dadas por:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \frac{[\mathbf{p}_i(t)]^2}{m} + \sum_{i < j} u_{ij}(t) \quad [53]$$

$$\mathbf{M} = \sum_i \mathbf{p}_i(t) \quad [54]$$

Notemos en este punto que una muestra líquida de interés experimental común suele tener del orden de 10^{23} partículas, por lo que cualquier trabajo teórico con tamaño número resultaría imposible, incluso con el más poderoso de los ordenadores actuales. Es necesario entonces diseñar un camino alternativo, si bien aproximado, para realizar el estudio.

Se elige pues un tamaño de muestra (número de partículas) N_c reducido, normalmente entre 100 y 1.000, y se procede a situarlas en un recinto cúbico de volumen fijo $V_c = L_c^3$. Este recinto se denomina celda básica de simulación y se ve rodeado de infinitas repeticiones idénticas a él, en forma, tamaño y configuración interna de las partículas, a lo largo de las tres direcciones espaciales. Cualquier suceso o movimiento que tiene lugar en la celda básica se repite periódicamente en todas sus imágenes. Las partículas pueden cambiar de celda y, aunque no cambien, interaccionar con las pertenecientes a celdas distintas. Por razones operativas, el rango de las interacciones intermoleculares suele tomarse finito, por lo que se utilizan esquemas aproximados de truncación. Estos se resumen, aproximadamente, en que si la distancia r_{ij} entre i y j es mayor que un cierto valor l (normalmente $l = L_c/2$), la interacción ij es despreciada.

Al proceso anterior de parrillado del espacio físico en celdas idénticas se le denomina implantación de «condiciones de contorno periódicas» sobre la celda básica (Fig. 3). Se espera con él, a partir de una pequeña muestra N_c , reproducir el comportamiento del líquido real. El número N_c y el volumen V_c se toman para que se cumpla la igualdad:

$$\frac{N_c}{V_c} = \frac{N}{V} = \rho = \text{densidad macroscópica} \quad [55]$$

debiéndose optimizar ambos valores para que los resultados finales sean fiables (significativos en el límite termodinámico). Sobre todos estos asuntos se volverá a insistir en el Tema 9 al tratar de otro «experimento numérico» llamado de *Monte Carlo*.

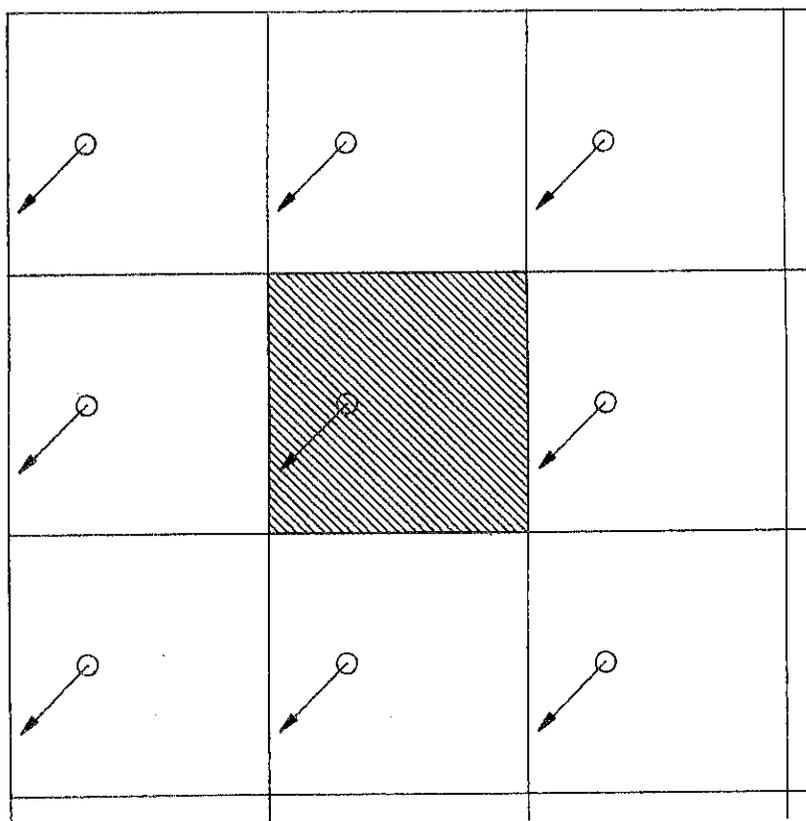


Figura 3.—Condiciones de contorno periódicas para el estudio de líquidos.

El colectivo mecanoestadístico correspondiente al esquema de trabajo anterior es una versión ampliada del *colectivo microcanónico* (N, V, E), que se denomina *colectivo dinámico-molecular* (N, V, E, \mathbf{M}). En este último, además de ser constantes el número de partículas N , el volumen V y la energía total E del sistema, se mantiene constante el impulso lineal total \mathbf{M} .

El procedimiento de cálculo a seguir es pues fijarse en la celda básica y con las condiciones de contorno periódicas resolver [50]-[51] para las N_c partículas. Se tiene así un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas (dadas las conexiones \mathbf{F}_{ij}) que se puede resolver numéricamente una vez establecidas las condiciones iniciales $\mathbf{q}_i(0)$, $\mathbf{p}_i(0)$ ($i = 1, N_c$). Estas suelen elegirse con arbitrariedad, por ejemplo las posiciones iniciales según la red cristalina del sólido y las velocidades al azar según la distribución de Maxwell. En todo el proceso es fundamental garantizar la independencia (de los resultados finales) de la condición inicial.

Los métodos de integración numérica a emplear aquí deben ser del tipo predictor-corrector. Es fácil comprender el porqué, ya que lo que se está haciendo en definitiva es determinar las trayectorias de las partículas en el seno del líquido idealizado. Sabemos que, en ecuaciones diferenciales, pequeñas imprecisiones numéricas en un resultado amplifican grandemente el error de posteriores evaluaciones. Desde el punto de vista gráfico (Fig. 4) si la partícula 1 debería chocar con la 2 (esferas rígidas) y salir rebotada en la dirección I, un pequeño error numérico ϵ en el ángulo de incidencia daría lugar a la trayectoria II, que se aparta mucho de la verdadera. Ni que decir tiene que este efecto se vería incrementado con choques sucesivos, y se conferiría así un carácter *artificialmente* estadístico a las trayectorias. Por todo ello se usan métodos predictor-corrector y se aprovecha al máximo el número de cifras significativas que brinde la máquina en que se calcule.

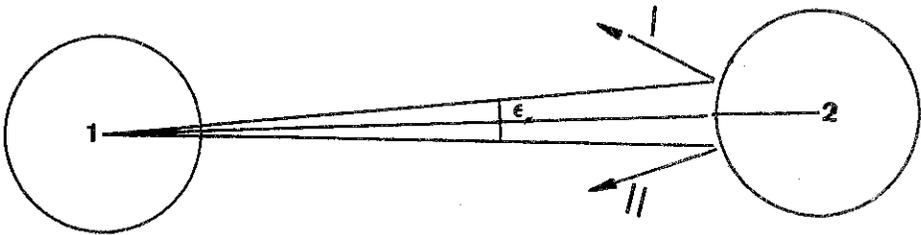


Figura 4—Efecto de una pequeña imprecisión ϵ en el choque 1-2 sobre la trayectoria de la partícula 1.

Para resolver [50]-[51] una elección sencilla (Balescu, 1975) es la siguiente. Una vez elegido el intervalo de tiempo $h = \Delta t$ para realizar las integraciones, y considerando conocidas las posiciones $\mathbf{q}_i(n-1)$ de todas las partículas en el instante t_{n-1} , así como todas las posiciones $\mathbf{q}_i(n)$, momentos $\mathbf{p}_i(n)$ y aceleraciones $\mathbf{a}_i(n)$ en t_n , se calculan las estimaciones de posición en t_{n+1} (predicción):

$$\mathbf{q}_i^*(n+1) = \mathbf{q}_i(n-1) + 2\Delta t \cdot \frac{\mathbf{p}_i(n)}{m} \quad [56]$$

Estas estimaciones $\mathbf{q}_i^*(n+1)$ se sustituyen en [51] calculándose las aceleraciones $\mathbf{a}_i^*(n+1)$. A partir de ellas se realiza una nueva estimación de las posiciones e impulsos (corrección):

$$\mathbf{q}_i(n+1) = \mathbf{q}_i(n) + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{m} (\mathbf{p}_i(n+1) + \mathbf{p}_i(n)) \quad [57]$$

$$\frac{\mathbf{p}_i(n+1)}{m} = \frac{\mathbf{p}_i(n)}{m} + \frac{1}{2} \Delta t (\mathbf{a}_i^*(n+1) + \mathbf{a}_i^*(n)) \quad [58]$$

Después se recalcularían las posiciones \mathbf{q}_i con los resultados [58] y vuelta a empezar en [51]. El procedimiento se repite hasta que la diferencia entre dos valores consecutivos $\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i/m, \mathbf{a}_i$, sea menor que una cota dada. Logrado esto se continúa con el instante t_{n+2} . La elección de algoritmo hecha no es la única posible y en el ejercicio 9 puede encontrarse otra posibilidad para realizar este tipo de cálculos.

Toda la información correspondiente a las moléculas del líquido, posiciones, velocidades y aceleraciones, en todos los instantes, quedan grabadas en cinta magnética o en disco. Toda esta gigantesca cantidad de datos es procesada posteriormente para obtener (Wood, 1975):

- i) El modo en el que el sistema se aproxima al equilibrio.
- ii) Propiedades de equilibrio del sistema (ecuación de estado, estructura estática, etc.).
- iii) Propiedades de no equilibrio (funciones de correlación temporal, propiedades de transporte, etc.).

No obstante las aproximaciones y problemas apuntados inherentes a esta técnica, la comparación con los experimentos suele ser bastante aceptable.

Bibliografía

1. BALESCU, R., *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Wiley, Nueva York, 1975, capítulo 8.
2. DEMIDOWITSCH, B. P.; MARON, I. A., y SCHUWALOWA, E. S., *Métodos Numéricos del Análisis*, Paraninfo, Madrid, 1980, capítulos 3 y 4.
3. ELSGOLTZ, L., *Ecuaciones Diferenciales y Cálculo Variacional*, Mir, Moscú, 1977, capítulos 1-3.
4. HEADING, J., *Ecuaciones Diferenciales Ordinarias*, Limusa, México, 1974, capítulo 2.
5. KNOPP, K., *Infinite Sequences and Series*, Dover, Nueva York, 1956, capítulo 4.
6. O'BRIEN, E. F., *Molec. Phys.*, 26, 453 (1973).
7. PLATT, O., *Ecuaciones Diferenciales Ordinarias*, Reverté, Barcelona, 1974, capítulos 3 y 5.
8. PUIG, P., *Ecuaciones Diferenciales*, Biblioteca Matemática, Madrid, 1974, capítulos 19 y 20.
9. RICE, J. R., *Numerical Methods, Software and Analysis*, McGraw-Hill, Nueva York, 1983, capítulo 9.
10. SCHEID, F., *Análisis Numérico*, McGraw-Hill, México, 1972, capítulos 19 y 29.
11. SESÉ, L. M., y CRIADO M., *Termodinámica Química Molecular*, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Madrid, 1990, temas 4, 9 y 10.
12. SPIEGEL, M. R., *Variable Compleja*, McGraw-Hill, México, 1971, capítulo 6.
13. WOOD, W. W., en *Fundamental Problems in Statistical Mechanics*, Vol. 3, «Computer studies on fluid systems of hard-core particles», Editor E.D.G. Cohen, North-Holland, Amsterdam, 1975.

EJERCICIOS DE AUTOCOMPROBACION

1. Aplicar el método de Euler a la ecuación diferencial $y' = -xy^2$, con la condición inicial $y(0) = 2$, en el intervalo $1 \leq x \leq 2$, usando un paso $h = 0,2$.
2. a) Dar una imagen gráfica del porqué es mejor cambiar el centro del desarrollo de Taylor a medida que progresa el cálculo numérico de la solución al problema de valores iniciales.
b) Obtener el término de tercer orden para la ecuación [5].
3. a) Resolver por el método de la serie de Taylor la ecuación diferencial $(1 - x)y' = x^2 - y$, con la condición inicial $y_0(x = 0) = a_0$.
b) Determinar el intervalo de convergencia.
4. Demostrar que la primera fórmula de Runge da un error de tercer orden $O(h^3)$. Obtener este resultado utilizando los desarrollos de Taylor de Δy y de $\Delta y^{(1)}$ con respecto al punto origen (x_k, y_k) de un paso determinado.
5. Calcular por el método de Runge-Kutta con $h = 0,2$ la solución de $y' = y/x - y^2$, siendo la condición inicial $y(1) = 1$ en el intervalo $1 \leq x \leq 2$.

6. Moléculas como el CS_2 , CO_2 , etc., poseen cuadrupolo eléctrico lineal. Este es un sistema de tres cargas puntuales q , $-2q$, q , separadas consecutivamente una distancia s (Fig. 5). A distancias r grandes del cuadrupolo ($r \gg s$), la ecuación diferencial de las líneas de fuerza del campo que se crea en un plano es (Heading, 1974):

$$\frac{dr}{d\theta} = r(3 \cos^2 \theta - 1)/\sin 2\theta \quad ; \quad 0 < r < +\infty \quad ; \quad 0 \leq \theta < 2\pi$$

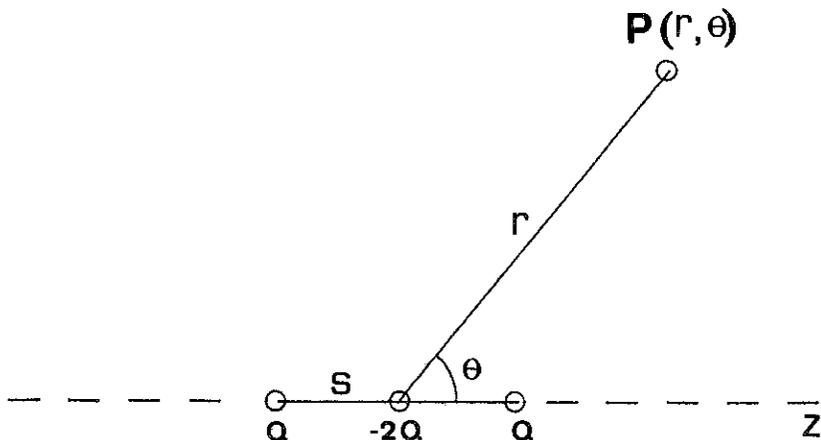


Figura 5.—Cuadrupolo eléctrico lineal.

Integrar la ecuación anterior por los métodos de Euler normal y predictor-corrector de Euler (elijase la precisión), con la condición inicial $\theta_0 = \pi/36$, $r_0 = 8$ A, dentro del rango $\pi/36 \leq \theta \leq \pi/4$ tomando un paso de integración $h_\theta = \pi/36$. Comparar con la solución exacta que se obtiene por integración directa:

$$r = \begin{cases} A \sin \theta (|\cos \theta|)^{1/2} & 0 \leq \theta < \pi \\ -A \sin \theta (|\cos \theta|)^{1/2} & \pi \leq \theta < 2\pi \end{cases}$$

7. Dos células de volúmenes $V_1 = 50$ cc. y $V_2 = 250$ cc. se llenan con disoluciones salinas. Ambas están conectadas mediante dos tubos, de longitud y volumen despreciables, a través de los cuales las disoluciones fluyen de un recipiente a otro con velocidad $r = 10$ cc/s (Fig. 6). La primera célula recibe un caudal de agua de $R = 5$ cc/s, manteniéndose constante el volumen V_1 mediante una válvula de salida que

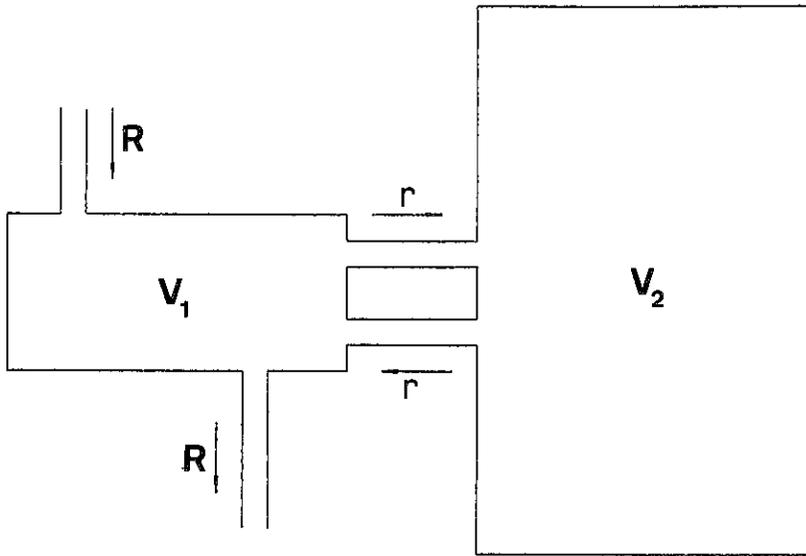


Figura 6.—Células del ejercicio 7.

elimina $R = 5 \text{ cc/s}$. Si se considera que la concentración c_i en cada célula es uniforme, la evolución temporal de ambas concentraciones viene dada por el sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\frac{dc_1}{dt} = -\frac{R+r}{V_1}c_1 + \frac{r}{V_1}c_2$$

$$\frac{dc_2}{dt} = \frac{r}{V_2}c_1 - \frac{r}{V_2}c_2$$

Utilizando el método de Runge-Kutta determinar la concentración en cada célula en el intervalo $1 \leq t \leq 10 \text{ s}$, con la condición inicial $(t_0, c_1(0), c_2(0)) = (0, 3 \times 10^{-4} \text{ mmol/cc}, 6 \times 10^{-2} \text{ mmol/cc})$ y con un paso $h_t = 1 \text{ s}$.

8. Comprobar vía desarrollo en serie de Taylor que las fórmulas [31] dan errores de quinto orden $O(h^5)$, y que la corrección es más exacta que la predicción.
9. Proponer un algoritmo de cálculo para una Dinámica Molecular que utilice estimaciones iniciales de la velocidad $\mathbf{v}_i = \mathbf{p}_i/m$, a diferencia del esquema basado en [56]-[58] del texto que lo hacía con las posiciones \mathbf{q}_i (O'Brien, 1973).

SOLUCIONES A LOS EJERCICIOS DE AUTOCOMPROBACION

1. La aplicación directa del algoritmo a $y' = -xy^2$ conduce a:

$$y_0 = y(0) = 2$$

$$y_1 = y(0,2) = y_0 + hf(x_0, y_0) = 2 + 0,2(-0 \cdot 2^2) = 2$$

$$y_2 = y(0,4) = y_1 + hf(x_1, y_1) = 2 + 0,2(-0,2 \cdot 2^2) = 1,840$$

$$y_3 = y(0,6) = y_2 + hf(x_2, y_2) = 1,840 + 0,2(-0,4 \cdot 1,840^2) = 1,569$$

$$y_4 = y(0,8) = y_3 + hf(x_3, y_3) = 1,569 + 0,2(-0,6 \cdot 1,569^2) = 1,274$$

$$y_5 = y(1,0) = y_4 + hf(x_4, y_4) = 1,274 + 0,2(-0,8 \cdot 1,274^2) = 1,014$$

2. a) La convergencia se ve mejorada como se aprecia en la figura 7.

b) Aplicando la regla de la cadena, podemos escribir esquemáticamente:

$$\text{tercer orden} = \frac{h^3}{6} [f_{x^2} + 2f_{xy} \cdot f + f_{y^2} \cdot f^2 + f_y \cdot (f_x + f_y \cdot f)]$$

cuyo valor numérico, cuando sea necesario, se calculará particularizando en cada (x_k, y_k) .

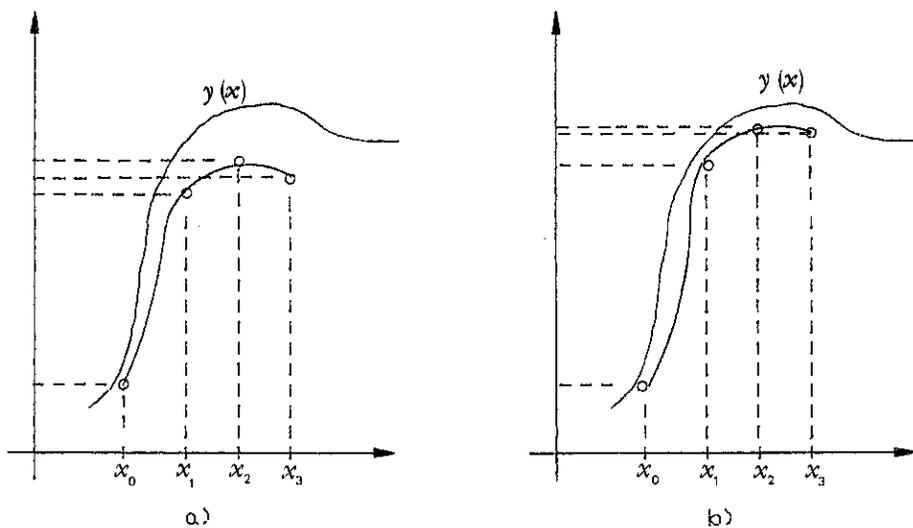


Figura 7.—Convergencia del método de Taylor a la solución exacta $y(x)$ cuando: a) se mantiene como centro de desarrollo (x_0, y_0) en todos los pasos; b) se cambia el centro de desarrollo al último punto calculado.

3. Procedamos como se indicaba en el texto haciendo:

$$y = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i \quad ; \quad y' = \sum_{i=0}^{\infty} i a_i x^{i-1}$$

y sustituyendo en la ecuación $(1 - x)y' = x^2 - y$:

$$\begin{aligned} (1 - x)[a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + 4a_4x^3 + \dots] &= \\ = x^2 - [a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + \dots] \end{aligned}$$

que operando nos lleva a:

$$a_1 + (2a_2 - a_1)x + (3a_3 - 2a_2)x^2 + \dots = -a_0 - a_1x - (a_2 - 1)x^2 - \dots$$

Identificando término a término:

$$\begin{aligned}a_1 &= -a_0 \\2a_2 - a_1 &= -a_1 \\3a_3 - 2a_2 &= -(a_2 - 1)\end{aligned}$$

y en general a partir de aquí se tiene la recurrencia:

$$a_{n+1} = \frac{n-1}{n+1} a_n \quad ; \quad n \geq 3$$

Aplicando la condición inicial encontramos:

$$\begin{aligned}a_1 &= -a_0 & a_5 &= 1/10 \\a_2 &= 0 & a_6 &= 1/15 \\a_3 &= 1/3 & a_7 &= 1/21 \\a_4 &= 1/6 & & \dots\dots\end{aligned}$$

resultando la solución:

$$y = a_0(1-x) + x^3 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{(n+2)(n+3)} x^n$$

b) Para determinar el intervalo de convergencia calcularemos el siguiente límite:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{n+1} x^{n+1}}{a_n x^n} \right| = \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{n+1}}{a_n} \right| \cdot |x| = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n+2}{n+4} \cdot |x| = |x|$$

Como se trata del criterio del cociente, habrá convergencia en tanto el límite anterior sea estrictamente menor que la unidad, lo que implica convergencia al menos en el intervalo de radio $R = 1$:

$$|x| < 1 \equiv -1 < x < +1$$

Notemos que la operación realizada es equivalente a lo indicado en las ecuaciones [10]-[11].

Veamos ahora si en los bordes del intervalo existe también convergencia. En valor absoluto, el término general ($n \rightarrow \infty$) de la serie, particularizado en $|x| = 1$, resulta:

$$|z_n|_{|x|=1} = \left| \frac{2x^{n+3}}{(n+2)(n+3)} \right|_{|x|=1} = \frac{2}{(n+2)(n+3)}$$

Claramente, hay una serie numérica convergente absolutamente y mayorante de la anterior (véase el Ejercicio 9c-d del Tema 4):

$$|z_n| = \frac{2}{(n+2)(n+3)} \leq \frac{2}{n^2} ; 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \rightarrow \text{converge absolutamente}$$

por lo que la serie solución encontrada en a) converge absolutamente en $|x| = 1$. En consecuencia el intervalo de convergencia queda finalmente como:

$$-1 \leq x \leq +1$$

4. Siguiendo las indicaciones dadas en el enunciado desarrollaremos $\Delta y^{(1)}$ en serie de Taylor en torno al origen del intervalo (se suprime la particularización y se desarrolla $f(x, y)$ como función de dos variables):

$$\Delta^{(1)}y = y - y_0 = hf + \frac{h^2}{2}(f_x + f \cdot f_y) + \frac{h^3}{8}(f_{x^2} + 2f_{xy} \cdot f + f_{y^2} \cdot f^2) + \dots$$

Análogamente para y se tiene:

$$y = y_0 + hf + \frac{h^2}{2}(f_x + f \cdot f_y) + \frac{h^3}{6}(f_{x^2} + 2f_{xy} \cdot f + f_{y^2} \cdot f^2 + f_y(f_x + f_y \cdot f)) + \dots$$

que coincide con el desarrollo previo hasta segundo orden inclusive.

5. Efectuaremos explícitamente el cálculo para el primer punto $x_1 = 1, 2$:

$$R = hf(x_0, y_0) = 0,2[y_0/x_0 - y_0^2] = 0$$

$$R_1 = hf(x_0 + h/2, y_0 + R/2) = 0,2 \left[\frac{y_0 + R/2}{x_0 + h/2} - (y_0 + R/2)^2 \right] = -0,01818$$

$$R_2 = hf(x_0 + h/2, y_0 + R_1/2) = 0,2 \left[\frac{y_0 + R_1/2}{x_0 + h/2} - (y_0 + R_1/2)^2 \right] = -0,01621$$

$$R_3 = hf(x_0 + h, y_0 + R_2) = 0,2 \left[\frac{y_0 + R_2}{x_0 + h} - (y_0 + R_2)^2 \right] = -0,02960$$

resultando a cuatro cifras decimales:

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6} [R + 2R_1 + 2R_2 + R_3] = 0,9836$$

Repetiendo este esquema obtenemos:

x	1,2	1,4	1,6	1,8	2,0
y	0,9836	0,9459	0,8989	0,8490	0,8000

6. La ecuación diferencial a resolver nos dará numéricamente la ecuación de la línea de fuerza en el plano que pasa por $r_0 = 8$ A y $\theta_0 = \pi/36$. Por inspección de la expresión exacta, que puede integrarse sin dificultad, vamos a obtener la mitad de la línea de fuerza (un octante que se repite cuatro veces en el plano: $(0, \pi/4)$, $(-\pi/4, 0)$, $(3\pi/4, \pi)$ y $(-3\pi/4, \pi)$). Los resultados se resumen en la tabla adjunta calculándose $A = 91,96485$ con la condición inicial. La precisión exigida al cálculo predictor corrector ha sido de 10^{-6} .

θ	EULER	PC-EULER	EXACTA
10°	15,949143	15,859934	15,847764
15°	23,719868	23,426652	23,393186
20°	31,167702	30,550342	30,490646
25°	38,145572	37,088439	37,000511
30°	44,508139	42,906962	42,791482
35°	50,114308	47,881706	47,741418
40°	54,828918	51,899083	51,738811
45°	58,523701	54,856320	54,682622

De los resultados vemos cómo se separa el método de Euler normal de la solución exacta a medida que progresa el cálculo y cómo el predictor-corrector corrige este comportamiento.

7. Aplicando las ecuaciones [17]-[18] del método de Runge-Kutta, obtenemos los siguientes resultados para $1 \leq t \leq 10$:

t (seg)	c_1 (mmol/cc)	c_2 (mmol/cc)
1	0,010388	0,057870
2	0,017534	0,056157
3	0,022560	0,054748
4	0,026062	0,053559
5	0,028466	0,052531
6	0,030081	0,051622
7	0,031128	0,050800
8	0,031768	0,050042
9	0,032116	0,049333
10	0,032255	0,048661

Cabe preguntarse cuándo el arrastre en V_1 eliminará, hasta una cantidad despreciable, la sal en el sistema. Ampliando el intervalo temporal y manteniendo $h = 1$ s obtenemos:

t (sg)	c_1 (mmol/cc)	c_2 (mmol/cc)
200	0,003315	0,004770
400	0,000289	0,000416
600	0,000025	0,000036
800	0,000002	0,000003
922	0,000000	0,000001
951	0,000000	0,000000

Para $T = 951$ s se verifica la eliminación hasta 10^{-6} mmol/cc en ambas células. Como cabría esperar, la pérdida en V_2 es más lenta que en V_1 .

8. Procediendo como en los ejercicios 2 y 4, es fácil encontrar:

$$E(31) \sim \frac{14}{45} h^5 y^{(5)}(\xi)$$

y por aplicación de la truncación de Simpson a y' :

$$E(31') \sim -\frac{1}{90} h^5 y^{(5)}(\xi)$$

9. Supongamos conocidos $\mathbf{q}_i(n)$, $\mathbf{v}_i(n)$, $\mathbf{a}_i(n)$ y $\mathbf{v}_i(n-1)$, para todas las partículas i . Análogamente a lo mostrado por [56]-[58] escribiremos como predicción inicial:

$$i) \quad \mathbf{v}_i(n+1) = \mathbf{v}_i(n-1) + 2\Delta t \cdot \mathbf{a}_i(n)$$

evaluándose con ella posiciones y aceleraciones:

$$ii) \quad \mathbf{q}_i(n+1) = \mathbf{q}_i(n) + \frac{1}{2} \Delta t [\mathbf{v}_i(n) + \mathbf{v}_i(n+1)]$$

$$iii) \quad \mathbf{a}_i(n+1) = m^{-1} \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij}(\mathbf{q}_i(n), \mathbf{q}_j(n))$$

A partir de estos nuevos resultados se calculan las velocidades corregidas:

$$\text{iv) } v_i(n + 1) = v_i(n) + \frac{1}{2} \Delta t [a_i(n) + a_i(n + 1)]$$

El ciclo comienza de nuevo al introducir los valores iv) en ii), y así sucesivamente hasta alcanzar la convergencia deseada. Dado que a_i no depende del tiempo, este algoritmo debe ser razonablemente más rápido, en cada instante, que el dado por [56]-[58]. La razón es clara comparando formalmente i) con [56]. La predicción inicial i) para las velocidades es mejor que la [56] para las posiciones, como se comprueba con facilidad por integración directa.

Tema 4

APROXIMACION POR MINIMOS CUADRADOS Y DESARROLLOS EN SERIE DE FUNCIONES ORTOGONALES



En este tema estudiaremos el problema de la aproximación funcional desde el punto de vista de los *mínimos cuadrados* en un sentido amplio, tanto con polinomios (*polinomios ortogonales*) como con funciones trigonométricas (*análisis de Fourier*).

Nos son ya conocidos los problemas asociados a la aproximación polinómica convencional. Una manera de obviarlos consiste en recurrir a la técnica de mínimos cuadrados, con la que se generan aproximaciones suaves a una función, utilizando valores puntuales afectados de error. Se espera de esta manera aumentar la exactitud en el cálculo de derivadas, y demás. Para fijar ideas examinemos la situación en el caso discreto.

La idea directriz de esta técnica consiste en elegir una aproximación funcional polinómica en la base $\{x^n\}$ para la función empírica $y(x)$, dada por una tabla de $N + 1$ datos discretos, tal que la suma de los cuadrados de las desviaciones sea mínima:

$$y(x) \simeq \sum_{m=0}^n a_m x^m \quad [1]$$

$$S = \sum_{k=0}^N \left[y(x_k) - \sum_{m=0}^n a_m x_k^m \right]^2 = \text{mínimo} \quad [2]$$

De las condiciones de punto estacionario respecto de los parámetros a_m se obtiene el llamado *sistema normal*, que es un sistema de ecuaciones lineal en los coeficientes del polinomio aproximador. Normalmente, este polinomio no coloca los puntos tabulares debido a que el grado elegido suele ser menor que el número de puntos. Parece entonces que obtenidas

las soluciones (únicas) del sistema normal el problema queda resuelto. No obstante, salvo para polinomios de grado bajo, el sistema normal resulta ser anómalo (*inestable*), por lo que las evaluaciones numéricas son altamente dudosas.

Todavía existe otro problema asociado a la base polinómica convencional $\{x^n\}$, tal cual es la *selección a priori del grado* del polinomio de ajuste a utilizar. Esto fuerza a buscar el grado óptimo del polinomio a través de un tedioso y antieconómico cálculo con varios sistemas de ecuaciones.

Los dos argumentos expuestos sobre la inestabilidad y la elección de grado, son decisivos en contra de la utilización de la base $\{x^n\}$. Desde el punto de vista del cálculo resulta más eficiente disponer de una base $\{P_n(x)\}$ que haga trivial la resolución del sistema normal. Esto puede conseguirse con los llamados *polinomios ortogonales de Gram-Tchebycheff*, los cuales automáticamente eliminan el problema del grado, ya que cada coeficiente asociado a un elemento de la base ortogonal es independiente de todos los demás.

Todo lo dicho para el caso discreto puede generalizarse sin dificultad al caso *continuo*. Así una función $y(x)$ conocida (o desconocida) se puede aproximar mediante una combinación lineal de polinomios ortogonales. En realidad veremos que se puede ir mucho más lejos, ya que en las condiciones apropiadas $y(x)$ admite una representación en forma de serie funcional de estos polinomios especiales. La aproximación de mínimos cuadrados aparece con naturalidad al truncar dicha serie en algún orden. De entre las muchas familias de polinomios existentes nos detendremos con cierto detalle en los de *Legendre*, *Laguerre* y *Hermite*, en razón de su papel en la teoría cuántica de átomos y moléculas.

Continuando con el tema de los desarrollos en serie de funciones ortogonales pasaremos al *análisis de Fourier*, herramienta matemática que ocupa un lugar destacado en un buen número de aplicaciones en Química Física. Como antes, esta nueva posibilidad de desarrollo resulta ser compatible con el punto de vista de los mínimos cuadrados. Las funciones que se emplean aquí son trigonométricas (seno, coseno) y poseen características deseables análogas a las de los polinomios. Primeramente estudiaremos las *series de Fourier* para representar funciones periódicas en el caso continuo, para ir seguidamente a la *transformación de Fourier*. Con esta última operación se representa una función mediante una integral utilizando un espacio *complementario*, no siendo necesario exigir periodicidad en la función con lo que se gana generalidad. Para concluir se revisan someramente las técnicas de aproximación *discreta* (*sumas trigonométricas*) a funciones periódicas dadas en forma de tabla.

Parece pues, a primera vista, que el problema de calcular el polinomio $p_n(x)$ se reduce a la tarea de resolver el sistema lineal [6], que podemos expresar en forma matricial:

$$\mathcal{S}A = B \quad [8]$$

o más explícitamente:

$$\begin{pmatrix} s_0 & s_1 & s_2 & \cdots & s_n \\ s_1 & s_2 & s_3 & \cdots & s_{n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ s_n & s_{n+1} & s_{n+2} & \cdots & s_{n+n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad [9]$$

La resolución podría hacerse empleando programas de cálculo de uso harto difundido y basados en métodos que veremos en el Tema 5.

Sin embargo, los resultados obtenidos a través de este procedimiento para polinomios de grado n elevado ($n \geq 7$) serían tanto más erróneos cuanto mayor fuese n , ya que el sistema [6] es *inestable o anómalo*. Esto significa que pequeñas variaciones en los coeficientes s_i (derivadas, por ejemplo, de redondeos, etc.) se traducen en tremendas variaciones sobre los resultados a_m . Dicho en otras palabras, si bien los a_m están unívocamente definidos por [6], en la práctica, resulta imposible despejarlos con fiabilidad (Ralston, 1970).

Este curioso comportamiento se debe a la particular forma de la matriz \mathcal{S} que resulta ser proporcional a una matriz de Hilbert. Para orden $n + 1$ esta matriz toma la forma:

$$H^{(n+1)} = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/(n+1) \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & \cdots & 1/(n+2) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1/(n+1) & 1/(n+2) & 1/(n+3) & \cdots & 1/(2n+1) \end{pmatrix} \quad [10]$$

El argumento clásico que se da para explicar esta relación se funda en evaluar s_i para un número de puntos equiespaciados x_k muy grande dentro de (0,1). Es inmediato ver que:

$$s_i = \sum_{k=0}^N x_k^i \simeq N \int_0^1 x^i dx = \frac{N}{i+1} \quad ; \quad i = 0, 1, \dots, 2n \quad [11]$$

de donde:

$$\mathcal{S} \simeq NH^{(n+1)} \quad [12]$$

Dado que la matriz de Hilbert de orden $n + 1$ es una matriz «mal condicionada» (máximo elemento = 1; elementos de la inversa muy grandes) los errores de cálculo se ven exageradamente amplificadas. Por ejemplo, para $n = 9$ la inversa H^{-1} tiene elementos de orden de 10^{12} , lo que obligaría a trabajar con muchas posiciones decimales, pudiéndose desbordar la capacidad de la máquina de cálculo para poder obtener resultados fiables.

El argumento previo asesta un duro golpe al modo de proceder contenido en [6], pero como se ha dicho sólo es importante para n elevados. Vamos a ver cómo, incluso para grados n bajos, tampoco el citado procedimiento es el más eficaz. El meollo de la cuestión estriba en la elección del grado n del polinomio que ha de representar a la tabla numérica. La pregunta es, dados $N + 1$ puntos ¿cómo elegir el grado n óptimo? Razonamientos estadísticos (Ralston, 1970) indican que deben resolverse las ecuaciones normales [6] para $n = 1, 2, 3, \dots$, estimándose cada vez el error cometido y tras un *análisis de varianza* establecer el n óptimo. Desde el punto de vista del cálculo, esto significa que deben evaluarse los $a_m^{(n)}$ para cada n probado, sin poderse aprovechar los resultados previos $a_m^{(n')}$ de grados $n' < n$. Todo ello redundaría en una multiplicación inútil del esfuerzo de cálculo.

La solución óptima del sistema [6], que elimina los dos problemas discutidos, inestabilidad y elección de grado, la suministran los *polinomios ortogonales*. Estos convierten la resolución de [6] en algo trivial. Pero antes de ver cómo generalizaremos el criterio de mínimos cuadrados.

En el caso *discreto* si se tiene una función de peso $\omega(x)$ asociada al problema, la función S a minimizar es:

$$S = \sum_{k=0}^N \omega(x_k) \left[y_k - \sum_{m=0}^n a_m^{(n)} \phi_m(x_k) \right]^2 \quad [13]$$

en donde $\omega(x_k) \geq 0$ ($k = 0, 1, 2, \dots, N$) y $\phi_m(x)$ son funciones, por ejemplo, polinomios de grado m (Ejercicio 1). En el caso *continuo* el problema consiste en buscar la representación de una función $y(x)$, definida en $a \leq x \leq b$, a través de una combinación lineal de funciones $\phi_m(x)$:

$$y(x) \simeq \sum_{m=0}^n a_m^{(n)} \phi_m(x) \quad ; \quad a \leq x \leq b \quad [14]$$

de acuerdo con el criterio de que sea *mínima* la integral definida:

$$I = \int_a^b \omega(x) \left[y(x) - \sum_{m=0}^n a_m^{(n)} \phi_m(x) \right]^2 dx \quad [15]$$

siendo $\omega(x) \geq 0$ la función de peso. A la representación [14]-[15] se la suele denominar *aproximación en media* de $y(x)$ cuando $n \rightarrow \infty$ (Apostol, 1972).

2. POLINOMIOS ORTOGONALES EN CASO DISCRETO (GRAM-TSCHEBYCHEFF)

Ante la problemática discutida anteriormente vamos a abordar la representación de una tabla numérica $\{(x_k, y_k)\}_{k=0, N}$ a través de una función $y_n(x)$ que sea combinación lineal de unos polinomios especiales $\phi_m(x)$:

$$y_n(x) = \sum_{m=0}^n a_m^{(n)} \phi_m(x) \quad [16]$$

siendo n el grado de la aproximación global $y_n(x)$ y m el de ϕ_m .

Por minimización de la expresión [13] con respecto a los coeficientes se llega a un sistema normal que puede escribirse:

$$\left. \begin{aligned} \sum_{m=0}^n \left[\sum_{k=0}^N \omega(x_k) \phi_m(x_k) \phi_j(x_k) \right] a_m^{(n)} &= \sum_{k=0}^N \omega(x_k) y_k \phi_j(x_k) \\ j &= 0, 1, 2, \dots, n \end{aligned} \right\} \quad [17]$$

o más compactamente:

$$\sum_{m=0}^n d_{mj} a_m^{(n)} = w_j \quad ; \quad j = 0, 1, 2, \dots, n \quad [18]$$

identificándose inmediatamente d_{mj} y w_j .

Obviamente, si la base polinómica $\phi_m(x)$ es arbitraria, caeremos en dificultades similares a las ya conocidas. Ahora bien, si tal base hace que la matriz (d_{mj}) sea *diagonal* (sólo los términos de la diagonal principal sean no nulos):

$$d_{mj} = d_{jj} \cdot \delta_{mj} \quad ; \quad m, j = 0, 1, \dots, n \quad [19]$$

la resolución de [18] se hace trivial:

$$a_j^{(n)} = \frac{w_j}{d_{jj}} \quad ; \quad j = 0, 1, \dots, n \quad [20]$$

Esta base polinómica especial viene caracterizada por la relación:

$$\sum_{k=0}^N \omega(x_k) \phi_m(x_k) \phi_j(x_k) = 0 \quad ; \quad \text{si } j \neq m \quad [21]$$

que deberán cumplir todos sus polinomios dos a dos. A [21] se la denomina *relación de ortogonalidad respecto de $\omega(x)$* y a la base $\{\phi_m(x)\}$ *base ortogonal*.

Procediendo de esta manera no hay que resolver un sistema inestable y, además, se elimina la cuestión de la elección de grado. Esto último es así debido a que los coeficientes $a_j^{(n)}$ de [16] son independientes entre sí, puesto que para evaluarlos sólo interviene su polinomio asociado $\phi_j(x)$:

$$a_j^{(n+1)} = a_j^{(n)} \quad ; \quad j = 0, 1, \dots, n \quad [22]$$

De este modo el superíndice (n) puede ser eliminado. Si se desea mejorar la calidad del ajuste [16], deberemos añadir más términos al desarrollo:

$$y_{n+p}(x) = \sum_{m=0}^{n+p} a_m \phi_m(x) \quad [23]$$

y sólo tendremos que calcular los nuevos coeficientes $a_{n+1}, a_{n+2}, \dots, a_{n+p}$.

Nos resta ahora precisar cuál es la base ortogonal $\{\phi_m\}$ asociada a funciones tabulares y con la función de peso $\omega(x)$. Notemos que esta base dependerá del número de puntos ($N + 1$) de que se disponga. No entraremos en los detalles de su construcción, sino que simplemente daremos las relaciones de los polinomios de *Gram-Tchebycheff* ($\omega(x) = 1$) para el caso

de argumentos equiespaciados. Remitimos al lector interesado en más información a la magnífica obra de Ralston (Ralston, 1970).

La representación de Gram-Tchebycheff para la función discreta $\{(x_k, y_k)\}_{k=0, N}$ con espaciado h se escribe:

$$y_n(k) = \sum_{m=0}^n a_m \phi_m(k, N) = a_0 \phi_0(k, N) + a_1 \phi_1(k, N) + \dots + a_n \phi_n(k, N) \quad [24]$$

en donde como de costumbre:

$$k = (x - x_0)/h$$

siendo los polinomios $\phi_m(k, N)$ (Ejercicio 2):

$$\phi_m(k, N) = \sum_{i=0}^m (-1)^i \binom{m}{i} \binom{m+i}{i} \frac{k^{(i)}}{N^{(i)}} \quad [25]$$

En [25] $k^{(i)}$ y $N^{(i)}$ son polinomios factoriales. El cálculo de los a_m de [24] se ejecuta con la relación [20] que desarrollada es:

$$a_m = \frac{\sum_{k=0}^N y_k \phi_m(k, N)}{\sum_{k=0}^N |\phi_m(k, N)|^2} \quad ; \quad m = 0, 1, \dots, n \quad [26]$$

De [25] pueden obtenerse las expresiones explícitas de estos polinomios:

$$\phi_0(k, N) = 1$$

$$\phi_1(k, N) = 1 - \frac{2k}{N} \quad ; \quad N \geq 1$$

$$\phi_2(k, N) = 1 - \frac{6k}{N} + \frac{6k(k-1)}{N(N-1)} \quad ; \quad N \geq 2$$

$$\phi_3(k, N) = 1 - \frac{12k}{N} + \frac{30 \cdot k(k-1)}{N(N-1)} - \frac{20 \cdot k(k-1)(k-2)}{N(N-1)(N-2)} \quad ; \quad N \geq 3 \quad [27]$$

y así sucesivamente. El error mínimo que suministran, es decir el valor de la función S dada por [13] es:

$$S(\text{mínimo}) = \sum_{k=0}^N y_k^2 - \sum_{m=0}^n a_m^2 \left[\sum_{k=0}^N |\phi_m(k, N)|^2 \right] \quad [28]$$

cuya comprobación es simple y se deja como ejercicio para el lector.

Una medida útil del error cometido mediante las aproximaciones de mínimos cuadrados es el error RMS (*Root-Mean Square*). En este caso, conocidos los valores exactos y_k y los valores funcionales aproximados $y_n(k)$ por medio de [24] ($k = 0, 1, 2, \dots, N$), se define este error como:

$$\text{RMS} = \left[\frac{\sum_{k=0}^N (y_k - y_n(k))^2}{N + 1} \right]^{1/2} \quad [29]$$

Las aplicaciones fundamentales de estos polinomios son la *suavización de datos* y la *diferenciación* aproximada. Como el polinomio de mínimos cuadrados, en general, no se coloca con la tabla, las irregularidades de sus datos debidas a errores de entrada, etc., se ven suavizadas. Esta operación facilita la obtención de buenas estimaciones en derivación numérica, si bien al avanzar el orden de los cálculos se hacen más y más dudosas.

3. POLINOMIOS ORTOGONALES EN CASO CONTINUO

3.1. Generalidades

Extendiendo los resultados del caso discreto al continuo diremos que los polinomios ortogonales son combinaciones lineales de los elementos de la base polinómica original $\{x^n\}_{n=0,1,2,\dots}$, dependiendo los coeficientes de la combinación de la función de peso $\omega(x)$, definida en $a \leq x \leq b$, asociada al problema que se trate. Según sea $\omega(x)$ tendremos una u otra familia de polinomios. Por otra parte, y aquí reside su interés en Física Matemática, las familias de polinomios ortogonales son *soluciones* de

diferentes tipos característicos de ecuaciones diferenciales. Cada familia posee además unas *relaciones de recurrencia* que permiten calcular uno de sus polinomios a partir de sus compañeros de grado inferior.

Es fundamental insistir en que cada familia está definida en un dominio, $a \leq x \leq b$, particular del eje real. Es con respecto a ese dominio como se formula la relación de ortogonalidad entre los polinomios de una familia dada $\{\bar{Q}_n(x)\}_{n=0,1,\dots,\infty}$:

$$\int_a^b \bar{Q}_n(x) \cdot \bar{Q}_m(x) \omega(x) dx = N_n^2 \delta_{nm} = \begin{cases} N_n^2 & \text{si } m = n \\ 0 & \text{si } m \neq n \end{cases} \quad [30]$$

La integral anterior es, justamente, la expresión del *producto escalar* de las funciones \bar{Q}_n y \bar{Q}_m con respecto a $\omega(x)$. Los nombres de producto escalar y ortogonalidad no son mera coincidencia ya que, formalmente, retienen su conocido significado en Algebra Vectorial. Esto se debe a que el espacio de los polinomios Π es un espacio vectorial (sobre \mathbb{R} , etc.). Al elegir una familia ortogonal hemos simplemente cambiado la base del espacio vectorial, que en este caso no está finitamente generado.

La existencia de producto escalar permite dotar al espacio Π de una estructura de *espacio normado*. La longitud o *norma* de un «vector» $\bar{Q}_n(x)$ viene dada por:

$$N_n = \left[\int_a^b \bar{Q}_n(x) \cdot \bar{Q}_n(x) \cdot \omega(x) dx \right]^{1/2} < +\infty \quad [31]$$

lo que nos indica que estas funciones son de *cuadrado integrable* en su dominio. Con la relación [31] podemos normalizar los «vectores» de modo que tengan longitud unidad:

$$Q_n(x) = \frac{1}{N_n} \bar{Q}_n(x) \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [32]$$

lo que equivale a determinar los vectores *unitarios* de una base de un espacio vectorial abstracto. Por razones de comodidad será casi siempre más eficaz trabajar con la base polinómica ortonormalizada $\{Q_n(x)\}$ en vez de con la original. Los casos que consideraremos después son todos familias de polinomios ortogonales que, con respecto a la función $\omega(x)$,

forman una *base completa* para los *espacios de Hilbert* $L^2_\omega(a \leq x \leq b)$ de las funciones de cuadrado integrable en el intervalo especificado:

$$\int_a^b |y(x)|^2 \omega(x) dx < +\infty \Rightarrow y(x) \sim \sum_{m=0}^{\infty} a_m Q_m(x)$$

La ortogonalidad de estas familias garantiza ya la *independencia lineal* de sus miembros (Berberian, 1977). Sin embargo, el recíproco no es cierto. A pesar de ello, dada una base de funciones linealmente independientes siempre es posible, y conveniente, ortonormalizarla (método de Gram-Schmidt, etc.) (Ejercicio 3).

Mencionaremos, sin demostrar, una propiedad de las raíces de los polinomios ortogonales. Por el teorema fundamental del Algebra un polinomio de grado n tiene n raíces (reales o complejas). Si el polinomio anterior pertenece a una familia de polinomios ortogonales, las n raíces son todas reales, simples (multiplicidad = 1) y se encuentran contenidas dentro del intervalo de definición $a \leq x \leq b$ (Stroud, 1974).

El planteamiento del problema de mínimos cuadrados es, en el caso continuo, el de hallar una representación aproximada para una función conocida $y(x)$ en términos de una base ortonormal de polinomios $\{Q_n(x)\}$:

$$y(x) \simeq \sum_{m=0}^n a_m Q_m(x) \quad ; \quad a \leq x \leq b \quad [33]$$

de modo que la distancia (estamos en un *espacio métrico* inducido por la norma [31]) entre $y(x)$ y la combinación lineal de los $n + 1$ polinomios sea mínima. Esto equivale a minimizar la integral I de [15], estableciéndose el sistema de ecuaciones normales:

$$\sum_{m=0}^n a_m \int_a^b \omega(x) Q_j(x) Q_m(x) dx = \int_a^b \omega(x) y(x) Q_j(x) dx \quad ; \quad j = 0, 1, \dots, n \quad [34]$$

que en virtud de la ortonormalidad se reduce a:

$$a_j = \int_a^b \omega(x) y(x) Q_j(x) dx \quad ; \quad j = 0, 1, \dots, n \quad [35]$$

Como en el caso discreto, cada a_j únicamente depende de su función asociada Q_j , siendo así independiente del resto de los coeficientes y del orden al que se desee llegar en [33]. Si queremos mayor aproximación, bastará con añadir más términos al desarrollo, en forma análoga a lo que ya conocemos.

Para una $\omega(x)$ dada, la sucesión de polinomios ortogonales $\{Q_n(x)\}$ suministra la aproximación óptima a una $y(x)$ en $a \leq x \leq b$, entre todas aquellas aproximaciones polinómicas con mismo número de términos, y esto siempre con respecto al criterio de error cuadrático integral (medio) mínimo. Calculemos la magnitud de este error:

$$\begin{aligned} I(\text{mínimo}) &= \int_a^b \omega(x) \left[y(x) - \sum_{m=0}^n a_m Q_m(x) \right]^2 dx = \\ &= \int_a^b \omega(x) y^2(x) dx - \sum_{m=0}^n a_m^2 \end{aligned} \quad [36]$$

Dado que $I(\text{mínimo}) \geq 0$, se tiene la *desigualdad de Bessel*:

$$\sum_{m=0}^n a_m^2 \leq \int_a^b \omega(x) y^2(x) dx \quad [37]$$

Ahora bien, como el conjunto $\{Q_n(x)\}$ resulta ser una base completa para el espacio de Hilbert $L_\omega^2(a \leq x \leq b)$ de las funciones $y(x)$ de cuadrado integrable en este intervalo, se tiene la relación de *completitud* o de *Parseval*:

$$\sum_{m=0}^{\infty} a_m^2 = \int_a^b \omega(x) y^2(x) dx = N_{y(x)}^2 < +\infty \quad [38]$$

que nos expresa la *convergencia en media* de la serie polinómica a $y(x)$

$$\sum_{m=0}^{\infty} a_m Q_m(x) \xrightarrow{\text{c.m.}} y(x) \quad [39]$$

Si en [39] la serie converge uniformemente, entonces hay igualdad entre $y(x)$ y la serie (convergencia puntual). Siguiendo con la terminología

vectorial, los coeficientes a_m pueden interpretarse como las «coordenadas» del vector $y(x)$ con respecto a la base $\{Q_m(x)\}_{m=0,1,\dots,\infty}$. La identidad de Parseval es, en definitiva, la generalización del teorema de Pitágoras. Más concretamente, si $y(x)$ es continua a trozos, su representación en una base completa ortonormal es única, incluso aunque sólo haya convergencia en media. Esta última suele ser suficiente en muchas aplicaciones.

Es conveniente que el lector refresque sus ideas sobre los diferentes tipos de convergencia en series funcionales (Apostol, 1972). El siguiente esquema de implicaciones puede ser de ayuda:

$$\begin{array}{l} \text{Convergencia uniforme} \Rightarrow \text{Convergencia puntual} \\ \qquad \qquad \qquad \qquad \Rightarrow \text{Convergencia en media} \end{array}$$

Antes de estudiar ejemplos concretos de familias $\{Q_n(x)\}$ una última advertencia. Hemos señalado que era fundamental ceñirse al dominio de definición de los $Q_n(x)$ ortogonales a la hora de utilizarlos. Por lo tanto, cuando el dominio de la función $y(x)$ a desarrollar, $c \leq x \leq d$, no coincida con el $a \leq x \leq b$ que nos interese, convendrá realizar el pertinente cambio lineal de variable, $x = x(t)$, que efectúe la transformación $c \leq x \leq d \rightarrow a \leq t \leq b$. Se trabajará entonces con la nueva función $y(t) = y(x(t))$ y los polinomios $Q_n(t)$ definidos en $a \leq t \leq b$. Concluidos los cálculos se deshará, si es necesario, el cambio $t = x^{-1}(x)$. Podríamos haber procedido al revés, renormalizando (a, b) para ser (c, d) , pero esto obligaría a alterar las expresiones de los Q_n (Ejercicio 4).

3.2. Polinomios de Legendre

Ya hemos tomado contacto con estos polinomios al tratar de la integración gaussiana y en el ejercicio 3 de ese tema. Profundizaremos ahora un poco más en sus propiedades.

Los polinomios de Legendre surgieron del cálculo de la inversa de la distancia entre un punto interior A a una esfera unitaria y un punto B de la superficie (Fig. 1). Por esta razón se les suele conocer como funciones esféricas (Courant y Hilbert, 1963). Digamos de pasada que en la mecánica cuántica de átomos y moléculas el cálculo con inversos de distancias (contenidas en el Hamiltoniano) es obligado, lo que justifica la aparición de estas funciones en diversos contextos.

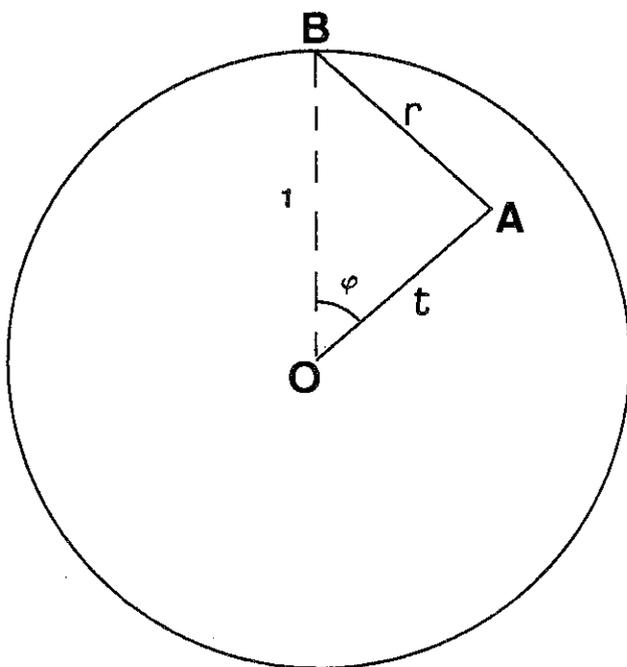


Figura 1.—Génesis de los polinomios de Legendre a partir del inverso de r_{AB} .

De la figura 1 es fácil ver que:

$$\frac{1}{r_{AB}} = \frac{1}{\sqrt{1 + t^2 - 2t \cos \varphi}} \quad ; \quad 0 \leq \varphi \leq \pi \quad [40]$$

denominándose a la expresión anterior *función generatriz* de los polinomios de Legendre. Haciendo $x = \cos \varphi$ ($-1 \leq x \leq 1$) y desarrollando [40] en serie de t en torno a $t = 0$:

$$\frac{1}{\sqrt{1 + t^2 - 2tx}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n \quad ; \quad -1 < x < 1 \quad ; \quad |t| < 1 \quad [41]$$

los coeficientes $P_n(x)$ son los citados polinomios, cuyo dominio de definición queda expresado arriba. Conservamos la letra P para nombrarlos sin normalizar ya que es la notación comúnmente usada.

La ecuación diferencial de la que son solución es:

$$\left[(1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + n(n + 1) \right] P_n(x) = 0 \quad ; \quad -1 \leq x \leq 1 \quad [42]$$

y todos ellos pueden generarse a partir de los dos primeros:

$$P_0(x) = 1 \quad ; \quad P_1(x) = x \quad [43]$$

sin más que aplicar la fórmula de recurrencia:

$$(n + 1)P_{n+1}(x) = (2n + 1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x) \quad [44]$$

Aunque existen más tipos de fórmulas recurrentes, la anterior es la más apropiada para realizar cálculos numéricos, ya que permite calcular $P_n(x)$, para todo x , sin una pérdida sustancial de cifras significativas (Galindo y Pascual, 1978).

Una fórmula alternativa, no recurrente, que permite obtener también los polinomios de Legendre, es la *fórmula de Rodrigues*:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n \cdot n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad [45]$$

Aparte de las propiedades generales de los polinomios ortogonales, los que nos ocupan aquí verifican entre otras las siguientes (Ejercicios 5 y 10):

$$\text{i) } P_n(1) = 1 \quad [46]$$

$$\text{ii) } P_n(-x) = (-1)^n P_n(x) \quad [47]$$

$$\text{iii) } \int_{-1}^1 P_n(x) \cdot P_m(x) dx = \frac{2}{2n + 1} \delta_{nm} \quad [48]$$

La relación iii) es la de ortonormalidad y se corresponde a tomar una función de peso $\omega(x) = 1$ en $-1 \leq x \leq 1$.

Los polinomios $P_n(x)$ forman una base ortonormal completa para el

espacio de Hilbert $L^2(-1 \leq x \leq 1)$ de las funciones $y(x)$ de cuadrado integrable. Se puede escribir entonces que:

$$y(x) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m P_m(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 y(x) \cdot P_m(x) dx \right] \cdot P_m(x) \quad ; \quad -1 \leq x \leq 1 \quad [49]$$

Estas funciones son un caso particular de las *funciones asociadas de Legendre* $P_l^m(x)$ ($l = 0, 1, 2, \dots$; $m = -l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l$) cuando $m = 0$:

$$P_l(x) = P_l^0(x) \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad [50]$$

Las funciones P_l^m intervienen en la construcción de los armónicos esféricos $Y_l^m(\theta, \varphi)$ con los que se formulan los orbitales atómicos hidrogenoides.

Estas funciones (no son polinomios) pueden calcularse con la expresión (Galindo y Pascual, 1978).

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{(-1)^m}{l! 2^l} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l$$

3.3. Polinomios de Laguerre

Consideremos ahora el conjunto ortogonal de polinomios $L_n(x)$ de Laguerre que está definido sobre un dominio infinito $0 \leq x < +\infty$ y con la función de peso $\omega(x) = e^{-x}$. Su función generatriz es:

$$\frac{\exp[-xt/(1-t)]}{1-t} = \sum_{m=0}^{\infty} L_m(x) t^m \quad ; \quad 0 \leq x < +\infty; \quad |t| < 1 \quad [51]$$

y la ecuación diferencial de la que convenientemente normalizados son solución es:

$$\left[x \frac{d^2}{dx^2} + (1-x) \frac{d}{dx} + n \right] L_n(x) = 0 \quad [52]$$

A partir de los dos primeros:

$$L_0(x) = 1 \quad ; \quad L_1(x) = 1 - x \quad [53]$$

pueden generarse todos los demás aplicando la recurrencia (Ejercicio 6):

$$(n + 1)L_{n+1}(x) = (2n + 1 - x)L_n(x) - nL_{n-1}(x) \quad [54]$$

En este caso la *fórmula de Rodrigues* es:

$$L_n(x) = \frac{1}{n!} e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}) \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [55]$$

Tal y como se han definido aquí (Galindo y Pascual, 1978) los $L_n(x)$ son ya ortonormales:

$$\int_0^\infty e^{-x} L_n(x) \cdot L_m(x) dx = \delta_{nm} \quad [56]$$

Una generalización de estos polinomios, los *polinomios generalizados de Laguerre* L_n^k se utilizan para construir la parte radial de los orbitales atómicos del átomo de hidrógeno y se pueden determinar de la receta:

$$L_n^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{n+k}(x) \quad ; \quad n, k = 0, 1, 2, \dots \quad [57]$$

A título de curiosidad mencionaremos la existencia de los polinomios de *Sonine* (Balescu, 1975; Hirschfelder y col., 1955). Estos polinomios son de gran utilidad en la teoría cinética de gases diluidos y su forma coincide con la de los polinomios «asociados» de Laguerre $L_n^k(x)$ (Ejercicio 7).

3.4. Ejemplo de aplicación: La vibración molecular y los polinomios de Hermite

A continuación vamos a fijarnos en el problema del oscilador armónico cuántico (estacionario) monodimensional, que resulta tener una importancia capital en la teoría de las *vibraciones moleculares*. Al considerar este problema nos aparecerá otra familia de polinomios ortogonales, los de *Hermite*.

La ecuación de Schrödinger estacionaria para nuestro oscilador de masa m y constante de fuerza K es:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} Kx^2 \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad ; \quad -\infty < x < +\infty \quad [58]$$

que conviene reescribir en forma adimensional como:

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} + (\lambda - \xi)^2 \right] \psi(\xi) = 0 \quad ; \quad -\infty < \xi < +\infty \quad [59]$$

en donde:

$$\xi = \alpha x \quad ; \quad \alpha = \left(\frac{mK}{\hbar^2} \right)^{1/4} \quad [60]$$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar} \left(\frac{m}{K} \right)^{1/2} = \frac{2E}{\hbar\omega_c} \quad [61]$$

siendo ω_c la frecuencia angular clásica de vibración.

Es un hecho conocido que la función $\psi(\xi)$ en la región asintótica $\xi \rightarrow \pm\infty$ debe ser tal que:

$$\psi(\xi) \xrightarrow{\xi \rightarrow \pm\infty} 0 \quad [62]$$

Para $|\xi|$ muy grandes es muy fácil comprobar que una función del tipo:

$$f(\xi) = \xi^n \exp[-\xi^2/2] \quad [63]$$

satisface [59], en tanto n sea finito. La razón se encuentra en que el término dominante, salvo constantes, que resulta de sustituir [63] en [59] se comporta:

$$\lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} [\xi^{n+2} \exp(-\xi^2/2)] = 0 \quad [64]$$

Esto es un indicio de que podría encontrarse una solución exacta a [59] de la forma:

$$u(\xi) = H(\xi) \exp(-\xi^2/2) \quad [65]$$

en donde $H(\xi)$ es un polinomio de orden finito en ξ . Empleando [65] se obtiene de [59] la ecuación diferencial para $H(\xi)$:

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0 \quad [66]$$

Tras una argumentación que puede encontrarse en (Schiff, 1981) se llega a la identificación:

$$\lambda = 2n + 1 \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [67]$$

que nos da los autovalores (energías) de [58]:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [68]$$

cada uno de los cuales lleva asociada una función [65] cuyo polinomio $H_n(\xi)$ es una solución de la ecuación diferencial de Hermite:

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0 \quad [69]$$

Los dos primeros polinomios son:

$$H_0(\xi) = 1 \quad ; \quad H_1(\xi) = 2\xi \quad [70]$$

pudiéndose obtener el resto a partir de la recurrencia (Ejercicio 8):

$$H_n(\xi) = 2\xi H_{n-1}(\xi) - 2(n-1)H_{n-2}(\xi) \quad ; \quad n \geq 2 \quad [71]$$

Existe aquí también la consabida fórmula de Rodrigues:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad [72]$$

Por último mencionamos la función generatriz de estas funciones:

$$\exp [2\xi y - y^2] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) \cdot y^n \quad [73]$$

y escribimos la relación de ortonormalidad que cumplen con la función de peso $\omega(x) = \exp(-\xi^2)$ en el dominio infinito $-\infty < x < +\infty$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp [-\xi^2] \cdot H_n(\xi) \cdot H_m(\xi) d\xi = \sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n! \delta_{nm} \quad [74]$$

4. ANALISIS DE FOURIER

Representaremos a continuación funciones (periódicas) en forma de series trigonométricas, integrales (límite de la serie cuando el índice de sumación se convierte en variable continua) y sumas trigonométricas (caso discreto). Empecemos revisando algunos conceptos básicos.

Se dice que una función $y(x)$ es periódica con período p cuando:

$$y(x + p) = y(x) \quad \text{para todo } x \in \text{Dominio } (y) \quad [75]$$

Todos los múltiplos y submúltiplos enteros de p verifican esta ecuación. Tomaremos p entonces como el menor número positivo que la cumpla y le llamaremos *período fundamental*. Ejemplos de funciones periódicas son $y = \text{sen } x$, $y = \text{cos } x$ ($p = 2\pi$), o las más generales $y = a_n \cos(nx + \varphi)$ con n entero ($p = 2\pi/n$). A este tipo de funciones se las llama *armónicas* y juegan un papel fundamental en el *análisis de Fourier*, a veces conocido como *análisis armónico*.

Una suma general de armónicos:

$$S_F(z) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos n\omega z + b_n \text{sen } n\omega z) \quad [76]$$

posee un período $p = 2\pi/\omega$. Ahora bien, haciendo $\omega z = x$, se llega sin dificultad a:

$$S_F(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \text{sen } nx) \quad ; \quad a_1 \text{ ó } b_1 \neq 0 \Rightarrow p = 2\pi \quad [77]$$

por lo que siempre podremos trabajar con series de Fourier de período $p = 2\pi$. Caso de ser necesario, al final se desharían los cambios de variable efectuados.

Notemos que la función definida en [77] es una serie de funciones armónicas, seno y coseno, que comparten muchas propiedades interesantes con los polinomios. Podemos citar entre otras: sus valores numéricos se calculan con facilidad mediante series numéricas rápidamente convergentes; sus derivadas e integrales sucesivas son de nuevo senos y

cosenos. Principalmente estaremos interesados en las propiedades de las funciones definidas por [77] y, sobre todo, en qué medida una función periódica arbitraria $y(x)$ puede ser desarrollada en armónicos de aquella forma. Dado que:

$$\int_0^{2\pi} \text{sen } nx \cdot \text{sen } mx \, dx = \pi \cdot \delta_{mn}$$

$$\int_0^{2\pi} \text{sen } nx \cdot \cos mx \, dx = 0$$

$$\int_0^{2\pi} \cos nx \cdot \cos mx \, dx = \begin{cases} 2\pi & \text{si } m = n = 0 \\ \pi \delta_{mn} & \text{si } m, n \neq 0 \end{cases} \quad [78]$$

el conjunto base, $1/2, \text{sen } x, \cos x, \text{sen } 2x, \cos 2x, \dots$, está compuesto por *funciones ortogonales* en el dominio $0 \leq x \leq 2\pi$; así el material que se presenta a continuación es una prolongación de lo dicho al hablar de los polinomios ortogonales.

Como se ve, hemos orientado la introducción de este epígrafe hacia el caso *continuo*, ya que parece el más importante para las aplicaciones. Oportunamente trataremos el caso discreto.

4.1. Series de Fourier

Dada la serie $S_F(x)$ definida en [77], siendo a_1 ó $b_1 \neq 0$ ($p = 2\pi$), la supondremos *uniformemente convergente* (Apostol, 1972) en todo el período, de modo que defina una función continua $y(x)$ con $p = 2\pi$. Para ello basta tomar los coeficientes a_n y b_n tales que:

$$\sum_{n=1}^{\infty} |a_n| < +\infty \quad ; \quad \sum_{n=1}^{\infty} |b_n| < +\infty \quad [79]$$

con lo que la serie convergente:

$$C = \sum_{n=1}^{\infty} (|a_n| + |b_n|) < +\infty \quad [80]$$

es mayorante de la serie funcional $S_F(x)$:

$$C \geq S_F(x) \quad ; \quad 0 \leq x \leq 2\pi \quad [81]$$

siendo por tanto $S_F(x)$ uniformemente convergente (*criterio M de Weierstrass*). Podremos poner entonces:

$$y(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \operatorname{sen} nx) \quad [82]$$

y disponernos a evaluar los coeficientes a_n y b_n vía integraciones en $0 \leq x \leq 2\pi$.

Por integración directa se encuentra:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} y(x) dx &= \frac{a_0}{2} \int_0^{2\pi} dx + \int_0^{2\pi} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \operatorname{sen} nx) \right\} dx = \\ &= \frac{a_0}{2} \cdot 2\pi + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ a_n \int_0^{2\pi} \cos nx dx + b_n \int_0^{2\pi} \operatorname{sen} nx dx \right\} = \\ &= \frac{a_0}{2} \cdot 2\pi \end{aligned} \quad [83]$$

en donde los símbolos \int y \sum pueden intercambiarse por la convergencia uniforme mencionada. El primer término de la serie es pues:

$$\frac{a_0}{2} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} y(x) dx \quad [84]$$

expresión que, en definitiva, da el *valor medio integral* de $y(x)$ en el período.

Para calcular los coeficientes a_m multiplicamos por $\cos mx$ ambos miembros de [82], e integrando:

$$\int_0^{2\pi} \cos mx \cdot y(x) dx =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{a_0}{2} \int_0^{2\pi} \cos mx \, dx + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ a_n \int_0^{2\pi} \cos mx \cdot \cos nx \, dx + \right. \\
&\quad \left. + b_n \int_0^{2\pi} \cos mx \cdot \operatorname{sen} nx \, dx \right\} = a_m \pi \quad [85]
\end{aligned}$$

de donde:

$$a_m = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} y(x) \cdot \cos mx \, dx \quad ; \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad [86]$$

De manera similar, multiplicando por $\operatorname{sen} mx$ e integrando, se llega a:

$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} y(x) \operatorname{sen} mx \, dx \quad ; \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad [87]$$

Conviene prestar atención al hecho de que a través del cálculo de los a_m y b_m anterior se ha definido una función $y(x) = S_F(x)$. No obstante, ¿qué sucedería en el caso inverso? Es decir, dada una función $y(x)$ arbitraria y de período 2π , si aplicamos [84]-[87] y obtenemos a_m y b_m , la serie de Fourier así engendrada:

- a) ¿Será convergente y definirá una función?
- b) En caso afirmativo, ¿la función representada por la serie coincidirá con la función generadora $y(x)$?

Estas cuestiones se suscitaron hace bastante tiempo con motivo de la obra de Fourier *La Théorie Analytique de la Chaleur* publicada en 1822. Este monumental trabajo fue sometido a la Academia de Ciencias de París que criticándolo severamente decidió excluirlo del premio anual que otorgaba. El jurado en cuestión (Lagrange, Laplace y Legendre) opinó que, aunque el método de Fourier era muy práctico, no era satisfactorio como teoría matemática. Fourier no demostraba que una función arbitraria $y(x)$ periódica pudiera desarrollarse en serie de senos y cosenos, lo que en la terminología de hoy diríamos que no demostró la completitud de la base trigonométrica.

La respuesta a estas preguntas es compleja y llegó a principios de nuestro siglo, muchos años después de haber sido planteadas. Nos limita-

remos a enunciar la condición suficiente de Dirichlet (Arfken, 1970) que resuelve la mayor parte de los problemas habituales. El lector interesado en más detalles puede dirigirse a la estupenda obra de Apostol ya citada.

Esta condición suficiente dice que cuando $y(x)$ es continua o posee un número finito de discontinuidades de salto finito:

$$\left. \begin{array}{l} \lim_{x \rightarrow x_0+} y(x) = y(x_{0+}) \\ \lim_{x \rightarrow x_0-} y(x) = y(x_{0-}) \end{array} \right\} y(x_{0+}) \neq y(x_{0-}) \quad (\text{finitos}) \quad [88]$$

y un número finito de máximos y mínimos, todo ello en $0 \leq x \leq 2\pi$, entonces la serie de Fourier $S_F(x)$ originada por $y(x)$ es convergente y tal que:

- i) $S_F(x) = y(x)$ en todo x donde $y(x)$ sea continua
- ii) $S_F(x_0) = (y(x_{0+}) + y(x_{0-}))/2$ en todo $x = x_0$ en donde haya una discontinuidad del tipo indicado.

Conviene añadir aquí algunos detalles complementarios:

- Si $y(x)$, periódica 2π , es continua y diferenciable, $S_F(x)$ converge uniformemente.
- Si en los intervalos de continuidad dentro de $[0, 2\pi]$ $y'(x)$ es de variación acotada, $S_F(x)$ converge uniformemente en subintervalos interiores a los de continuidad.
- En las proximidades de una discontinuidad de salto (no hay convergencia uniforme en ella), las sumas parciales de $S_F(x)$ se aproximan de forma oscilante a la discontinuidad. A medida que aumenta el número de términos la proximidad es mayor, pero la oscilación no ajusta el tamaño del salto tendiendo a sobreestimarlos (*fenómeno de Gibbs*).

Supuesto que deseemos desarrollar en serie de Fourier una función periódica $y(x)$ ($p = 2\pi$) que cumpla las condiciones anteriores, notemos que el cálculo de los coeficientes a_m y b_m puede llevarse a cabo sustituyendo los límites de integración 0 y 2π por $-\pi$ y π , respectivamente. Esta operación tan trivial puede simplificar grandemente los cálculos, pues si $y(x)$ es una función par, se tiene:

$$y(x) = y(-x) \Rightarrow y(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos nx \quad [89]$$

y si $y(x)$ es impar:

$$y(x) = -y(-x) \Rightarrow y(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{sen} nx \quad [90]$$

como cabría anticipar por argumentos de simetría (Ejercicio 9a).

La aproximación resultante de truncar la serie de Fourier a un n dado para una función aceptable $y(x)$ se puede obtener del criterio de mínimos cuadrados (Ejercicio 9b). Por otra parte, las series de Fourier tienen una gran utilidad para sumar series numéricas cuya evaluación por otros caminos sería hartamente dificultosa (Ejercicio 9c-d).

Por último, utilizando exponenciales complejas reescribiremos la serie de Fourier [77] en forma compacta. Expresando los senos y cosenos por mediación de las relaciones de Euler:

$$\cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \quad ; \quad \operatorname{sen} x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \quad [91]$$

obtenemos una serie:

$$\begin{aligned} S_F(x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \operatorname{sen} nx) = \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2} \left(a_n + \frac{b_n}{i} \right) e^{inx} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2} \left(a_n - \frac{b_n}{i} \right) e^{-inx} = \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{inx} + \sum_{n=1}^{\infty} c_{-n} e^{-inx} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{inx} \end{aligned} \quad [92]$$

Si esta serie es uniformemente convergente, definirá una función $y(x)$ que expresamos en términos de la base ortogonal e^{inx} ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$):

$$y(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{inx} \quad ; \quad \int_{-\pi}^{\pi} e^{imx} \cdot e^{-inx} dx = 2\pi \delta_{nm} \quad [93]$$

siendo:

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} y(x) e^{-inx} dx \quad [94]$$

en donde es de notar la conjugación compleja con que afectamos a uno de los factores. Esta forma de desarrollo en serie nos servirá después para introducir el concepto de *integral de Fourier*.

4.2. Ejemplo de aplicación: Evolución temporal de una función de onda

Sea una partícula cuántica de masa m que se encuentra en una caja monodimensional con el potencial:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } -\pi \leq x \leq \pi \\ \infty & \text{en otro caso} \end{cases}$$

En el instante inicial $t = 0$ la función de estado que la describe (no propia del hamiltoniano H) es:

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} b(1 + x/\pi) & -\pi \leq x < 0 \\ b(1 - x/\pi) & 0 \leq x \leq \pi \end{cases}$$

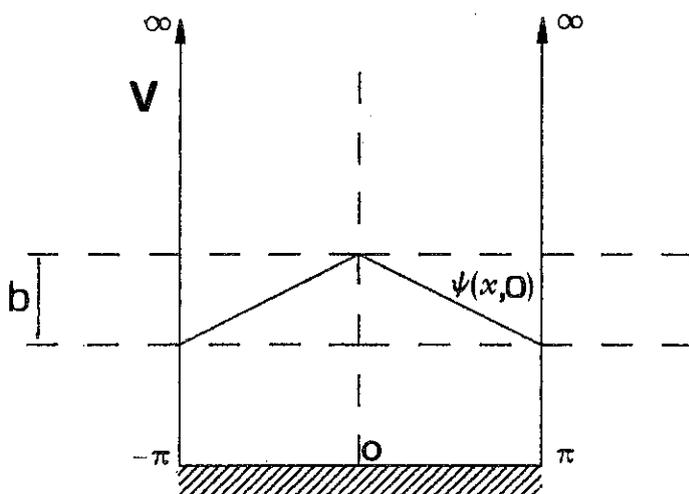


Figura 2.—Pozo de potencial de paredes infinitas y función de estado inicial $\psi(x, 0)$ para 4.2

Nos interesa conocer la evolución temporal de esa función de onda, $\psi(x, t)$, que viene dada formalmente por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

y más explícitamente por el desarrollo (Schiff, 1981):

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp[-iE_n t/\hbar] f_n(x)$$

En esta expresión, E_n son las energías de los estados estacionarios $f_n(x)$ de la partícula:

$$f_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \cos \frac{nx}{2} & ; \quad n = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}} \operatorname{sen} \frac{nx}{2} & ; \quad n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$$

y los coeficientes c_n se eligen de modo que se satisfaga la condición inicial:

$$\psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x)$$

que no es más que una serie de Fourier. Esta serie es un tanto particular, pues no aparece $n = 0$ y para un n dado sólo existe contribución seno o coseno pero no ambas. Tenemos así una serie simplificada que carecerá de término independiente $a_0/2$ y de armónicos $\operatorname{sen} x/2$, $\cos x$, etc.

Normalizaremos primeramente $\psi(x, 0)$:

$$\int_{-\pi}^{\pi} |\psi(x, 0)|^2 dx = \left[\int_{-\pi}^0 (1 + x/\pi)^2 dx + \int_0^{\pi} (1 - x/\pi)^2 dx \right] \cdot b^2 = 1$$

resultando la constante b :

$$b = \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{1/2}$$

El paso final es calcular los coeficientes c_n a partir de la relación:

$$c_n = \int_{-\pi}^{\pi} f_n(x)\psi(x, 0) dx \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

tarea que se ve reducida si nos fijamos en que $\psi(x, 0)$ es función par. Sobreviven entonces únicamente los términos con n impar (cosenos) quedando:

$$\begin{aligned} c_n &= \int_{-\pi}^{\pi} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \cos \frac{nx}{2} \cdot \psi(x, 0) dx = \\ &= \frac{1}{\pi} \left(\frac{3}{2}\right)^{1/2} \left[\int_{-\pi}^0 \cos \frac{nx}{2} \cdot (1 + x/\pi) dx + \right. \\ &\left. + \int_0^{\pi} \cos \frac{nx}{2} \cdot (1 - x/\pi) dx \right] \quad ; \quad n = 1, 3, 5, \dots \end{aligned}$$

Tras las pertinentes integraciones encontramos:

$$c_n = \frac{4\sqrt{6}}{\pi^2 n^2} \quad ; \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

En resumen, la función de onda inicial es el desarrollo en serie de Fourier:

$$\psi(x, 0) = \frac{4\sqrt{6}}{\pi^{5/2}} \sum_{n=1, 3, 5, \dots} \frac{\cos \frac{nx}{2}}{n^2}$$

y en un instante t cualquiera ψ es el desarrollo en serie de funciones ortogonales:

$$\psi(x, t) = 4 \sqrt{\frac{6}{\pi^5}} \sum_{n=1, 3, 5, \dots} \frac{\cos nx/2}{n^2} \cdot \exp[-iE_n t/\hbar]$$

4.3. Transformación de Fourier

Nos hemos limitado hasta aquí a tratar con funciones periódicas o con funciones que a efectos de desarrollo, aunque en sí mismas no sean periódicas, puede extenderse su definición imponiendo cierta condición de periodicidad ($p = b - a$). En los casos apropiados estas funciones se representaban con series de Fourier. Sin embargo, para funciones $y(x)$ definidas en todo el eje real $\mathbb{R}(-\infty, +\infty)$ y que no sean periódicas, sería ilusorio esperar conseguir representarlas vía series de Fourier. En estas ocasiones y con las condiciones apropiadas la representación viene dada por la llamada *integral de Fourier*, que se extiende sobre todo el dominio real. La analogía con las series es grande, pues una integral es el límite de una serie cuando el índice de sumación se hace continuo.

Ahora siguiendo un método heurístico (Brillouin, 1962), en absoluto riguroso (véase para ello (Schwartz, 1969)), obtendremos la forma de la integral de Fourier para una función no periódica. Consideremos una típica función «pulsante» $f(x)$ (Fig. 3) que se repite periódicamente ($p = 2\pi/\omega_0 = 1/\nu_0$):

$$f(x) = \begin{cases} f_0 & \text{si } -a \leq x \leq a ; p > 2a \\ 0 & \text{si } \begin{cases} a < x < p/2 \\ -p/2 < x < -a \end{cases} \end{cases} \quad [95]$$

Esta función admite una serie de Fourier [93] que escribimos:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{in\omega_0 x} ; c_n = \frac{1}{p} \int_{-a}^a f(x) e^{-in\omega_0 x} dx \quad [96]$$

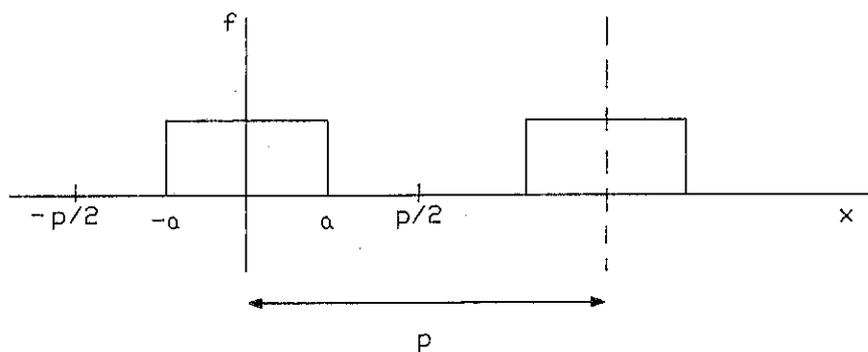


Figura 3.—Función pulsante.

Si $f(x)$ es una función real, entonces $c_n = c_n^*$ (* = conjugación compleja). Por comodidad introducimos la notación $\omega_n = \omega_0 n = 2\pi v_n$. Con ello la suma discreta en [96] puede ponerse como:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{i\omega_n x} \cdot \Delta n = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \cdot p \cdot e^{i2\pi v_n x} \cdot \Delta v \quad [97]$$

en donde

$$\Delta n = 1 \quad ; \quad v_n = n v_0 \quad ; \quad \Delta v = v_0 = 1/p \quad [98]$$

Tomando el límite $p \rightarrow \infty$, lo que equivale a hacer la distancia entre pulsos infinita, la suma [97] se transforma en una integral:

$$y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} C(v) e^{i2\pi v x} dv \quad [99]$$

y teniéndose inversamente:

$$\lim_{p \rightarrow \infty} (c_n p) = C(v) = \int_{-\infty}^{\infty} y(x) e^{-i2\pi v x} dx \quad [100]$$

A la pareja de funciones $y(x)$, $C(v)$ se las denomina *transformadas de Fourier* una de la otra, y al par [99]-[100] se las conoce como *relaciones de reciprocidad*.

La expresión de las transformadas de Fourier anteriores aparece en la bibliografía en forma similar, pero a veces afectadas de ciertas constantes. Es muy habitual encontrarlas formuladas como (Courant y Hilbert, 1963):

$$y(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx} dk \quad [101]$$

$$C(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} y(x) e^{-ikx} dx \quad [102]$$

o con los signos de $k (= \omega)$ en las exponenciales cambiados. Utilizando las relaciones [113] [125] es fácil encontrar el sentido de los factores preinte-

grales. La transformada de Fourier de una función es, en general, una magnitud compleja. Así $C(k)$ es:

$$C(k) = R(k) + iI(k) = |C(k)|e^{i\theta(k)} \quad [103]$$

siendo $R(k)$ la parte real e $I(k)$ la imaginaria de la transformación de Fourier. $|C(k)|$ es la *amplitud o espectro* de Fourier de $y(x)$:

$$|C(k)| = \sqrt{|R(k)|^2 + |I(k)|^2} \quad [104]$$

si bien a veces se denomina *espectro o densidad espectral* a $|C(k)|^2$ como veremos en el Tema 9. El factor $\exp(i\theta(k))$ contiene el ángulo de fase de la transformación de Fourier que está dado por:

$$\theta(k) = \text{arc tg } [I(k)/R(k)] \quad [105]$$

Al espacio k en el que se define $C(k)$ se le llama *complementario* del espacio inicial x .

Es importante darse cuenta de que no se ha dicho nada sobre la validez de [101]-[102]. En general, para la mayor parte de las funciones que se encuentran en el análisis práctico de problemas químico-físicos, las transformadas de Fourier directa e inversa están bien definidas. Podemos enumerar dos condiciones suficientes para la existencia del par [101]-[102]. Así, en tanto que $y(x)$ sea de *variación acotada*, es decir representable por una curva de longitud finita en cualquier intervalo finito $a \leq x \leq b$, su transformada $C(k)$ existe y satisface la inversión [102] si (Schwartz, 1969; Apostol, 1972):

i) $y(x)$ es absolutamente integrable:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |y(x)| dx < +\infty \quad [106]$$

Si se desea convergencia en media se exige

ii) $y(x)$ sea de cuadrado integrable:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |y(x)|^2 dx < +\infty \quad [107]$$

Cuando el intervalo de integración es finito $[a, b]$, una función que verifica ii) cumple también i). El recíproco no es necesariamente cierto.

En el caso ii) existe también una relación de *Parseval (Plancherel-Parseval)* análoga a [38]. Sea $y(x)$ una función compleja de variable real. La relación [107] es salvo constantes:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |y(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} y^*(x) \cdot y(x) \cdot dx = \int_{-\infty}^{\infty} y^*(x) \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx} dk dx \quad [108]$$

Integrando en x se llega a:

$$\int_{-\infty}^{\infty} y^*(x) e^{ikx} dx = C^*(k) \quad [109]$$

y por tanto:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |y(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \cdot C^*(k) dk = \int_{-\infty}^{\infty} |C(k)|^2 dk \quad [110]$$

que es la identidad señalada.

Mencionaremos también que para funciones que verifican [106], si son de variación acotada en un entorno de un cierto x_0 , su representación integral de Fourier toma el valor $(y(x_{0+}) + y(x_{0-}))/2$ en x_0 (Schwartz, 1969).

La generalización a más de una dimensión es inmediata. Si tenemos factores preintegrales, éstos aparecen en la forma $(2\pi)^{-d/2}$ ($d = \text{dimensionalidad}$). Por otra parte, el producto simple kx en la exponencial se ve reemplazado por el producto escalar $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}$ (Ejercicio 10). Por ejemplo, para $d = 3$:

$$y(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \iiint_{-\infty}^{\infty} C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \cdot d\mathbf{k}$$

$$C(\mathbf{k}) = (2\pi)^{-3/2} \iiint_{-\infty}^{\infty} y(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \cdot d\mathbf{x}$$

4.4. Sumas trigonométricas (caso discreto)

Retomamos, para finalizar, la discusión de aproximar una función tabular $\{(x_k, y_k)\}_{k=0, 1, \dots, N}$ periódica mediante una *suma trigonométrica* T_M :

$$T_M(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^M \left\{ a_n \cos \frac{2\pi}{2L+1} nx + b_n \operatorname{sen} \frac{2\pi}{2L+1} nx \right\} \quad [111]$$

(consideramos un número impar de puntos $N + 1 = 2L + 1$ y $M < L$) que haga mínima la suma:

$$S = \sum_{k=0}^{2L} [y_k - T_M(x_k)]^2 \quad [112]$$

(si $M = L$, encontraríamos la suma trigonométrica de colocación).

Procediendo como de costumbre y aplicando relaciones de trigonometría elemental se llega a (Scheid, 1972):

$$a_n = \frac{2}{2L+1} \sum_{k=0}^{2L} y_k \cos \frac{2\pi}{2L+1} nx_k \quad ; \quad n = 0, 1, \dots, M \quad [113]$$

$$b_n = \frac{2}{2L+1} \sum_{k=0}^{2L} y_k \operatorname{sen} \frac{2\pi}{2L+1} nx_k \quad ; \quad n = 1, 2, \dots, M \quad [114]$$

Las propiedades de ortogonalidad que se aplican son:

$$\sum_{k=0}^N \operatorname{sen} \frac{2\pi}{N+1} nx_k \cdot \operatorname{sen} \frac{2\pi}{N+1} mx_k = \begin{cases} 0 & n \neq m \quad \text{ó} \quad n = m = 0 \\ \frac{N+1}{2} & n = m \neq 0 \end{cases}$$

$$\sum_{k=0}^N \operatorname{sen} \frac{2\pi}{N+1} nx_k \cdot \cos \frac{2\pi}{N+1} mx_k = 0 \quad ; \quad n, m = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\sum_{k=0}^N \cos \frac{2\pi}{N+1} nx_k \cdot \cos \frac{2\pi}{N+1} mx_k = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ (N+1)/2 & n = m \neq 0 \\ N+1 & n = m = 0 \end{cases}$$

siendo $m + n \leq N$.

Lo mismo puede hacerse para cuando el número de puntos es par obteniéndose, claro está, distintas expresiones para los coeficientes a_n , b_n .

5. LA «FUNCION» δ DE DIRAC

Es conveniente introducir ahora con cierto detalle un nuevo objeto matemático muy útil tanto para aplicaciones posteriores (Temas 6-7) como para la comprensión de aspectos centrales de las mecánicas cuántica y estadística. Nos referimos a la «función» δ de Dirac que, aunque en sentido matemático estricto no es una verdadera *función*, conserva este nombre por razones históricas (Dirac, 1930). En cierto modo la δ -Dirac puede ser vista como la generalización al caso continuo de la conocida δ_{ij} de Kroenecker:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

El uso de la δ -Dirac está ligado al estudio de problemas que implican fuerzas instantáneas; por ejemplo, han sido ampliamente utilizadas como modelo para describir las repulsiones entre nucleones dentro del núcleo. Una particularidad notable es que los potenciales tipo δ conducen a buenos operadores energía, pudiéndose resolver completamente la ecuación de Schrödinger (Galindo y Pascual, 1978).

La δ -Dirac se define en una dimensión (Schwartz, 1969; Arfken, 1970):

$$\left. \begin{aligned} \delta(x - x') &= 0 & \text{si } & x \neq x' \\ \delta(x - x') &= +\infty & \text{si } & x = x' \end{aligned} \right\} \quad [115]$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \cdot dx = 1 \quad (\text{normalización}) \quad [116]$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} y(x) \delta(x - x') \cdot dx = y(x') \quad [117]$$

en donde se considera que $y(x)$ es *continua* en $x = x'$ y en las integraciones se incluye este punto (*singularidad* o *fuelle*). Estas ecuaciones indican que $\delta(x - x')$ es una «función» infinitamente estrecha e infinitamente alta picada sobre $x = x'$, de modo que su integral sobre todo el eje real sea la unidad.

Lamentablemente estas propiedades son *incompatibles* con el concepto habitual de función. Si δ es no nula sólo en $x = x'$, entonces su integral (de

Lebesgue) es *forzosamente* nula en contra de la propiedad [116]. Además, considerando la función $y(x) = C = \text{constante}$, tendremos que $C\delta(x - x')$ coincide con $\delta(x - x')$, ya que ambas toman los mismos valores. Esto está en contra de lo indicado por [117] que fuerza a que el resultado de esta integral sea C (en general $\neq 1$).

A pesar de esta inconsistencia podemos aproximar el concepto representado por la δ -Dirac (densidad de masa para una partícula puntual, por ejemplo) mediante sucesiones de funciones. Existen varios tipos de familias de funciones δ_n que sirven para ello. *Formalmente*, ya que la notación no es rigurosa, suele escribirse:

$$\begin{aligned} \delta(x - x') &= \lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n(x - x') = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{n^2}{\pi}} \exp(-n^2(x - x')^2) = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n}{\pi} \cdot \frac{1}{1 + n^2(x - x')^2} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\text{sen } n(x - x')}{\pi(x - x')} = \dots \end{aligned} \quad [118]$$

De nuevo y a pesar de la utilidad física de estas representaciones, matemáticamente el problema no está resuelto: los límites expresados en las igualdades [118] *no existen*.

En realidad la «función» $\delta(x - x')$ es mucho más que una función. Se trata de una *funcional lineal* que opera sobre un conjunto de funciones $y(x)$ con «buen comportamiento» (continuas). El término matemático para el «operador» δ es *distribución* y la propiedad básica es [117]. Las ecuaciones [118] representan, en definitiva, sucesiones de funciones normalizadas de manera que las sucesiones de integrales asociadas tengan el límite esperado:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(x - x') \cdot dx = 1 \quad [119]$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(x - x') y(x) \cdot dx = y(x') \quad [120]$$

El manejo de la δ -Dirac está *siempre* asociado a la realización de una integral y su uso se representa abreviadamente por [117], bien entendido que esto significa:

$$\int_{-\infty}^{\infty} y(x) \delta(x - x') dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} y(x) \delta_n(x - x') dx = y(x') \quad [121]$$

La δ -Dirac *nunca* puede ser, pues, el resultado final de un cálculo. Con estas precisiones en mente no debe extrañar que pueda hablarse de la «derivada» de $\delta(x-x')$: $\delta'(x-x') = d\delta(x-x')/dx$ (derivada de una distribución) y de sus relaciones con la «función» original, etcétera (Ejercicio 11a).

Para ilustrar estas ideas empezaremos por escribir algunas propiedades útiles de la δ -Dirac. Por comodidad en la notación tomaremos $x' = 0$ cuando así convenga:

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \delta(-x) && \text{«paridad»} \\ \delta'(x) &= -\delta'(-x) \\ x\delta(x) &= 0 \\ x\delta'(x) &= -\delta(x) \\ \delta(ax) &= a^{-1} \delta(x) && a > 0 \\ \delta(x^2 - a^2) &= (2a)^{-1} [\delta(x-a) + \delta(x+a)] && a > 0 \\ \int_{-\infty}^{\infty} \delta(a-x) \delta(x-b) dx &= \delta(a-b) \\ y(x) \delta(x-a) &= y(a) \delta(x-a) \end{aligned} \quad [122]$$

Como ejemplo vamos a analizar el sentido de la cuarta propiedad: $x\delta'(x) = -\delta(x)$, utilizando la sucesión gaussiana δ_n expresada en [118] y la propiedad básica [117].

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} y(x) x \delta_n'(x) \cdot dx &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} y(x) \cdot x \left[\sqrt{\frac{n^2}{\pi}} e^{-n^2 x^2} \right]' dx = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left[xy(x) \cdot \sqrt{\frac{n^2}{\pi}} e^{-n^2 x^2} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{n^2}{\pi}} e^{-n^2 x^2} (y(x) + xy'(x)) dx \right] = \\ &= - \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{n^2}{\pi}} e^{-n^2 x^2} \cdot y(x) dx - \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} xy'(x) \cdot \sqrt{\frac{n^2}{\pi}} e^{-n^2 x^2} dx = \\ &= - \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{n^2}{\pi}} e^{-n^2 x^2} y(x) \cdot dx \end{aligned} \quad [123]$$

identificándose la relación pedida, ya que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} n y'(x) x \cdot e^{-n^2 x^2} \cdot dx = \left\{ \begin{array}{l} u = y'(x) \quad du = y''(x) dx \\ dv = x \cdot e^{-n^2 x^2} dx \quad v = -\frac{1}{2n^2} e^{-n^2 x^2} \end{array} \right\} =$$

$$= \lim_{n \rightarrow \infty} \left[-\frac{n}{2n^2} e^{-n^2 x^2} \cdot y'(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} + \frac{n}{2n^2} \int_{-\infty}^{\infty} y''(x) \cdot e^{-n^2 x^2} dx \right] = 0 \quad [124]$$

El mismo resultado puede obtenerse por manipulación formal de la expresión [117] pertinente (Ejercicio 11b).

Dos definiciones alternativas y de amplio uso para la δ -Dirac vienen dadas a través de la *función paso unidad de Heaviside* y de la transformación de *Fourier*. La función de *Heaviside* se representa como:

$$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad [125]$$

y su derivada es la δ -Dirac. Para comprobarlo consideremos el siguiente cálculo (Dirac, 1958). Sean α_1 y α_2 dos números positivos y evaluemos por partes la integral siguiente:

$$\int_{-\alpha_2}^{\alpha_1} y(x) \frac{dH(x)}{dx} \cdot dx = y(x) H(x) \Big|_{-\alpha_2}^{\alpha_1} - \int_{-\alpha_2}^{\alpha_1} y'(x) \cdot H(x) \cdot dx =$$

$$= y(\alpha_1) - \int_0^{\alpha_1} y'(x) dx = y(0)$$

de donde formalmente se concluye la equivalencia entre $\delta(x)$ y la derivada de $H(x)$. Puede decirse que *siempre* que se deriva una función discontinua aparece la δ -Dirac:

$$\delta(x) = \frac{dH(x)}{dx} \quad [126]$$

Para obtener la representación integral de la δ -Dirac procederemos como sigue (Arfken, 1970) utilizando la relación básica [120] y la tercera sucesión δ_n de [118]:

$$y(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} y(x') \delta_n(x - x') \cdot dx' = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} y(x') \cdot \frac{\text{sen } n(x - x')}{\pi(x - x')} \cdot dx'$$

donde $y(x')$ es continua en $x' = x$. Recordando que

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-n}^n e^{ik(x-x')} dk = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{1}{i(x-x')} e^{ik(x-x')} \Big|_{-n}^n = \frac{\text{sen } n(x-x')}{\pi(x-x')} \quad [127]$$

Se tiene así

$$\begin{aligned} y(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} y(x') \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-n}^n e^{ik(x-x')} \cdot dk dx' = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \cdot y(x') \cdot \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-n}^n e^{ik(x-x')} \cdot dk \end{aligned} \quad [128]$$

encontrándose entonces:

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')} \cdot dk \quad [129]$$

En el caso de que dentro de la δ -Dirac la variable sea a su vez una función de la variable x , $\delta(f(x))$, la transformación a esta variable natural es sencilla y en muchos casos puede deducirse por simple inspección (por ejemplo la quinta propiedad de [122]). Exigiremos que $f(x)$ sea una función *monótona* en su dominio de definición, siendo esta propiedad la que siempre se exige para los cambios de variable admisibles en integración convencional. La ecuación de transformación es análoga a la de los mencionados cambios de variable:

$$\delta(f(x)) = \left| \frac{df}{dx} \right|^{-1} \delta(x-x_0) \quad ; \quad f(x_0) = 0 \quad [130]$$

cuya demostración puede encontrarse en (Hoskins, 1979). En los Temas 6 y 7 veremos algunas aplicaciones significativas de esta curiosa relación.

La generalización de la δ -Dirac a tres dimensiones es inmediata. Así, sujeta la *singularidad o fuente* en \mathbf{r}' , se escribirá:

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \delta(x-x') \delta(y-y') \delta(z-z') \quad [131]$$

y la normalización en coordenadas cartesianas y en coordenadas polares esféricas es:

$$\int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta \mathbf{r} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z') dx dy dz =$$

$$= \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi = 1 \quad [132]$$

Claramente $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ y aplicando [130] se llega a

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{r^2} \delta(r - r') \cdot \delta(\cos \theta - \cos \theta') \cdot \delta(\phi - \phi') \quad [133]$$

un resultado que es fácilmente generalizable a otros sistemas de coordenadas curvilíneas. La normalización se escribe ahora:

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{r^2} \delta(r - r') r^2 dr \int_0^{2\pi} \delta(\phi - \phi') d\phi \int_{-1}^1 \delta(\cos \theta - \cos \theta') \cdot d(\cos \theta) = 1 \quad [134]$$

lo que implica:

$$\int_0^{\infty} \delta(r - r') dr = 1$$

$$\int_0^{2\pi} \delta(\phi - \phi') d\phi = 1$$

$$\int_{-1}^1 \delta(\cos \theta - \cos \theta') d(\cos \theta) = 1 \quad [135]$$

Finalmente, la representación integral se expresa:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \cdot d\mathbf{k} \quad [136]$$

que no es sino la transformada de Fourier de la función unidad.

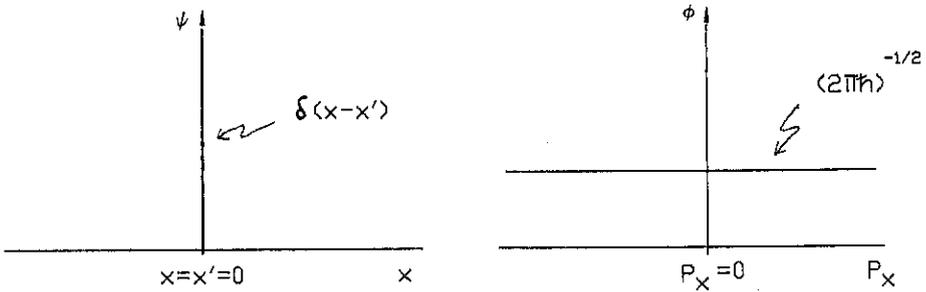


Figura 4.—Visualización del principio de incertidumbre.

6. EJEMPLO DE APLICACION: VISUALIZACION DEL PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

En su formulación más popular el principio de incertidumbre para el par de variables conjugadas posición-momento reza:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar \quad [137]$$

relación que nos expresa la imposibilidad de conocer simultáneamente y con toda precisión los valores de x y p_x de una partícula.

Designemos por $\psi(x)$ y $\phi(p_x)$ a las funciones de onda de la partícula monodimensional en las representaciones de posición y momento respectivamente. La relación que liga a ambos conjuntos de funciones (Galindo y Pascual, 1978) es:

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \phi(p_x) e^{ix \cdot p_x/\hbar} \cdot dp_x \quad [138]$$

$$\phi(p_x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \psi(x) e^{-ix \cdot p_x/\hbar} \cdot dx \quad [139]$$

constituyendo $\psi(x)$ y $\phi(p_x)$ un par de transformadas de Fourier.

Supongamos que se conociera con toda precisión la posición $x = x'$ de la partícula. Esto implicaría un error en la posición nulo y una función de onda tipo δ -Dirac:

$$\Delta x = 0 \quad ; \quad \psi(x) = \delta(x - x') \quad [140]$$

Podemos preguntarnos por el momento de la partícula utilizando las relaciones anteriores. Sin pérdida de generalidad supondremos $x' = 0$, resultando:

$$\phi(p_x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) e^{-ix \cdot p_x/\hbar} \cdot dx \quad [141]$$

La «función» $\delta(x)$ es «par» en el sentido:

$$\delta(x) = \delta(-x) \quad [142]$$

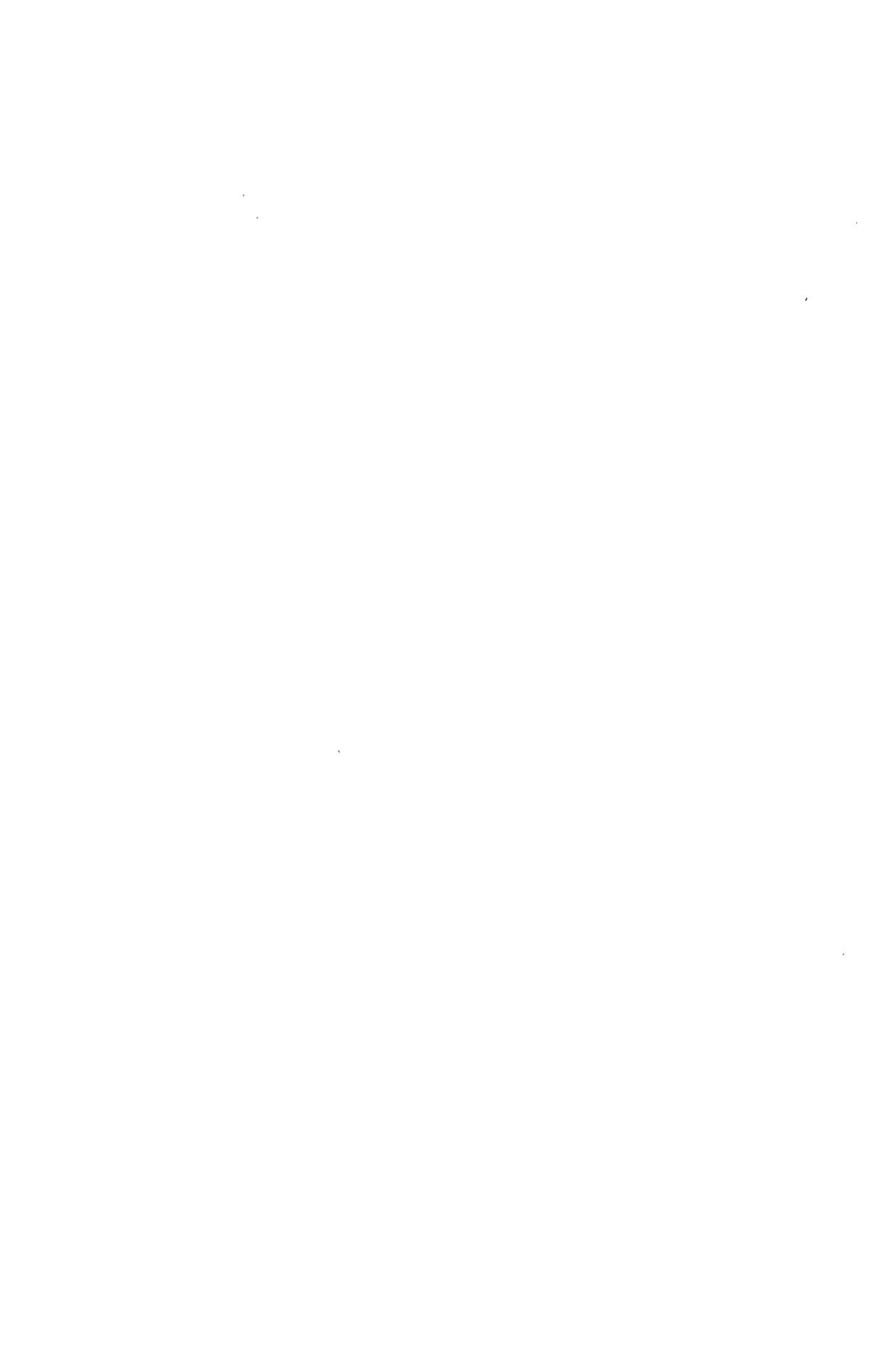
y la ecuación [141] admite el desarrollo:

$$\phi(p_x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \cdot \cos \frac{x \cdot p_x}{\hbar} dx - i \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \cdot \sen \frac{x \cdot p_x}{\hbar} \cdot dx \right] \quad [143]$$

que por simetría se reduce a:

$$\phi(p_x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \cdot \cos \frac{x \cdot p_x}{\hbar} dx = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \quad [144]$$

es decir, $\phi(p_x)$ es una función constante. Este resultado está en completo acuerdo con el principio de incertidumbre (Fig. 4) que nos indica un desconocimiento total del p_x de la partícula, ya que de [144] se concluye la equiprobabilidad de todos los posibles momentos p_x ($\Delta p_x = \infty$).



Bibliografía

1. APOSTOL, T. M., *Análisis Matemático*, Reverté, Barcelona, 1972, capítulos 7, 13 y 15.
2. ARPKEN, G., *Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press, Nueva York, 1970, capítulos 8 y 14.
3. BALESCU, R., *Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics*, Wiley, New York, 1975, capítulo 13.
4. BERBERIAN, S. K., *Introducción al Espacio de Hilbert*, Teide, Barcelona, 1977, capítulo 2.
5. BRILLOUIN, L., *Science and Information Theory*, Academic Press, Nueva York, 1962, capítulo 8.
6. COURANT, R., y HILBERT, D., *Methods of Mathematical Physics*, Vol. 1, Interscience Publishers, Nueva York, 1963, capítulo 2.
7. DIRAC, P. A. M., *The Principles of Quantum Mechanics*, 4.ª edición (1.ª edición, 1930), Clarendon, Oxford, 1958, capítulo 3.
8. GALINDO, A., y PASCUAL, P., *Mecánica Cuántica*, Alhambra, Madrid, 1978, capítulo 3 y apéndice A.
9. HIRSCHFELDER, J. O.; CURTISS, C. F., y BIRD, R. B., *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, New York, 1954, capítulo 7.
10. HOSKINS, R. F., *Generalised functions*, Ellis Horwood, Chichester, 1979.
11. LEVINE, I. N., *Química Cuántica*, AC, Madrid, 1977.
12. RALSTON, A., *Introducción al Análisis Numérico*, Limusa, México, 1970, capítulos 6 y 7.
13. SCHEID, F., *Análisis Numérico*, McGraw-Hill, México, 1972, capítulos 21 y 24.
14. SCHIFF, L., *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, Nueva York, 1981, capítulos 3 y 4.
15. SCHWARTZ, A. H., *Métodos Matemáticos para las Ciencias Físicas*, Selecciones Científicas, Madrid, 1969, capítulos 4 y 5.
16. STROUD, A. H., *Numerical Quadrature and Solution of Ordinary Differential Equations*, Springer-Verlag, Nueva York, 1974, capítulo 3.



EJERCICIOS DE AUTOCOMPROBACION

1. a) Obtener el sistema normal de ecuaciones ($\omega(x) = 1$) para la recta de mínimos cuadrados y la parábola de mínimos cuadrados que representen a la tabla $\{(x_k, y_k)\}_{k=0, N}$. Lo mismo para el plano de mínimos cuadrados que represente la tabla $\{(x_k, y_k, z_k)\}_{k=0, N}$.

b) Los valores inversos de la longitud de onda $1/\lambda$ de la transición electrónica $\pi \rightarrow \pi^*$ entre el último orbital molecular ocupado y el primer orbital molecular virtual, para cadenas carbonadas iónicas con k eslabones internos del tipo $(-CH = CH)_k-$, guardan una relación directa con el parámetro k . El modelo teórico semiempírico FEMO (*free electron molecular orbital*) suministra la tabla siguiente redondeada a unidades (Levine, 1977):

k	0	1	2	3	4	5	6
$1/\lambda(\text{cm}^{-1})$	48437	30139	21797	17050	13993	11862	10293

que responde a la expresión:

$$\frac{1}{\lambda} = b \frac{2k + n}{(2k + 4)^2}$$

Determinar los parámetros b y n por mínimos cuadrados.

2. En algunos lugares los polinomios de Gram-Tchebycheff aparecen como:

$$\phi_m^*(k, N) = \sum_{i=0}^m (-1)^{i+m} \cdot \frac{(i+m)^{(2i)}}{(i!)^2} \cdot \frac{k^{(i)}}{N^{(i)}} \quad ; \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

Establecer la relación entre ellos y los polinomios dados en [25].

3. Ortogonalizar el conjunto de funciones $(1, x, x^2, \dots)$ en $-1 \leq x \leq 1$, de acuerdo al producto escalar usual con $\omega(x) = 1$:

$$(x^j, x^k) = \int_{-1}^1 x^j \cdot x^k dx$$

y siguiendo el método de Gram-Schmidt que esquematizamos a continuación. Determinados $n - 1$ polinomios ortogonales (no normalizados) $\bar{P}_0, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_{n-1}$, el polinomio de grado n se calcula como:

$$\bar{P}_n(x) = x^n - \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(\bar{P}_m, x^n)}{(\bar{P}_m, \bar{P}_m)} \cdot \bar{P}_m$$

Identificar el conjunto de funciones así obtenidas.

4. Unos polinomios ortogonales muy útiles en las técnicas de aproximación de *error mínimo-máximo* (Ralston, 1970) son los de *Tchebycheff* (hay tres subfamilias, de primera, segunda y tercera especie). Los más conocidos son los de primera especie $T_n(x)$ (funciones ultraesféricas), que están definidos en $-1 \leq x \leq 1$ con $\omega(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$. Una definición constructiva de ellos es:

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x) \quad ; \quad -1 \leq x \leq 1$$

- Calcular los cuatro primeros $T_n(x)$.
- Plantear la relación de ortonormalidad que deben verificar.
- Demostrar:

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

- d) Determinar las n raíces de $T_n(x)$.
- e) Aproximar la función $y(x) = x^{1/3}$ en $0 \leq x \leq 1$ mediante una combinación lineal de los cuatro primeros $T_n(x)$.
5. a) Normalizar los cuatro primeros polinomios de Legendre.
- b) Demostrar la propiedad $[46]P_n(1) = 1$.
6. Obtener los cuatro primeros polinomios de Laguerre normalizados.
7. Los polinomios ortogonales de *Sonine* se definen:

$$S_k^n(x) = \sum_{j=0}^n (-1)^j \frac{(n+k)!}{(k+j)! (n-j)! j!} x^j ; \quad 0 \leq x < +\infty$$

siendo n el grado del polinomio. La relación de ortogonalidad que cumplen, con función de peso $\omega_k(x) = x^k e^{-x}$, es:

$$\int_0^{\infty} dx x^k e^{-x} S_k^n(x) S_k^{n'}(x) = \frac{(n+k)!}{n!} \delta_{nn'}$$

Escribir los dos primeros polinomios S_k^0 y S_k^1 , comprobar su ortogonalidad y normalizarlos.

8. Obtener los cuatro primeros polinomios de Hermite normalizados.
9. a) Deducir la forma de la serie de Fourier engendrada por una función alternada $y(x)$:

$$y(x + \pi) = -y(x)$$

de período 2π .

b) Aplicando el criterio de mínimos cuadrados, obtener la mejor aproximación a una función $y(x)$, periódica 2π y continua, en la forma:

$$y(x) \simeq \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{n_0} \{a_n \cos nx + b_n \operatorname{sen} nx\} \quad ; \quad n_0 = \text{finito}$$

c) Desarrollar en serie de Fourier $y(x) = x^2$ definida periódica en $0 \leq x \leq 2\pi$.

d) Aprovechando el resultado previo calcular la suma de las series numéricas:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n/n^2 \quad ; \quad \sum_{n=1}^{\infty} 1/n^2$$

10. En la teoría de la dispersión de la luz (*light scattering*) por una muestra de partículas esféricas (sin estructura) aparece la transformada de Fourier de la función de correlación $g(r)$ en la forma:

$$H(\mathbf{k}) = \iiint_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} (g(r) - 1) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$

en donde el punto representa el producto escalar de vectores. Dar una expresión que dependa de los módulos $|\mathbf{k}| = k$, $|\mathbf{r}| = r$, para el factor de estructura de la muestra: $S(\mathbf{k}) = 1 + nH(\mathbf{k})$, donde n es la densidad en número N/V .

11. a) Desarrollar la δ -Dirac $\delta(x)$ en serie de polinomios de Legendre en el intervalo $-1 \leq x \leq 1$.
- b) Obtener la cuarta igualdad de las relaciones [122] vía integración formal por partes de la propiedad básica [117] involucrando a una función $y(x)$ continua y diferenciable.

SOLUCIONES A LOS EJERCICIOS DE AUTOCOMPROBACION

1. a) Los sistemas normales pedidos son:

— para la recta de mínimos cuadrados $y = ax + b$

$$\begin{cases} \sum_k y_k = b(N + 1) + a \sum_k x_k \\ \sum_k x_k \cdot y_k = b \sum_k x_k + a \sum_k x_k^2 \end{cases}$$

— para la parábola de mínimos cuadrados $y = ax^2 + bx + c$

$$\sum_k y_k = c(N + 1) + b \sum_k x_k + a \sum_k x_k^2$$

$$\sum_k x_k y_k = c \sum_k x_k + b \sum_k x_k^2 + a \sum_k x_k^3$$

$$\sum_k x_k^2 y_k = c \sum_k x_k^2 + b \sum_k x_k^3 + a \sum_k x_k^4$$

— para el plano de mínimos cuadrados $z = a + bx + cy$

$$\sum_k z_k = a(N + 1) + b \sum_k x_k + c \sum_k y_k$$

$$\sum_k z_k \cdot x_k = a \sum_k x_k + b \sum_k x_k^2 + c \sum_k x_k \cdot y_k$$

$$\sum_k z_k \cdot y_k = a \sum_k y_k + b \sum_k x_k \cdot y_k + c \sum_k y_k^2$$

b) Reescribamos la relación FEMO como:

$$y = b \frac{z + a}{z^2} = B x + A x^2$$

en donde se han hecho las sustituciones siguientes:

$$y = 1/\lambda ; n = 4 + a ; z = 2k + 4 ; x = 1/z ; B = b ; A = ab$$

Resulta así una parábola sin término independiente que lleva aparejado el sistema normal:

$$\begin{aligned} \sum_k x_k \cdot y_k &= B \sum_k x_k^2 + A \sum_k x_k^3 \\ \sum_k x_k^2 y_k &= B \sum_k x_k^3 + A \sum_k x_k^4 \end{aligned}$$

y la nueva tabla a utilizar es:

x	1/4	1/6	1/8	1/10	1/12	1/14	1/16
y	48437	30139	21797	17050	13993	11862	10293

El sistema da las soluciones:

$$A \simeq 154968,875 ; B \simeq 155005,3908$$

de donde los parámetros buscados resultan:

$$a = 0.9998 ; b = 155005 \text{ cm}^{-1} ; n = 4,9998 \simeq 5$$

Los valores FEMO exactos son (Levine, 1977):

$$a_e = 1 ; b_e = 155000 \text{ cm}^{-1} ; n_e = 5$$

Los errores de redondeo en los datos de entrada son los causantes de las ligeras discrepancias entre los valores exactos y calculados.

2. Por comparación entre la expresión de Gram-Tchebycheff [25]:

$$\phi_m(k, N) = \sum_{i=0}^m (-1)^i \binom{m}{i} \binom{m+i}{i} \frac{k^{(i)}}{N^{(i)}}$$

y la del enunciado:

$$\phi_m^*(k, N) = \sum_{i=0}^m (-1)^{i+m} \cdot \frac{(i+m)^{(2i)}}{(i!)^2} \cdot \frac{k^{(i)}}{N^{(i)}}$$

para establecer su relación deberemos resolver dos detalles, la identidad:

$$\binom{m}{i} \binom{m+i}{i} = \frac{(i+m)^{(2i)}}{(i!)^2}$$

y la alternancia de signos $(-1)^i$, $(-1)^{i+m}$.

El primer punto es sencillo notando la relación trivial entre polinomios factoriales:

$$h^{(m)}(h-n)^{(l)} = h^{(n+l)}$$

que nos conduce a:

$$\binom{m}{i} \binom{m+i}{i} = \frac{m^{(i)}}{i!} \cdot \frac{(m+i)^{(i)}}{i!} = \{m+i=h\} = \frac{(m+i)^{(2i)}}{(i!)^2}$$

Por lo que respecta al segundo punto, notemos que los polinomios ϕ_m^* de grado m par son idénticos a los ϕ_m pares. Claramente, si $m = \text{par}$ $(-1)^i = (-1)^{i+m}$ para cualquier i . Por el contrario, si $m = \text{impar}$ encontramos $(-1)^i = -(-1)^{i+m}$ y, por consiguiente, $\phi_{m=\text{impar}}^* = -\phi_{m=\text{impar}}$. Resumiendo:

$$\phi_m = (-1)^m \phi_m^* \quad ; \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

Las bases $\{\phi_m\}$ y $\{\phi_m^*\}$ no son idénticas, pero esto no supone diferencia alguna entre ellas en lo que se refiere a su utilidad. Ambas son *equivalentes* del mismo modo que en el espacio vectorial \mathbb{R}^3 (sobre \mathbb{R} , etc.) son equivalentes las bases $\{(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)\}$ y $\{(1, 0, 0), (0, -1, 0), (0, 0, 1)\}$, u otras posibles.

3. El proceso constructivo de Gram-Schmidt puede comenzar, por ejemplo, eligiendo $\bar{P}_0 = 1$ y ortogonalizando x a \bar{P}_0 . Para ello restaremos a x aquella contribución que la hace no ortogonal a 1 (similar a lo que se haría en \mathbb{R}^n):

$$\bar{P}_1 = x - \frac{(\bar{P}_0, x)}{(\bar{P}_0, \bar{P}_0)} \cdot \bar{P}_0 = x$$

A continuación se ortogonaliza x^2 a \bar{P}_0 y \bar{P}_1 :

$$\bar{P}_2 = x^2 - \frac{(\bar{P}_0, x^2)}{(\bar{P}_0, \bar{P}_0)} \cdot \bar{P}_0 - \frac{(\bar{P}_1, x^2)}{(\bar{P}_1, \bar{P}_1)} \cdot \bar{P}_1 = x^2 - 1/3$$

y así sucesivamente. Por ejemplo, \bar{P}_3 resulta:

$$\bar{P}_3 = x^3 - \frac{(\bar{P}_0, x^3)}{(\bar{P}_0, \bar{P}_0)} \cdot \bar{P}_0 - \frac{(\bar{P}_1, x^3)}{(\bar{P}_1, \bar{P}_1)} \cdot \bar{P}_1 - \frac{(\bar{P}_2, x^3)}{(\bar{P}_2, \bar{P}_2)} \cdot \bar{P}_2 = x^3 - 3x/5$$

La familia de polinomios así obtenida ya ha sido encontrada anteriormente. Se trata de los *polinomios de Legendre* no normalizados que vimos al tratar la integración gaussiana. La normalización de estas funciones es trivial empleando [31]-[32] (Ejercicio 5).

4. a) Haciendo $a = \arccos x$ ($x = \cos a$) los cuatro primeros $T_n(x)$ son:

$$T_0(x) = \cos 0 = 1$$

$$T_1(x) = \cos(\arccos x) = x$$

$$T_2(x) = \cos(2 \arccos x) = \cos 2a = \cos^2 a - \sin^2 a = 2x^2 - 1$$

$$\begin{aligned} T_3(x) &= \cos(3 \arccos x) = \cos 3a = \\ &= \cos 2a \cdot \cos a - 2 \sin^2 a \cdot \cos a = 4x^3 - 3x \end{aligned}$$

b) La ortonormalidad es:

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^{-1/2} T_n(x) \cdot T_m(x) dx = \{x = \cos a \ ; \ dx = -\sin a da\} =$$

$$= \int_0^\pi \cos na \cdot \cos ma \cdot da = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ \pi & m = n = 0 \\ \pi/2 & m = n \neq 0 \end{cases}$$

en donde es de notar el diferente trato que recibe $T_0(x)$ en cuanto a su normalización:

$$N_0 = \pi^{-1/2} ; N_{n \neq 0} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$$

c) Por trigonometría elemental escribimos:

$$\begin{aligned} T_{n+1}(x) &= \cos [(n+1)a] = 2 \cos a \cdot \cos na - \cos [(n-1)a] = \\ &= 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \end{aligned}$$

d) Las n raíces de $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$ surgen de:

$$\cos(n \arccos x) = 0 \Rightarrow n \arccos x = \frac{\pi}{2} + k\pi ; k = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

o lo que es lo mismo:

$$x_k = \cos \left[\frac{\pi}{n} \left(k + \frac{1}{2} \right) \right] ; k = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

siendo evidente que $-1 < x_k < 1$ y que los x_k son distintos entre sí.

e) Como debemos aproximar $y(x) = x^{1/3}$ en $0 \leq x \leq 1$ con polinomios $T_n(x)$ definidos en $0 \leq x \leq 1$, comenzaremos transformando $x \rightarrow t$ de modo que $0 \leq x \leq 1 \rightarrow -1 \leq t \leq 1$. El cambio es inmediato $x = (t+1)/2$ y la nueva función a aproximar es:

$$y(t) = \left(\frac{1+t}{2} \right)^{1/3} ; -1 \leq t \leq 1$$

El desarrollo de $y(t)$ en función de $T_n(t)$ queda:

$$y(t) \simeq \sum_{m=0}^3 a_m T_m(t) = \sum_{m=0}^3 \left[\frac{\int_{-1}^1 y(t) T_m(t) (1-t^2)^{-1/2} dt}{\int_{-1}^1 T_m^2(t) (1-t^2)^{-1/2} dt} \right] T_m(t)$$

en donde las integrales del numerador resultan un tanto complicadas.

Veamos cómo soslayar su cálculo por medio de un proceso alternativo, no completamente equivalente al anterior, conocido como *economización* de polinomios. Este proceso se basa en que así como $T_n(t)$ es una combinación de potencias de t , éstas son a su vez combinaciones de polinomios $T_n(t)$. A partir de a) es simple calcular:

$$1 = T_0(t)$$

$$t = T_1(t)$$

$$t^2 = \frac{1}{2}(T_0(t) + T_2(t))$$

$$t^3 = \frac{1}{4}(3T_1(t) + T_3(t))$$

Necesitamos ahora expresar $y(t)$ como una serie de potencias de t , lo que haremos con la serie de Taylor desarrollando en torno a $t = 0$ (¡atención a la convergencia!):

$$y(t) = 2^{-1/3}(1+t)^{1/3} = 2^{-1/3} \left[1 + \frac{1}{3}t - \frac{2}{3 \cdot 6}t^2 + \frac{2 \cdot 5}{3 \cdot 6 \cdot 9}t^3 - \dots \right]$$

desarrollo válido únicamente en $-1 < t \leq 1$. Queda excluido $t = -1$ y se le deberá dar un tratamiento aparte. Truncando la serie en el término cúbico y asumiendo $y(t = -1) = 0$ escribimos:

$$y(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t = -1 \\ 2^{-1/3} \left[\frac{17}{18} T_0 + \frac{41}{108} T_1 - \frac{1}{18} T_2 + \frac{5}{324} T_3 \right] & ; \quad -1 < t \leq 1 \end{cases}$$

en donde hemos usado las expresiones de economización anteriores.

Si deseáramos expresar y en función de x , $y(x)$, habría que deshacer el cambio, $t = 2x - 1$, transformando $T_n(t) = T_n(2x - 1)$. Los coeficientes del desarrollo anterior no son exactamente iguales a los que se obtendrían con el cálculo riguroso de las integrales, pero la calidad de la aproximación por economización es comparable a aquella. El error en estas aproximaciones suele ser del orden del primer término despreciado (en nuestro caso T_4).

5. a) Por aplicación de [31]-[32]:

$$P_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$P_1(x) = \sqrt{\frac{3}{2}}x$$

$$P_2(x) = \sqrt{\frac{5}{2}}\left(\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}\right)$$

$$P_3(x) = \sqrt{\frac{7}{2}}\left(\frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x\right)$$

b) Para demostrar $P_n(1) = 1$ para todo n recurriremos a la función generatriz [41]. Haciendo $x = 1$ y recordando que $|t| < 1$:

$$|(1 + t^2 - 2xt)^{-1/2}|_{x=1} = (1 - t)^{-1}$$

Desarrollando en serie de Taylor en torno a $t = 0$ es inmediato establecer:

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(1) \cdot t^n = \frac{1}{1 - t} = \sum_{n=0}^{\infty} t^n$$

de donde es claro que $P_n(1) = 1$ para todo n .

6. Las expresiones pedidas son:

$$L_0(x) = 1$$

$$L_1(x) = 1 - x$$

$$L_2(x) = \frac{1}{2}(2 - 4x + x^2)$$

$$L_3(x) = \frac{1}{6}(6 - 18x + 9x^2 - x^3)$$

7. Utilizando la definición se obtiene sin dificultad:

$$S_k^0(x) = 1$$

$$S_k^1(x) = k + 1 - x$$

expresiones idénticas a las de los polinomios asociados de Laguerre $L_n^k(x)$ (nótese el cambio de orden en los índices k y n). La relación de ortogonalidad con la función de peso correspondiente se verifica con facilidad:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty x^k e^{-x} (k+1-x) dx &= (k+1) \int_0^\infty x^k \cdot e^{-x} \cdot dx - \int_0^\infty x^{k+1} e^{-x} \cdot dx = \\ &= (k+1) \int_0^\infty x^k e^{-x} \cdot dx - \left[-e^{-x} x^{k+1} \Big|_0^\infty + (k+1) \int_0^\infty x^k e^{-x} \cdot dx \right] = 0 \end{aligned}$$

La normalización la expresaremos:

$$\int_0^\infty x^k e^{-x} S_k^n(x) S_k^n(x) \cdot dx = \frac{(n+k)!}{n!}$$

con lo que la constante de normalización para $S_k^n(x)$ es

$$N_k^n = \left(\frac{n!}{(n+k)!} \right)^{1/2}$$

Los dos polinomios normalizados son, pues:

$$S_k^0(x) = (k!)^{-1/2}$$

$$S_k^1(x) = \left[(k+1)! \right]^{-1/2} (k+1-x)$$

8. Aplicando la relación de ortonormalidad [74] para $n = m$ se calcula la constante de normalización de los polinomios de Hermite:

$$N_n = \left[\frac{1}{\pi^{1/2} \cdot 2^n \cdot n!} \right]^{1/2} ; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

siendo entonces los cuatro primeros:

$$H_0(\xi) = \pi^{-1/4}$$

$$H_1(\xi) = \left(\frac{2}{\pi^{1/2}} \right)^{1/2} \xi$$

$$H_2(\xi) = \left(\frac{1}{2\pi^{1/2}} \right)^{1/2} (2\xi^2 - 1)$$

$$H_3(\xi) = \left(\frac{1}{3\pi^{1/2}} \right)^{1/2} (2\xi^3 - 3\xi)$$

9. a) Una función alternada $y(x) = -y(x + \pi)$, definida periódica en un intervalo $0 \leq x \leq 2\pi$, tiene un desarrollo en serie de Fourier simplificado a términos impares:

$$y(x) = a_1 \cos x + b_1 \operatorname{sen} x + a_3 \cos 3x + b_3 \operatorname{sen} 3x + \dots$$

como se comprueba rápidamente cambiando a $-\pi \leq x \leq \pi$ y descomponiendo las integrales que surgen en:

$$\int_{-\pi}^{\pi} = \int_{-\pi}^0 + \int_0^{\pi}$$

Argumentos relativos al signo de las funciones seno y coseno en esos semiintervalos conducen a la serie escrita arriba.

- b) Sea la aproximación trigonométrica finita a $y(x)$:

$$y(x) \simeq \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{n_0} [a_n \cos nx + b_n \operatorname{sen} nx]$$

El criterio de mínimos cuadrados es:

$$I = \left[\int_0^{2\pi} \left(y(x) - \left\{ \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{n_0} [a_n \cos nx + b_n \operatorname{sen} nx] \right\} \right)^2 dx \right] = \text{mínimo}$$

en donde deberán optimizarse los coeficientes a y b . Por derivación parcial establecemos las ecuaciones:

$$\frac{\partial I}{\partial a_m} = 0 \Rightarrow \int_0^{2\pi} y(x) \cdot \cos mx \cdot dx = \frac{a_0}{2} \int_0^{2\pi} \cos mx \, dx +$$

$$+ \sum_{n=1}^{n_0} \left[a_n \int_0^{2\pi} \cos nx \cdot \cos mx \cdot dx + b_n \int_0^{2\pi} \operatorname{sen} nx \cdot \cos mx \cdot dx \right]$$

$$\frac{\partial I}{\partial b_m} = 0 \Rightarrow \int_0^{2\pi} y(x) \cdot \operatorname{sen} mx \cdot dx = \frac{a_0}{2} \int_0^{2\pi} \operatorname{sen} mx \, dx +$$

$$+ \sum_{n=1}^{n_0} \left[a_n \int_0^{2\pi} \cos nx \cdot \operatorname{sen} mx \cdot dx + b_n \int_0^{2\pi} \operatorname{sen} nx \cdot \operatorname{sen} mx \cdot dx \right]$$

que por aplicación de las relaciones de ortogonalidad [78] nos llevan a:

$$\frac{a_0}{2} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} y(x) \, dx$$

$$a_{m \neq 0} = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} y(x) \cdot \cos mx \cdot dx$$

$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} y(x) \cdot \operatorname{sen} mx \cdot dx$$

c) Notemos primeramente que x^2 es continua y monótona creciente en $0 \leq x \leq 2\pi$. No es además una función que admita un desarrollo simplificado. Por tanto, deberemos calcular todos los a_m y b_m de:

$$y(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos nx + b_n \operatorname{sen} nx] = x^2$$

El primer término es:

$$\frac{a_0}{2} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} x^2 dx = 4\pi^2/3$$

Los coeficientes de los cosenos, integrando por partes, son:

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} x^2 \cdot \cos nx \cdot dx = \\ &= \frac{1}{\pi} \left[x^2 \frac{\sin nx}{n} + 2x \frac{\cos nx}{n^2} - 2 \frac{\sin nx}{n^3} \right]_0^{2\pi} = \frac{4}{n^2} \end{aligned}$$

Análogamente:

$$\begin{aligned} b_n &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} x^2 \cdot \sin nx \cdot dx = \\ &= \frac{1}{\pi} \left[-x^2 \frac{\cos nx}{n} + 2x \frac{\sin nx}{n^2} + 2 \frac{\cos nx}{n^3} \right]_0^{2\pi} = -\frac{4\pi}{n} \end{aligned}$$

La serie es entonces:

$$y(x) = \frac{4\pi^2}{3} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{4}{n^2} \cdot \cos nx - \frac{4\pi}{n} \cdot \sin nx \right]$$

d) Como en el punto $x = \pi$ la función $y(x)$ es continua (sólo hay discontinuidad en $x = \dots, -2\pi, 0, 2\pi, \dots$) la suma de la serie coincidirá con $y(x = \pi) = \pi^2$. Si sustituimos en ese desarrollo $x = \pi$, obtenemos:

$$\pi^2 = \frac{4\pi^2}{3} + 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2}$$

y la suma de la serie pedida resulta:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2} = -\frac{\pi^2}{12}$$

Para calcular la suma de $\sum (1/n^2)$ deberemos emplear $x = 0$. Sin embargo, éste es un punto de discontinuidad y el valor de la serie en él es la semisuma de los valores $y(0+)$ e $y(0-) = y(2\pi-)$. Entonces, sustituyendo $x = 0$ en la serie de Fourier hallamos:

$$\frac{1}{2} [y(0+) + y(2\pi-)] = \frac{4\pi^2}{3} + 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2}$$

$$2\pi^2 = \frac{4\pi^2}{3} + 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2}$$

y en consecuencia:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}$$

10. Sea $h(r) = g(r) - 1$. Escribamos $H(\mathbf{k})$ en coordenadas polares esféricas y resolvamos la integral de Fourier triple resultante:

$$\begin{aligned} H(\mathbf{k}) &= \int d\mathbf{r} \cdot h(r) \cdot \exp[-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] = \{ \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = k r \cdot \cos \theta \} = \\ &= \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} dr \cdot d\theta \cdot d\phi \cdot r^2 \cdot \text{sen } \theta \cdot \exp[-i \cdot k r \cdot \cos \theta] \cdot h(r) = \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} dr \cdot r^2 h(r) \int_0^{\pi} \text{sen } \theta \cdot \exp[-i k r \cdot \cos \theta] d\theta = \{ u = \cos \theta \} = \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} dr \cdot r^2 h(r) \int_{-1}^1 \exp[-i k r u] du = 2\pi \int_0^{\infty} dr \cdot r^2 h(r) \left\{ -\frac{e^{-ikr} - e^{ikr}}{ikr} \right\} = \\ &= \{ e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \text{sen } \alpha \} = 4\pi \int_0^{\infty} dr \cdot r^2 \cdot h(r) \cdot \frac{\text{sen } kr}{kr} \end{aligned}$$

Sustituyendo en la expresión del factor de estructura se obtiene finalmente:

$$S(k) = 1 + 4\pi n \int_0^{\infty} dr \cdot r^2 h(r) \cdot \frac{\text{sen } kr}{kr}$$

Nótese que la función a integrar es oscilante.

11. a) El problema consiste en determinar la forma del operador $\delta(x)$ en la base de los polinomios de Legendre. El resultado final será, pues, un operador equivalente al original. Para ello utilizaremos la expresión formal para el desarrollo de una función arbitraria [49]:

$$y(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 y(t) \cdot P_m(t) \cdot dt \right] \cdot P_m(x)$$

Dada la «paridad» de $\delta(x)$ es fácil anticipar que en su desarrollo sólo intervendrán polinomios de Legendre de grado par:

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{2} \left(\int_{-1}^1 \delta(t) \cdot P_m(t) dt \right) \cdot P_m(x) = \\ &= \sum_{m=0, 2, 4, \dots}^{\infty} \frac{2m+1}{2} \left(\int_{-1}^1 \delta(t) \cdot P_m(t) \cdot dt \right) \cdot P_m(x) \end{aligned}$$

y utilizando la propiedad básica de $\delta(t) = \delta(t-0)$ se obtiene:

$$\delta(x) = \sum_{m=0, 2, 4, \dots}^{\infty} \frac{2m+1}{2} P_m(0) P_m(x) = \sum_{n=0, 1, 2, \dots}^{\infty} \frac{4n+1}{2} P_{2n}(0) P_{2n}(x)$$

Para calcular los valores $P_{2n}(0)$ se procede como en el Ejercicio 5 cuando se calculó $P_n(1)$. Haremos entonces $x=0$ en la función generatriz [40]-[41] de donde:

$$\begin{aligned} (1 - 2xt + t^2)^{-1/2} &= (1 + t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2n-1)}{2^n \cdot n!} t^{2n} = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} P_{2n}(0) \cdot t^{2n} \end{aligned}$$

(nótese que $P_{2n+1}(0) = 0$).

El desarrollo queda utilizando la notación *doble factorial*:

$$\delta(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4n+1}{2} (-1)^n \cdot \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} \cdot P_{2n}(x)$$

y su utilidad queda restringida al intervalo $-1 \leq x \leq 1$.

b) Realizando integración por partes se obtiene sin dificultad:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} y(x) \cdot x \cdot \delta_n'(x) \cdot dx &= \int_{-\infty}^{\infty} y(x) \cdot x \cdot \delta'(x) \cdot dx = \\ &= x \delta(x) y(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \cdot [y(x) + xy'(x)] dx = \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) y(x) dx - \int_{-\infty}^{\infty} x y'(x) \delta(x) dx = - \int_{-\infty}^{\infty} y(x) \delta(x) \cdot dx \end{aligned}$$

de donde la identificación operacional buscada se sigue inmediatamente. En las manipulaciones anteriores se ha hecho uso de la (más fuerte) nulidad de $\delta(x)$ en $\pm\infty$, así como de la (trivial) relación tercera de [122].