

MONOGRAFÍAS
DE LA
**ACADEMIA
DE
CIENCIAS**

Exactas
Físicas
Químicas y
Naturales
DE
ZARAGOZA

**PREMIOS DE INVESTIGACIÓN CONCEDIDOS
POR LA ACADEMIA EN LAS SECCIONES
DE EXACTAS Y FÍSICAS
DURANTE EL PERIODO (1999-2000)**



N.º 17

Depósito legal: Z. 3.196 – 2000

Imprime:

Sdad. Coop. de Artes Gráficas
LIBRERÍA GENERAL
Pedro Cerbuna, 23
50009 Zaragoza

Sobre la evaluación numérica de polinomios ortogonales*

Roberto Barrio

GME, Depto. de Matemática Aplicada, Universidad de Zaragoza,
Edificio de Matemáticas, E-50009 Zaragoza, Spain.

*Premio de la Academia a la investigación (1999-2000)

Resumen

En el presente artículo se repasan e introducen algoritmos secuenciales y paralelos de evaluación de polinomios escritos como sumas finitas de polinomios ortogonales. Se presentan diversas pruebas numéricas y un análisis detallado de la estabilidad numérica de los mismos.

Palabras clave: polinomios ortogonales, evaluación polinomial,
algoritmos paralelos, estabilidad numérica.

Clasificación AMS: 33C45, 65G50, 65Y05, 65Y20.

1. Introducción

Una de las operaciones elementales más utilizadas en análisis numérico, y en matemáticas en general, es la evaluación de polinomios. Dicha evaluación normalmente se realiza como una parte dentro de algoritmos y métodos numéricos más amplios, pero no por ello deja de ser importante.

La forma más utilizada de escribir un polinomio es como potencias de la variable independiente x , es decir:

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i x^i,$$

o como potencias de $x - x_0$

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i (x - x_0)^i.$$

En estos dos casos se suele usar el algoritmo de Horner a la hora de evaluarlo.

Otra posible formulación de un polinomio consiste en escribirlo como una suma finita de polinomios ortogonales de una misma familia $\{\phi_i(x)\}$:

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i \phi_i(x). \tag{1}$$

Esta formulación aparece innumerables veces en diversos campos de las matemáticas y de la física; en la aproximación de funciones mediante polinomios ortogonales [22, 42, 45], evaluación de funciones especiales [3, 22, 34], integración numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias o retardadas mediante métodos de colocación [8, 13, 19, 20], integración numérica de ecuaciones en derivadas parciales mediante métodos de colocación [28], etc. Estos polinomios pueden ser evaluados mediante los algoritmos de Clenshaw [21] y de Forsythe [27], algoritmos implementados en toda librería científica que se precie, como IMSL y NAG.

Una vez se dispone de un algoritmo es importante realizar un análisis detallado de su estabilidad numérica, estableciendo cotas de error *backward* y *forward*. Estos análisis teóricos nos dirán cuándo podemos utilizar dichos algoritmos. En el caso del algoritmo de Horner existe un análisis detallado de su estabilidad numérica a la hora de implementarlo en un ordenador (ver los trabajos de Wilkinson [47], pionero en tales análisis). Sin embargo, para los algoritmos de Clenshaw y de Forsythe sólo existen análisis para ciertas familias de polinomios ortogonales [4, 23, 26, 29, 39, 40, 41, 43]. Por ello, a la hora de completar el problema de la evaluación polinomial resulta necesario realizar tales análisis y éste es uno de los problemas abordados en el presente trabajo (Sección 4).

Por otro lado, el uso de los ordenadores paralelos está creciendo actualmente entre la comunidad científica, permitiendo resolver problemas antes inabordables. Desde este punto de vista es interesante introducir nuevos algoritmos paralelos que permitan realizar en este tipo de ordenadores todas las operaciones realizadas en un ordenador secuencial. Una de estas operaciones es la evaluación de polinomios. Recientemente, dada su utilidad, han sido propuestos diversos algoritmos que generalizan el algoritmo de Horner a ordenadores paralelos [25, 33, 35, 37, 38] y hasta hace muy poco no se disponía de ningún algoritmo paralelo de evaluación de polinomios escritos como una suma finita de polinomios ortogonales [9, 16, 17]. Así, otro problema que estudiamos (Sección 3) es la evaluación paralela de tales polinomios.

Como ya se ha comentado anteriormente, una vez que se introduce un nuevo algoritmo es necesario su estudio teórico. En el caso de los algoritmos paralelos existen muy pocos estudios de su estabilidad numérica y, en general, dichos algoritmos suelen ser más inestables que los algoritmos secuenciales de los que proceden. Por ejemplo, en [31] se demuestra que los algoritmos paralelos de resolución de sistemas lineales triangulares puede ser mucho más inestables que la eliminación Gaussiana en secuencial. Pero esta situación no puede ser generalizada, ya que por ejemplo en [48, 49] se demuestra que los algoritmos paralelos de resolución de sistemas bidiagonales tienen un comportamiento análogo a los algoritmos secuenciales. Esta diversidad de situaciones nos plantea la duda razonable de

cómo es la estabilidad de los nuevos algoritmos de evaluación de polinomios, pregunta que se analiza en la Sección 5 del presente trabajo, donde se demuestra que la estabilidad de los algoritmos paralelos y secuenciales es similar y, por tanto, los nuevos algoritmos pueden ser utilizados sin demasiados problemas.

2. Algoritmos secuenciales

Una sucesión de polinomios ortogonales clásicos sobre la recta real $\{\phi_r(x)\}$ satisface [1, 36] la siguiente recurrencia lineal a tres términos:

$$\phi_r(x) = \alpha_r(x) \phi_{r-1}(x) + \beta_r \phi_{r-2}(x), \quad r \geq 2, \quad (2)$$

donde $\alpha_r(x)$ es una función lineal de x , β_r es una constante y $\phi_1(x) = \alpha_1(x)$ y $\phi_0(x) = 1$.

Existen diversos algoritmos diseñados para la evaluación de combinaciones lineales de tales polinomios, como el algoritmo de Clenshaw [21, 45] y el de Forsythe [27].

El algoritmo de Clenshaw [21, 45] se describe como:

ALGORITMO DE CLENSHAW (C)

Paso 1: Cálculo de los coeficientes $\{q_i\}$:

$$\begin{cases} q_{n+1}(x) = q_{n+2}(x) = 0, \\ q_r(x) = c_r + \alpha_{r+1}(x) q_{r+1}(x) + \beta_{r+2} q_{r+2}(x), \quad \text{para } r = n, \dots, 1. \end{cases} \quad (3)$$

Paso 2: Cálculo del valor del polinomio

$$\sum_{r=0}^n c_r \phi_r(x) = \{c_0 + \beta_2 q_2(x)\} \phi_0(x) + q_1(x) \phi_1(x) \quad (4)$$

El algoritmo de Clenshaw admite una formulación matricial. Sea $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$ la matriz

$$S = \begin{pmatrix} 1 & -\alpha_2 & -\beta_3 & & & \\ & 1 & -\alpha_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & -\beta_n & \\ & & & \ddots & -\alpha_n & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

entonces el algoritmo de Clenshaw es equivalente a resolver el sistema tridiagonal triangular superior $Sq = c$, donde $q, c \in \mathbb{R}^n$ son los vectores $q = (q_1, q_2, \dots, q_n)^T$ y

$c = (c_1, c_2, \dots, c_n)^\top$, y después usar la relación (4) para obtener el valor final del polinomio. Notemos que si imponemos que $\phi_0(x) = 1$, cosa que sucede en los polinomios ortogonales clásicos, entonces la recurrencia del algoritmo de Clenshaw (3) puede llevarse hasta $r = 0$ y calcular $q_0(x)$ de modo que $\sum c_i \phi_i(x) = q_0(x)$. En esta situación la formulación matricial del algoritmo necesitaría la inclusión de una nueva fila con 1, $-\alpha_1(x)$ y $-\beta_2$, obteniendo, por tanto, una matriz $S \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (n+1)}$ y $q, c \in \mathbb{R}^{n+1}$.

El algoritmo de Forsythe [27] está basado en una aplicación directa de la recurrencia a tres términos (2) y consiste en:

ALGORITMO DE FORSYTHE (F)

Paso 1: Cálculo de los polinomios ortogonales $\{\phi_i\}$ y de las sumas parciales $\{f_i\}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} f_1(x) = c_0 \phi_0(x) + c_1 \phi_1(x), \\ \phi_r(x) = \alpha_r(x) \phi_{r-1}(x) + \beta_r \phi_{r-2}(x), \\ f_r(x) = f_{r-1}(x) + c_r \phi_r(x), \end{array} \right\} \quad r = 2, \dots, n. \quad (6)$$

Paso 2: Cálculo del valor del polinomio

$$\sum_{r=0}^n c_r \phi_r(x) = f_n(x), \quad (7)$$

El algoritmo de Forsythe también puede ser escrito en forma matricial. La evaluación de la familia de polinomios ortogonales $\{\phi_i\}$ es equivalente a resolver el sistema lineal $\mathcal{F} \phi = e_{n+1}$, con $\mathcal{F} \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (n+1)}$, $\phi, e_{n+1} \in \mathbb{R}^{n+1}$ dados por

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} 1 & -\alpha_n & -\beta_n & & & \\ & 1 & -\alpha_{n-1} & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & -\beta_2 & \\ & & & \ddots & -\alpha_1 & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad \phi = \begin{pmatrix} \phi_n \\ \vdots \\ \vdots \\ \phi_1 \\ \phi_0 \end{pmatrix}, \quad e_{n+1} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ \phi_0 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

y después tener en cuenta el sumatorio $\sum c_r \phi_r$.

Si nos atenemos exclusivamente al número de operaciones aritméticas, el algoritmo de Clenshaw requiere $4n + 5$ *flops* (sumas y multiplicaciones), mientras que el algoritmo de Forsythe necesita $5n - 2$ *flops*. Por lo tanto, de acuerdo a la complejidad computacional, el algoritmo de Clenshaw es más eficiente y en general es el más utilizado.

3. Algoritmos paralelos

En los últimos años ha surgido el concepto de computación en paralelo, situación que proporciona al investigador una enorme capacidad de cálculo, la cual le permite abordar problemas, que por sus enormes requerimientos computacionales, no era posible simular años atrás con la tecnología existente.

Simplificando, un ordenador paralelo consta de varios procesadores, los cuales pueden compartir o no parte de memoria, realizar todos la misma operación o no, etc. Así surgen distintos tipos de ordenadores paralelos: de instrucción simple (SI) o de instrucción múltiple (MI). A su vez cada uno de ellos puede ser de dato único (SD) o datos múltiples (MD), obteniendo por tanto ordenadores de los tipos SISD, SIMD, MISD y MIMD, siendo estos últimos los más útiles. Por último, si cada procesador comparte su memoria con el resto de los procesadores, tendremos ordenadores de memoria compartida o bien, si cada uno de ellos posee su propia memoria, ordenadores de memoria distribuida. Nosotros analizaremos el caso de tener un ordenador MIMD (multiple-instruction multiple-data) de memoria distribuida, ya que un algoritmo diseñado para ellos será útil en casi todas las demás arquitecturas. Ordenadores de este tipo son los ordenadores CRAY, Meiko Computing Surfaces y cualquier red de ordenadores.

3.1 Polinomios de Chebyshev: algoritmos CHPC y CHPF

En esta subsección analizaremos con detalle el desarrollo de algoritmos paralelos para la evaluación de polinomios escritos como combinaciones lineales de polinomios de Chebyshev de primera o de segunda especie. Los polinomios de Chebyshev de primera especie $\{T_i(x)\}$ verifican [42] la recurrencia triple dada por

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1, & T_1(x) &= x, \\ T_r(x) - 2x T_{r-1}(x) + T_{r-2}(x) &= 0, & r &\geq 2, \end{aligned}$$

y los polinomios de Chebyshev de segunda especie $\{U_i(x)\}$ otra relación análoga. Ambas familias de polinomios están definidas en el intervalo cerrado $[-1, 1]$.

Para encontrar algoritmos paralelos para estas dos familias primero analizaremos la recurrencia triple genérica (2). A la hora de plantear la evaluación en paralelo de una recurrencia lineal es preciso analizar si los elementos que la forman verifican alguna propiedad. En nuestro caso las recurrencias vienen determinadas por los polinomios ortogonales. Supongamos que los polinomios dados verifican, además de la clásica recurrencia triple, otra recurrencia:

$$\phi_{sp+m}(x) + \alpha_s^{m,p}(x) \phi_{(s-1)p+m}(x) + \beta_s^{m,p}(x) \phi_{(s-2)p+m}(x) = 0, \quad (9)$$

para ciertos $\alpha_s^{m,p}(x)$ y $\beta_s^{m,p}(x)$, siendo m el desplazamiento y p un índice (en nuestro caso el número de procesadores) que permite la separación en bloques ($m = 0, \dots, p-1$). Así, la expresión (9) se puede escribir como una recurrencia p -paralela:

$$\Phi_s^{m,p}(x) + \alpha_s^{m,p}(x) \Phi_{s-1}^{m,p}(x) + \beta_s^{m,p}(x) \Phi_{s-2}^{m,p}(x) = 0 \quad (10)$$

donde $\Phi_s^{m,p}(x) = \phi_{sp+m}$. Aplicado a sumas de polinomios que satisfacen dicha relación nos permite calcular de modo independiente p sumas parciales. Además, con esta notación y suponiendo que $n = kp - 1$, la suma $\sum_{r=0}^n c_r \phi_r(x)$ puede ser escrita como

$$\sum_{r=0}^{kp-1} c_r \phi_r(x) = \sum_{m=0}^{p-1} \left(\sum_{s=0}^{k-1} c_{sp+m} \phi_{sp+m}(x) \right) = \sum_{m=0}^{p-1} P^{m,p}(x).$$

Ahora un algoritmo paralelo para evaluar cada suma parcial $P^{m,p}(x)$ puede ser obtenido aplicando los algoritmos de Clenshaw o Forsythe a la relación (10). Esto nos da dos algoritmos paralelos [14, 15, 16, 17].

Particularicemos ahora al caso de los polinomios de Chebyshev, los cuales verifican las siguientes relaciones entre el producto de dos de ellos [42]:

$$T_p(x) T_n(x) = \frac{1}{2} \{ T_{n+p}(x) + T_{|n-p|}(x) \}, \quad (11)$$

$$T_p(x) U_n(x) = \frac{1}{2} \{ U_{n+p}(x) + U_{|n-p|}(x) \}.$$

Por lo tanto, en el caso de polinomios de Chebyshev de primera especie, tendremos la siguiente recurrencia en paralelo:

$$T_{sp+m}(x) - 2T_p(x) T_{(s-1)p+m}(x) + T_{|(s-2)p+m|}(x) = 0, \quad \text{para } s \geq 1 \quad (12)$$

y por lo tanto un algoritmo paralelo para evaluar $p_n(x) = \sum_{r=0}^n c_r T_r(x)$ se escribe como:

CHEBYSHEV-PARALLEL CLENSHAW (CHPC)

Paso 1: Proceso de inicialización: $T_k(x)$, $k = 2, \dots, p$.

Paso 2: Cálculo de $P^{0,p}(x), \dots, P^{p-1,p}(x)$ en paralelo con p procesadores, siendo

$$P^{m,p}(x) = Q_0^{m,p} T_m(x) - Q_1^{m,p} T_{p-m}(x), \quad (13)$$

donde $Q_0^{m,p}$ y $Q_1^{m,p}$ se calculan con la recurrencia

$$\begin{cases} Q_k^{m,p} = Q_{k+1}^{m,p} = 0, \\ Q_r^{m,p} = c_{mrp+m} + 2T_p(x) Q_{r+1}^{m,p} - Q_{r+2}^{m,p}, \quad r = k-1, \dots, 0. \end{cases} \quad (14)$$

Paso 3: Cálculo final del valor del polinomio

$$p_n(x) = \sum_{m=0}^{p-1} P^{m,p}(x). \quad (15)$$

Notemos que en la ecuación (13) se ha hecho uso de la propiedad (12). Dado que los polinomios de Chebyshev de segunda especie verifican una propiedad análoga, pero para $s \geq 2$, es necesario distinguir la evaluación de un polinomio escrito como una combinación lineal de polinomios de Chebyshev de segunda especie $p_n(x) = \sum_{r=0}^n c_r U_r(x)$. Así, obtenemos el correspondiente algoritmo paralelo:

CHEBYSHEV-PARALLEL CLENSHAW (CH₂PC)

Paso 1: Proceso de inicialización: $U_k(x)$, $k = 2, \dots, 2p$ y $T_p(x)$.

Paso 2: Cálculo de $P^{0,p}(x), \dots, P^{p-1,p}(x)$ en paralelo con p procesadores, siendo

$$P^{m,p}(x) = Q_0^{m,p} U_m(x) + Q_1^{m,p} \{U_{p+m}(x) - 2T_p(x) U_m(x)\}, \quad (16)$$

donde $Q_0^{m,p}$ y $Q_1^{m,p}$ se calculan con la recurrencia (14)

Paso 3: Cálculo final del valor del polinomio

$$p_n(x) = \sum_{m=0}^{p-1} P^{m,p}(x). \quad (17)$$

Si ahora aplicamos las técnicas de paralelización al algoritmo de Forsythe obtendremos los correspondientes algoritmos paralelos. Así, el algoritmo paralelo de Forsythe (en adelante CHPF) para evaluar $p_n(x) = \sum_{r=0}^n c_r T_r(x)$ se escribirá como:

CHEBYSHEV-PARALLEL FORSYTHE (CHPF)

Paso 1: Proceso de inicialización: $T_i(x)$, $i = 2, \dots, 2p$.

Paso 2: Cálculo de $F^{0,p}(x), \dots, F^{p-1,p}(x)$ en paralelo con p procesadores, siendo

$$\left\{ \begin{array}{l} F^{m,p} = c_m T_m(x) + c_{m+p} T_{m+p}(x) \\ T_{rp+m}(x) = 2T_p(x) T_{(r-1)p+m}(x) - T_{(r-2)p+m}(x) \\ F^{m,p} = F^{m,p} + c_{rp+m} T_{rp+m}(x) \end{array} \right\} \quad r = 2, \dots, k-1. \quad (18)$$

Paso 3: Cálculo final del valor del polinomio

$$p_n(x) = \sum_{m=0}^{p-1} F^{m,p}(x). \quad (19)$$

Y de modo análogo se obtendría un algoritmo paralelo para el caso de los polinomios de Chebyshev de segunda especie.

Es interesante remarcar que los algoritmos anteriores permiten a su vez obtener algoritmos paralelos de evaluación de series trigonométricas debido a las conocidas relaciones entre los polinomios de Chebyshev y expresiones trigonométricas [1, 42]:

$$T_n(x) = \cos(n\theta), \quad U_{n-1}(x) = \frac{\text{sen}(n\theta)}{\text{sen}(\theta)}, \quad \text{con } x = \cos\theta.$$

Así pues, evaluar una suma finita de cosenos ($\sum_{r=0}^n c_r \cos(r\theta)$) es equivalente a evaluar una suma finita de polinomios de Chebyshev de primera especie, mientras que evaluar $\sum_{r=1}^n c_r \text{sen}(r\theta)$ equivale a evaluar una suma finita de polinomios de Chebyshev de segunda especie. Así mismo, si lo que tenemos es una suma de Fourier nos basta con descomponerla en una suma de cosenos y otra de senos.

Una vez descritos los algoritmos paralelos es necesario analizar su complejidad computacional para un ordenador paralelo tipo MIMD.

En primer lugar analicemos la complejidad del algoritmo CHPC. En el **Paso 1** se evalúan diversos polinomios en la inicialización del algoritmo, en el caso de polinomios de Chebyshev de primera especie necesitamos $2p - 4$ flops en secuencial, y en paralelo $2 \lceil \log_2(p - 2) \rceil$ flops. En el caso de polinomios de Chebyshev de segunda especie $6p - 12$ flops en secuencial y $6 \lceil \log_2(p - 2) \rceil$ flops en paralelo. Dado que la evaluación en paralelo de la inicialización involucra diversas comunicaciones entre procesadores resulta más ventajoso su evaluación en secuencial. Por ello, de ahora en adelante supondremos que los procesos de inicialización siempre se realizarán en secuencial. En el **Paso 2** (la parte paralela del algoritmo) se necesitan $3(k + 1)$ flops y en el **Paso 3**, se necesitan $\lceil \log_2 p \rceil$ flops usando p procesadores o bien $p - 1$ en secuencial. A su vez denotaremos por T_{com} el tiempo de comunicación entre procesadores. Reuniendo todos los pasos se obtiene la complejidad final del algoritmo para la evaluación de una suma finita de polinomios de Chebyshev de primera especie $T_n(x)$,

$$T_p^{\text{CHPC}} = 3(k + p) - 2 + T_{com}, \quad \text{con } k = \lceil (n + 1)/p \rceil, \quad (20)$$

y de modo análogo se obtiene $T_p^{\text{CHPF}} = 4k + 3p - 12 + T_{com}$ flops para el algoritmo CHPF.

Un parámetro muy utilizado en la medida del aprovechamiento de un ordenador paralelo cuando se implementa un algoritmo en él es el *speed-up*: $S_p = T_1/T_p$. En nuestro caso comparamos el algoritmo más eficiente en secuencial (el algoritmo de Clenshaw) con

el algoritmo paralelo. Así, el speed-up del algoritmo CHPC será

$$S_p^{\text{CHPC}} = \frac{T_1^{\text{C}}}{T_p^{\text{CHPC}}} = \frac{3n + 2}{3(k + p) - 2 + T_{\text{com}}}.$$

Dado que $\lim_{n \rightarrow \infty} S_p^{\text{CHPC}} = p$, se tiene que, asintóticamente, el algoritmo CHPC es óptimo con respecto al algoritmo secuencial de Clenshaw debido a que tiende a su máximo valor p .

3.1.1 PRUEBAS NUMÉRICAS

Con intención de analizar el comportamiento efectivo de los algoritmos introducidos han sido programados y ejecutados en un ordenador CRAY T3D con 512-PE usando Message Passing Interface (MPI) como entorno paralelo en el Edinburgh Parallel Computing Centre (EPCC). Este superordenador está gestionado por un sistema CRAY Y-MP. Cada nodo T3D PE consta de un procesador DECchip 21064 Alpha con 64Mb de memoria. La configuración de hardware del superordenador incluye dos puertos IO soportando comunicaciones de hasta 200 Mbyte/sec. El hecho de escoger MPI se debe a su probada funcionalidad y debido a que actualmente es uno de los entornos paralelos más utilizados por la comunidad científica.

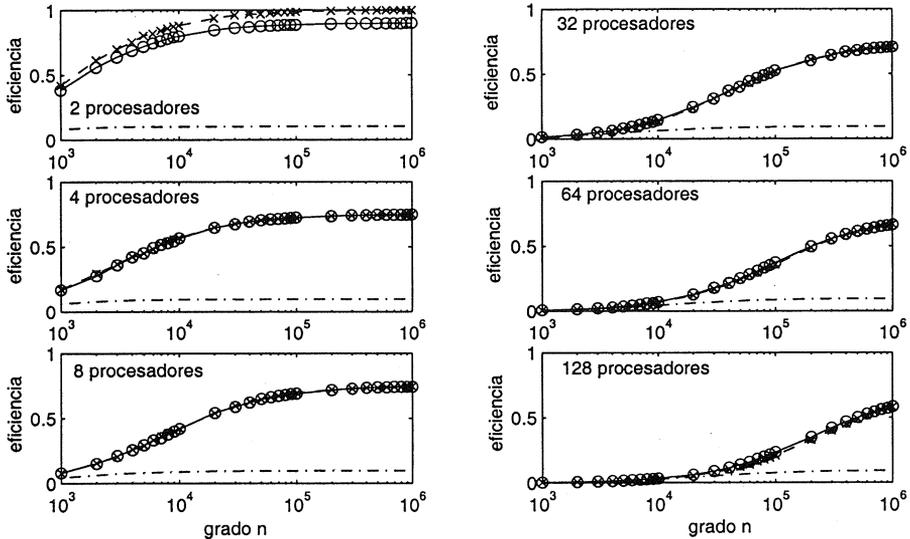


Figura 1.—Eficiencia de los algoritmos CHPC (\circ), CHPF (\times) y trivial ($-\cdot-$) en la evaluación de un polinomio escrito como una suma finita de polinomios de Chebyshev de primera especie.

En la figura 1 presentamos la eficiencia ($E_p = S_p/p$) de los algoritmos paralelos comparados con el algoritmo de Clenshaw secuencial. En las gráficas se observa el típico

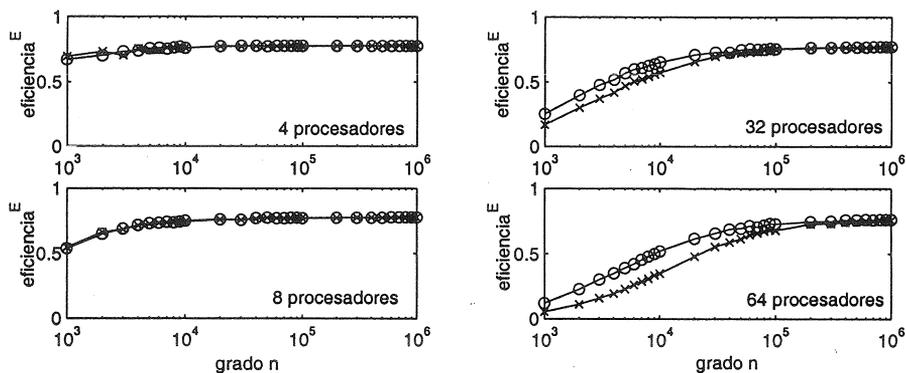


Figura 2.—Eficiencia, sin tener en cuenta la comunicación entre procesadores, de los algoritmos CHPC (o) y CHPF (x) en la evaluación de un polinomio escrito como una suma finita de polinomios de Chebyshev de primera especie.

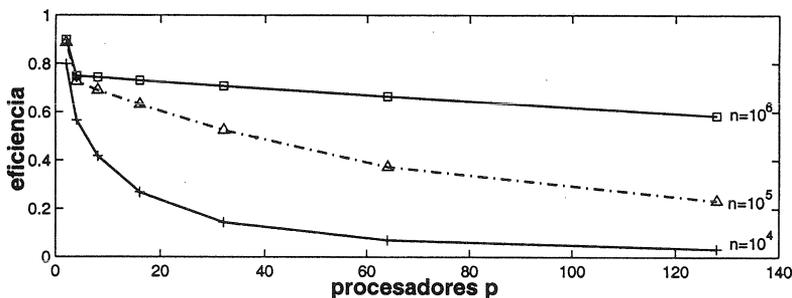


Figura 3.—Eficiencia en la evaluación de un polinomio de grado n ($n = 10^4, 10^5, 10^6$) usando el algoritmo CHPC.

comportamiento de este tipo de problemas y algoritmos (ver [24]): la eficiencia decrece según aumenta el número de procesadores, necesitando un problema de alto grado para obtener buenos resultados. Así mismo, se observa que el comportamiento de los algoritmos CHPC y CHPF es muy similar. Esto se debe a que en procesadores RISC (como son los DECchip 21064 Alpha) se realizan m multiplicaciones y sumas en cada ciclo de reloj (m en general entre 1 y 4). Por ello, la diferencia entre los algoritmos CHPC y CHPF se ve minimizada. En la figura 1 también se muestra el comportamiento del algoritmo trivial que consiste en evaluar en paralelo el polinomio usando la definición trigonométrica de los polinomios de Chebyshev, algoritmo muy poco eficiente.

En la figura 2 damos la eficiencia de los algoritmos si suprimimos el proceso de comunicación entre procesadores (situación evidentemente teórica). Se puede observar como para polinomios de grado bajo el proceso de comunicación es el que más tiempo emplea.

En la figura 3 presentamos la evolución de la eficiencia del algoritmo CHPC según el número de procesadores, gráficas que presentan el típico comportamiento decreciente para este tipo de problemas [24].

3.2 Polinomios ortogonales genéricos

En el apartado anterior se han comentado extensiones paralelas de algoritmos secuenciales para evaluar sumas de polinomios de Chebyshev. Estos algoritmos se basan en una relación de recurrencia en paralelo obtenida haciendo uso de fórmulas del producto de dos polinomios de Chebyshev (11). Desgraciadamente, otras familias de polinomios ortogonales no verifican reglas tan sencillas. Por ejemplo, el producto de dos polinomios de Gegenbauer verifica [2]:

$$C_m^\lambda(x) C_n^\lambda(x) = \sum_{k=0}^{\min(m,n)} \frac{m+n+\lambda-2k}{m+n+\lambda-k} \frac{(\lambda)_k (\lambda)_{m-k} (\lambda)_{n-k} (2\lambda)_{m+n-k}}{k! (m-k)! (n-k)! (\lambda)_{m+n-k}} \frac{(m+n-2k)!}{(2\lambda)_{m+n-2k}} C_{m+n-2k}^\lambda(x),$$

donde $(\gamma)_s = \gamma \cdot (\gamma + 1) \cdot (\gamma + 2) \cdots (\gamma + s - 1)$ es el símbolo de Pochhammer [36]. Al ser muy complicadas e involucrar un gran número de términos estas fórmulas no permiten una eficiente implementación de algoritmos paralelos. Por lo tanto, a la hora de construir métodos paralelos, se utilizarán métodos de paralelización de la formulación matricial de las recurrencias secuenciales. Es importante tener en cuenta que para una familia genérica de polinomios ortogonales es necesario calcular los coeficientes $\alpha_r(x)$ y β_r que la determinan, los cuales pueden ser calculados en paralelo. En la tabla 1 aparecen los coeficientes para diversas familias de polinomios [1, 36].

Tabla 1.—Coeficientes de la recurrencia triple para las familias de polinomios ortogonales de Jacobi, Gegenbauer, Legendre y Chebyshev de primera y de segunda especie.

	$\alpha_r(x)$	β_r
$P_i^{(\alpha,\beta)}(x)$	$x \frac{(2r+\alpha+\beta)(2r+\alpha+\beta-1)}{2r(r+\alpha+\beta)} + \frac{(\alpha^2-\beta^2)(2r+\alpha+\beta-1)}{2r(r+\alpha+\beta)(2r+\alpha+\beta-2)}$	$-\frac{(r+\alpha-1)(r+\beta-1)(2r+\alpha+\beta)}{r(r+\alpha+\beta)(2r+\alpha+\beta-2)}$
$C_i^\lambda(x)$	$2x \frac{r-1+\lambda}{r}$	$-\frac{r-2+2\lambda}{r}$
$P_i(x)$	$x \frac{2r-1}{r}$	$-\frac{r-1}{r}$
$T_i(x)$	$2x$	-1
$U_i(x)$	$2x$	-1

En las siguientes subsecciones presentamos cuatro nuevos algoritmos [5, 9] para la evaluación en paralelo de sumas finitas de una familia genérica de polinomios ortogonales.

3.2.1 PARALLEL CLENSHAW ALGORITHM (PC)

Para simplificar la notación supondremos que $\tilde{n} = kp$, con p el número de procesadores (el caso general se obtiene con cambios muy sencillos). Dividiendo la matriz S (5) en p bloques, se tiene

$$S = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_1 & \mathcal{U}_1 & & \\ & \mathcal{D}_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \mathcal{U}_{p-1} \\ & & & \mathcal{D}_p \end{pmatrix}, \quad (21)$$

donde las submatrices $\mathcal{D}_i, \mathcal{U}_i \in \mathbb{R}^{k \times k}$ son

$$\mathcal{D}_i = \begin{pmatrix} 1 & -\alpha_{(i-1)k+2} & -\beta_{(i-1)k+3} & & \\ & 1 & -\alpha_{(i-1)k+3} & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -\beta_{ik} \\ & & & 1 & -\alpha_{ik} \\ & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{U}_i = \begin{pmatrix} & & 0 & \dots & 0 \\ & & \vdots & & \vdots \\ -\beta_{ik+1} & & \vdots & & \vdots \\ -\alpha_{ik+1} & -\beta_{ik+2} & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Ahora, usando las técnicas de *divide-and-conquer* y la eliminación Gaussiana en paralelo [46], es decir, diagonalizar en cada procesador la submatriz \mathcal{D}_i , se obtiene un nuevo sistema $S^* \mathbf{q} = \mathbf{c}^*$ donde

$$S^* = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_k & \mathcal{U}_1^* & & \\ & \mathbb{I}_k & \ddots & \\ & & \ddots & \mathcal{U}_{p-1}^* \\ & & & \mathbb{I}_k \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}^* = \begin{pmatrix} c_1^* \\ \vdots \\ \vdots \\ c_n^* \end{pmatrix}, \quad (22)$$

con \mathbb{I}_k la matriz identidad $\in \mathbb{R}^{k \times k}$ y

$$\mathcal{U}_i^* = \begin{pmatrix} a_i^{k-1} & b_i^{k-1} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_i^1 & b_i^1 & \vdots & & \vdots \\ a_i^0 = -\alpha_{ik+1} & b_i^0 = -\beta_{ik+2} & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto, después de comunicar los valores $a_m^{k-2}, a_m^{k-1}, b_m^{k-2}, b_m^{k-1}, c_{(m-1)k+2}^*, c_{(m-1)k+1}^*$, para $m = 1, \dots, p$, nuestro problema se reduce a resolver un sistema lineal reducido de orden $2p$

$$\begin{pmatrix} \mathbb{I}_2 & \mathcal{U}_1^{R*} & & \\ & \mathbb{I}_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \mathcal{U}_{p-1}^{R*} \\ & & & \mathbb{I}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{Q}_{p-1} \\ \mathbf{Q}_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{R*} \\ \vdots \\ \mathbf{C}_{p-1}^{R*} \\ \mathbf{C}_p^{R*} \end{pmatrix} \quad (23)$$

donde las submatrices $\mathbb{I}_2, \mathcal{U}_i^{R*} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ y los vectores $\mathbf{Q}_i, \mathbf{C}_i^{R*} \in \mathbb{R}^2$ ($i = 1, \dots, p$) vienen dados por

$$\mathcal{U}_i^{R*} = \begin{pmatrix} a_i^{k-1} & b_i^{k-1} \\ a_i^{k-2} & b_i^{k-2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q}_i = \begin{pmatrix} q_{(i-1)k+1} \\ q_{(i-1)k+2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}_i^{R*} = \begin{pmatrix} c_{(i-1)k+1}^* \\ c_{(i-1)k+2}^* \end{pmatrix}$$

Este sistema reducido puede ser resuelto en paralelo mediante métodos recursivos pero que involucran un gran número de comunicaciones entre procesadores. Por tanto, resolveremos de modo secuencial los sistemas reducidos.

Finalmente se obtiene el valor del polinomio usando (4).

Así, el algoritmo puede escribirse como:

PARALLEL CLENSHAW ALGORITHM (PC)

- Paso 1:** Evaluación en paralelo de los coeficientes α_j y β_j para $j = 1, \dots, n$.
- Paso 2:** Diagonalización en paralelo de \mathcal{D}_i y cálculo de $\mathcal{U}_i^* = \mathcal{D}_i^{-1} \mathcal{U}_i$ y \mathbf{c}^* .
- Paso 3:** Comunicación de $a_m^{k-2}, a_m^{k-1}, b_m^{k-2}, b_m^{k-1}, c_{(m-1)k+2}^*, c_{(m-1)k+1}^*$ ($m = 1, \dots, p$).
- Paso 4:** Resolución del sistema lineal reducido (23) usando $\mathbf{Q}_i = \mathbf{C}_i^{R*} - \mathcal{U}_i^{R*} \mathbf{Q}_{i+1}$.
- Paso 5:** Evaluación final del polinomio mediante la ecuación (4).

Es importante señalar que el algoritmo PC aplica las técnicas de *divide-and-conquer* pero sin resolver completamente cada uno de los p subsistemas. Al evaluar un polinomio no estamos interesados en sumas parciales, que nos las daría la resolución completa del sistema $\mathcal{S}\mathbf{q} = \mathbf{c}$, si no en los últimos términos q_1 y q_2 . Lo cual redundaría en el consiguiente ahorro de memoria al guardar muy pocos términos y en que sólo hace falta una comunicación entre procesadores.

Así mismo, es interesante remarcar que el algoritmo PC puede interpretarse [9] como la evaluación de tres polinomios, de ahí el aumento de la complejidad computacional con respecto al algoritmo secuencial.

Notemos que el algoritmo PC incrementa la complejidad computacional con respecto al algoritmo secuencial pero, debido a la evaluación de los coeficientes de las recurrencias este incremento se ve minimizado. Así, para un ordenador de tipo MIMD llamaremos T_{com} al tiempo de comunicación entre procesadores y T_α y T_β a la complejidad de evaluar α_j y β_j respectivamente (supondremos igual complejidad para cada j). Es importante señalar que la evaluación de estos coeficientes α_j y β_j puede llevar más tiempo computacional que la evaluación del polinomio propiamente dicho, además, es importante tener en cuenta que estas evaluaciones involucran divisiones.

Teniendo en cuenta todo lo anterior es fácil obtener la complejidad computacional del algoritmo PC:

$$T_p^{PC} = k (10 + T_\alpha + T_\beta) + 8p - 19 + T_{com}, \quad \text{con } k = \lceil n/p \rceil. \quad (24)$$

3.2.2 MATRIX PARALLEL CLENSHAW ALGORITHM (MPC)

Si formulamos la ecuación (3) como un producto de matrices entonces es posible obtener otro algoritmo paralelo. La recurrencia (3) se puede poner de la forma

$$\begin{pmatrix} q_r \\ q_{r+1} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{r+1} & \beta_{r+2} & c_r \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_{r+1} \\ q_{r+2} \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \mathcal{M}_r^C \cdot \begin{pmatrix} q_{r+1} \\ q_{r+2} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Así, la evaluación del polinomio se realiza usando la ecuación (4) donde los coeficientes q_2 y q_1 se obtienen del producto de matrices

$$\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ 1 \end{pmatrix} = \left\{ \prod_{r=1}^n \mathcal{M}_r^C \right\} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Esta formulación como producto de matrices permite generar un nuevo algoritmo paralelo al poder realizar dicho producto en paralelo.

MATRIX PARALLEL CLENSHAW ALGORITHM (MPC)

Paso 1: Evaluación en paralelo de los coeficientes α_j y β_j para $j = 1, \dots, n$.

Paso 2: Evaluación en cada procesador m del producto parcial de matrices:

$$\pi^{m,C} = \prod_{r=(m-1)p+1}^{mp} \mathcal{M}_r^C.$$

Paso 3: Comunicación de $\pi^{m,C}$ ($m = 1, \dots, p$).

Después de un proceso de comunicación necesitaremos resolver un sistema lineal reducido de orden $2p$

$$\begin{pmatrix} \mathbb{I}_2 & \mathcal{U}_1^{R*} & & \\ & \mathbb{I}_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \mathcal{U}_{p-1}^{R*} \\ & & & \mathbb{I}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \vdots \\ \Phi_{p-1} \\ \Phi_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} O_2 \\ \vdots \\ O_2 \\ E_p^{R*} \end{pmatrix} \quad (26)$$

donde las submatrices $\mathbb{I}_2, \mathcal{U}_i^{R*} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ y los vectores $\Phi_i, E_p^{R*}, O_2 \in \mathbb{R}^2$ vienen dados por

$$\mathcal{U}_i^{R*} = \begin{pmatrix} a_i^{k-1} & b_i^{k-1} \\ a_i^{k-2} & b_i^{k-2} \end{pmatrix}, \quad \Phi_i = \begin{pmatrix} \phi_{(p-i+1)k-1} \\ \phi_{(p-i+1)k-2} \end{pmatrix}, \quad E_p^{R*} = \begin{pmatrix} c_{k-1}^* \\ c_{k-2}^* \end{pmatrix}, \quad O_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

A continuación se deben comunicar las soluciones a cada procesador para obtener los valores de todos los polinomios ortogonales $\{\phi_i(x)\}$. Finalmente se han de comunicar los valores de los polinomios ortogonales o bien la suma parcial para poder obtener el valor del polinomio mediante (1). Así, el algoritmo puede escribirse como:

PARALLEL FORSYTHE ALGORITHM (PF)
Paso 1: Evaluación en paralelo de los coeficientes α_j y β_j para $j = 1, \dots, n$.
Paso 2: Diagonalización en paralelo de \mathcal{D}_i , y cálculo de $\mathcal{U}_i^* = \mathcal{D}_i^{-1} \mathcal{U}_i$ y e_{n+1}^* .
Paso 3: Comunicación de $a_m^{k-2}, a_m^{k-1}, b_m^{k-2}, b_m^{k-1}$ ($m = 1, \dots, p$) y c_{k-2}^*, c_{k-1}^* .
Paso 4: Resolución del sistema lineal reducido (26).
Paso 5: Comunicación de ϕ_{mk-2}, ϕ_{mk-1} ($m = 1, \dots, p$).
Paso 6: Resolución en paralelo de los subsistemas para obtener:
$\{\phi_i(x), i = 0, \dots, n\}$.
Paso 7: Comunicación de $\{\phi_i(x), i = 0, \dots, n\}$.
Paso 8: Evaluación final del polinomio por medio de (1).

Usando la misma notación que en el algoritmo PC se obtiene la complejidad computacional de este algoritmo:

$$T_p^{\text{PF}} = k(11 + T_\alpha + T_\beta) + 6p - 15 + 3T_{\text{com}}, \quad \text{con } k = \lceil (n+1)/p \rceil.$$

Debido a los tres procesos de comunicación (el algoritmo PC sólo necesita uno) y a su mayor complejidad computacional, este algoritmo no resulta eficiente en comparación con los demás.

3.2.4 MATRIX PARALLEL FORSYTHE ALGORITHM (MPF)

Usando la ecuación (6) podemos generar un algoritmo paralelo del mismo tipo que el algoritmo MPC. En este caso la recurrencia puede ser puesta como

$$\begin{pmatrix} f_{r-1} \\ \phi_r \\ \phi_{r-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & c_{r-1} & 0 \\ 0 & \alpha_r & \beta_r \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{r-2} \\ \phi_{r-1} \\ \phi_{r-2} \end{pmatrix} \equiv \mathcal{M}_r^F \cdot \begin{pmatrix} f_{r-2} \\ \phi_{r-1} \\ \phi_{r-2} \end{pmatrix}$$

y por lo tanto, el polinomio puede ser evaluado usando $\sum_{r=0}^n c_r \phi_r(x) = f_{n-1} + c_n \phi_n(x)$, donde f_{n-1} y $\phi_n(x)$ se generan mediante el producto de matrices

$$\begin{pmatrix} f_{n-1} \\ \phi_n \\ \phi_{n-1} \end{pmatrix} = \left\{ \prod_{r=1}^n \mathcal{M}_{n-r+1}^F \right\} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto, el algoritmo paralelo consistirá en la evaluación en paralelo del producto de matrices.

MATRIX PARALLEL FORSYTHE ALGORITHM (MPF)

Paso 1: Evaluación en paralelo de los coeficientes α_j y β_j para $j = 1, \dots, n$.

Paso 2: Evaluación en cada procesador m del producto parcial de matrices:

$$\pi^{m,F} = \prod_{r=(m-1)p+1}^{mp} \mathcal{M}_{n-r+1}^F.$$

Paso 3: Comunicación de $\pi^{m,F}$ ($m = 1, \dots, p$).

Paso 4: Cálculo del producto total en secuencial:

$$\begin{pmatrix} f_{n-1} \\ \phi_n \\ \phi_{n-1} \end{pmatrix} = \left\{ \prod_{m=1}^p \left(\prod_{r=(m-1)p+1}^{mp} \mathcal{M}_{n-r+1}^F \right) \right\} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_0 \\ 0 \end{pmatrix} = \left\{ \prod_{m=1}^p \pi^{m,F} \right\} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (27)$$

Paso 5: Evaluación final del polinomio por medio de

$$\sum_{r=0}^n c_r \phi_r(x) = f_{n-1} + c_n \phi_n(x).$$

Usando la misma notación que en el algoritmo PC se obtiene la complejidad computacional de este algoritmo:

$$T_p^{\text{MPF}} = k (10 + T_\alpha + T_\beta) + 20p - 33 + T_{\text{com}}, \quad \text{con } k = \lceil n/p \rceil. \quad (28)$$

3.2.5 PRUEBAS NUMÉRICAS

Como en la subsección 3.1.1 todas las pruebas han sido realizadas en un superordenador Cray T3D en el EPCC (Edimburgo).

En la figura 4 presentamos la eficiencia en la evaluación de un polinomio de grado n escrito como una suma finita de polinomios de Jacobi y de Gegenbauer, usando los algoritmos PC, MPC, PF y MPF. La evolución general de las gráficas es semejante al de la sección 3.1.1, donde para obtener buenas eficiencias se necesitaba un polinomio de alto grado. Se observa como el comportamiento de los algoritmos PC y MPF es muy similar, siendo ligeramente inferior la eficiencia del algoritmo MPC. Finalmente, debido a las tres comunicaciones entre procesadores, el algoritmo PF presenta claramente la peor eficiencia. Además, es importante remarcar como la eficiencia es mayor para el caso de los polinomios de Jacobi. La razón está en la mayor complejidad computacional en la evaluación de los coeficientes α_i y β_i en el caso de los polinomios de Jacobi. Notemos que al ser procesadores RISC se realizan varias operaciones (multiplicaciones y adiciones) en el mismo ciclo del reloj, pero las divisiones interrumpen esta evaluación simultánea, haciendo por tanto todavía más costosa esta evaluación. Estos hechos minimizan el incremento computacional de los algoritmos paralelos en comparación con los algoritmos secuenciales.

Tabla 2.—Evolución de la eficiencia según el número de procesadores en la evaluación de un polinomio de grado 10^5 , escrito como una suma finita de polinomios de Chebyshev, usando los algoritmos CHPC y PC.

$E_p = T_1/(p \cdot T_p)$	$p = 2$	4	8	16	32	64	128
CHPC	0.89	0.72	0.68	0.63	0.52	0.37	0.23
PC	0.37	0.33	0.32	0.31	0.28	0.24	0.17

Dado que para la evaluación de sumas finitas de polinomios de Chebyshev existen algoritmos específicos, CHPC y CHPF, resulta interesante comparar estos algoritmos con los algoritmos genéricos. En la tabla 2 se compara la eficiencia de los algoritmos CHPC y

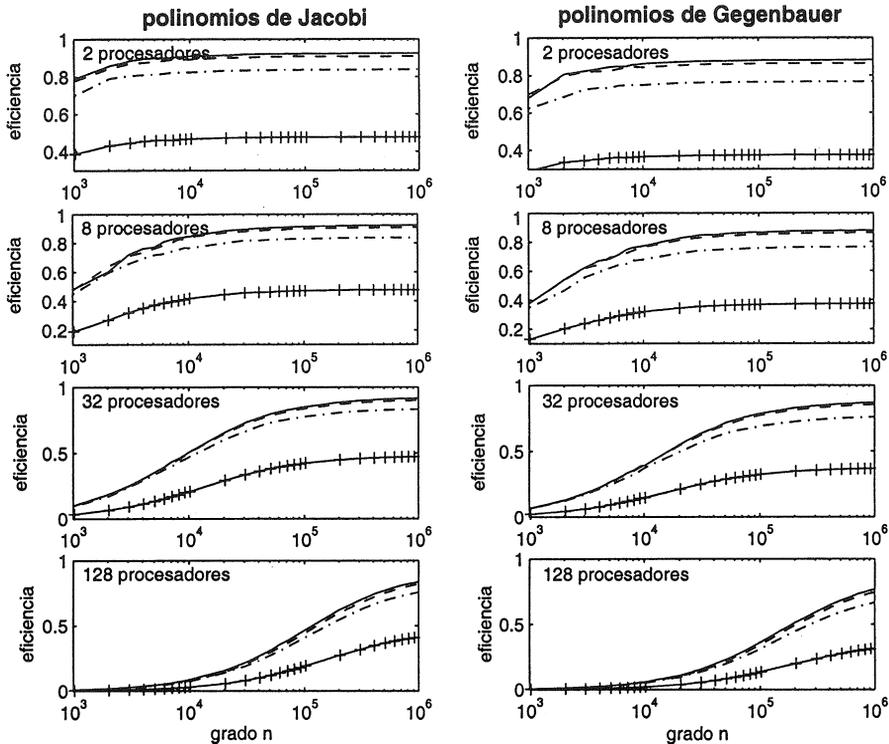


Figura 4.—Eficiencia en la evaluación de polinomios escritos como sumas finitas de polinomios de Jacobi y de Gegenbauer (algoritmos: PC —, MPC --, PF + and MPF --).

PC en la evaluación de un polinomio de grado $n = 10^5$. Claramente el algoritmo CHPC es mucho más eficiente debido a su menor complejidad computacional.

4. Estabilidad numérica: algoritmos secuenciales

En esta sección analizamos la estabilidad numérica de los algoritmos, es decir, cómo se propagan los errores de redondeo en la implementación de los algoritmos en un ordenador. En primer lugar estudiaremos los algoritmos secuenciales. Para estos algoritmos existen sólo algunos estudios para ciertos casos particulares [4, 23, 26, 29, 39, 40, 41, 43], pero no existen cotas generales. Por ello desarrollamos [6, 7] cotas de error aplicables a cualquier familia de polinomios ortogonales.

En toda la sección se asumirá que los cálculos están realizados en aritmética de punto-flotante [32] que obedece los modelos:

$$\text{fl}(x \text{ op } y) = (x \text{ op } y) (1 + \rho), \quad \text{fl}(x \text{ op } y) = \frac{(x \text{ op } y)}{1 + \alpha}, \quad |\rho|, |\alpha| \leq u, \quad (29)$$

siendo $\text{op} \in \{+, -, \times, \div\}$ y u la unidad de redondeo del ordenador. Así mismo, \hat{a} representa el valor calculado de a y $\gamma_n := nu/(1 - nu) = nu + \mathcal{O}(u^2)$.

Una primera acotación del error de redondeo en los algoritmos de Clenshaw y de Forsythe se obtiene usando la formulación matricial de los mismos, la cual nos permite usar las típicas cotas de error en la resolución de sistemas tridiagonales y triangulares de ecuaciones lineales [30, 32]. Por lo tanto, una primera estimación de una cota de error *backward* de los sistemas $\mathcal{S}q = c$ y $\mathcal{F}\phi = e_{n+1}$ vendrá dada por [30]:

$$\begin{aligned} (\mathcal{S} + \Delta\mathcal{S}) \hat{q} &= c, & \text{con } |\Delta\mathcal{S}| &\leq \gamma_2 |\mathcal{S}|, \\ (\mathcal{F} + \Delta\mathcal{F}) \hat{\phi} &= e_{n+1}, & \text{con } |\Delta\mathcal{F}| &\leq \gamma_2 |\mathcal{F}|. \end{aligned} \quad (30)$$

Esta cota de error nos permite obtener de modo muy sencillo una cota de error *forward*:

$$\begin{aligned} \frac{\|\delta q\|_\infty}{\|\hat{q}\|_\infty} &\leq \gamma_2 \text{cond}(\mathcal{S}), \\ \frac{\|\delta \phi\|_\infty}{\|\hat{\phi}\|_\infty} &\leq \gamma_2 \text{cond}(\mathcal{F}), \end{aligned} \quad (31)$$

donde $\text{cond}(\mathcal{S}) = \|\mathcal{S}^{-1}\| \|\mathcal{S}\|_\infty$ es el número de condición de Bauer-Skeel [44]. Hemos de indicar que en esta cota de error sólo se considera el error debido a la resolución del sistema, pero los algoritmos poseen diversos pasos posteriores. Por ello, esta cota es incompleta pero nos servirá como comparación. En [7] se presentan otras cotas basadas en formulaciones más directas [40, 41], las cuales permiten obtener cotas mucho más precisas.

También notemos que estas cotas nos permitirán a su vez acotar el error de redondeo cometido al evaluar derivadas de los polinomios, ya que, por ejemplo en el caso de los polinomios de Gegenbauer se tiene que la derivada m -ésima se puede expresar como

$$\frac{d^m}{dx^m} \left(\sum_{i=0}^n c_i C_i^\lambda(x) \right) = 2^m (\lambda)_m \sum_{i=0}^{n-m} c_{i+m} C_i^{\lambda+m}(x).$$

y por lo tanto se reduce a la evaluación de otra suma de polinomios ortogonales.

4.1 Algoritmo de Clenshaw

Introduciendo los errores de redondeo en la relación de recurrencia del algoritmo de Clenshaw (3) se obtiene

$$\hat{q}_k = \left[\left\{ \alpha_{k+1} \hat{q}_{k+1} (1 + \xi_k^I) + c_k \right\} (1 + \xi_k^{II}) + \beta_{k+2} \hat{q}_{k+2} (1 + \xi_k^{III}) \right] (1 + \xi_k^{IV}), \quad (32)$$

con $|\xi_k^{I,II,III,IV}| \leq u$. Los errores de redondeo también pueden ser introducidos añadiendo δ_r con $\delta_n = 0$, tal que

$$\hat{q}_k = \alpha_{k+1} \hat{q}_{k+1} + (c_k + \delta_k) + \beta_{k+2} \hat{q}_{k+2} \quad (33)$$

y así

$$|\widehat{p}_n(x) - p_n(x)| = |\widehat{q}_0 - q_0| \leq \sum_{k=0}^{n-1} |\delta_k| |\phi_k(x)|. \quad (34)$$

Si ahora eliminamos \widehat{q}_{k+2} de (32) y (33), se tiene, hasta segundo orden en u

$$|\delta_k| \leq u \{2|c_k| + 2|\widehat{q}_k| + 3|\widehat{q}_{k+1}| |a_{k+1}|\} + \mathcal{O}(u^2). \quad (35)$$

Si se tiene en cuenta que \widehat{q}_k ($k = 0, \dots, n$) es la solución exacta del problema perturbado $\mathcal{S}\widehat{q} = (c + \delta)$, con $\delta = (\delta_0, \dots, \delta_{n-1}, 0)^\top$, entonces

$$\widehat{q}_k = \sum_{s=k}^n (c_s + \delta_s) s_{k+1, s+1}^{-1}, \quad (36)$$

donde $s_{i,j}^{-1}$ son los elementos de S^{-1} , es decir

$$\begin{cases} s_{ij}^{-1} &= 0 \quad (j < i), \\ s_{ii}^{-1} &= 1, \\ s_{i, i+1}^{-1} &= \alpha_i(x), \\ s_{ij}^{-1} &= \alpha_i(x) s_{i+1, j}^{-1} + \beta_{i+1} s_{i+2, j}^{-1} \quad (j > i + 1). \end{cases} \quad (37)$$

Así, de (35) y (36),

$$\begin{aligned} |\delta_k| &\leq u \left\{ 2|c_k| + 2 \left| \sum_{s=k}^n (c_s + \delta_s) s_{k+1, s+1}^{-1} \right| \right. \\ &\quad \left. + 3|\alpha_{k+1}| \left| \sum_{s=k+1}^n (c_s + \delta_s) s_{k+2, s+1}^{-1} \right| \right\} + \mathcal{O}(u^2) \\ &\leq u \left\{ 4|c_k| + 2|\delta_k| + \sum_{s=k+1}^n \Delta_{k,s} |c_s + \delta_s| \right\} + \mathcal{O}(u^2), \end{aligned}$$

donde $\Delta_{k,s} = 2|s_{k+1, s+1}^{-1}| + 3|\alpha_{k+1}| |s_{k+2, s+1}^{-1}|$, para $s = k + 1, \dots, n$.

Teniendo en cuenta que $n \cdot u, (4|c_k| + 2|\delta_k|) \cdot u, \Delta_{k,s} \cdot u \ll 1$, hasta segundo orden en u tendremos

$$|\delta_k| \leq u \left\{ 4|c_k| + \sum_{s=k+1}^n \Delta_{k,s} |c_s| \right\} + \mathcal{O}(u^2). \quad (38)$$

Y por tanto, el error de redondeo (34) se acotará por

$$\begin{aligned} |\widehat{p}_n(x) - p_n(x)| &\leq u \cdot \sum_{k=0}^{n-1} \left(4|c_k| + \sum_{s=k+1}^n \Delta_{k,s} |c_s| \right) |\phi_k(x)| + \mathcal{O}(u^2) \\ &= u \cdot \left\{ 4|c_0| |\phi_0(x)| + \sum_{s=1}^n \left(4|\phi_s(x)| + \sum_{k=1}^{s-1} \Delta_{k,s} |\phi_k(x)| \right) |c_s| \right\} + \mathcal{O}(u^2). \end{aligned}$$

Expresión que nos da el siguiente resultado:

Teorema 1 El error de redondeo en la evaluación de una suma finita de polinomios ortogonales $p_n(x) = \sum_{k=0}^n c_k \phi_k(x)$ usando el algoritmo de Clenshaw está acotado por

$$|\widehat{p}_n(x) - p_n(x)| \leq u \sum_{s=0}^n \rho_s(x) |c_s| + \mathcal{O}(u^2), \quad (39)$$

donde

$$\begin{cases} \rho_0(x) = 4 |\phi_0(x)| \\ \rho_s(x) = 4 |\phi_s(x)| + \sum_{k=1}^{s-1} \left(2 |s_{k+1,s+1}^{-1}| + 3 |\alpha_{k+1}| |s_{k+2,s+1}^{-1}| \right) |\phi_k(x)|, \quad s = 1, \dots, n \end{cases} \quad (40)$$

siendo $s_{k,s}^{-1}$ los elementos de S^{-1} (37).

El caso particular de usar polinomios de Chebyshev de primera especie ya fue dado por Oliver [40, 41].

4.2 Algoritmo de Forsythe

En el algoritmo de Forsythe se evalúan todos los polinomios ortogonales mediante la recurrencia triple dada por (2). Si introducimos los errores de redondeo tendremos

$$\widehat{\phi}_r(x) = (\alpha_r \widehat{\phi}_{r-1}(x) (1 + \xi_r^I) + \beta_r \widehat{\phi}_{r-2}(x) (1 + \xi_r^{II})) (1 + \xi_r^{III})$$

con $|\xi_r^{I,II,III}| \leq u$. Expresión que también puede ser interpretada como

$$\widehat{\phi}_r(x) = \alpha_r(x) \widehat{\phi}_{r-1}(x) + \beta_r(x) \widehat{\phi}_{r-2}(x) + \delta_r \quad (41)$$

Operando hasta segundo orden en u , llegamos a

$$|\delta_r| \leq 2u (|\widehat{\phi}_r(x)| + |\alpha_r| |\widehat{\phi}_{r-1}(x)|) + \mathcal{O}(u^2).$$

Si ahora tenemos en cuenta que $\widehat{\phi}_r(x)$ ($r = n, \dots, 0$) es la solución exacta del problema perturbado $\mathcal{F} \widehat{\phi} = (e_{n+1} + \delta)$, con $\delta = (\delta_n, \dots, \delta_2, 0, 0)^\top$, es decir:

$$\widehat{\phi}_r(x) = \sum_{s=n-r}^{n-2} \delta_{n-s} f_{n+1-r,s+1}^{-1} + f_{n+1-r,n+1}^{-1}$$

siendo $f_{k,s}^{-1}$ los elementos de \mathcal{F}^{-1} , que vienen dados por:

$$\begin{cases} f_{ij}^{-1} &= 0 \quad (j < i), \\ f_{ii}^{-1} &= 1, \\ f_{i,i+1}^{-1} &= \alpha_{n-i+1}(x), \\ f_{ij}^{-1} &= \alpha_{n-i+1}(x) f_{i+1,j}^{-1} + \beta_{n-i+1} f_{i+2,j}^{-1} \quad (j > i + 1). \end{cases} \quad (42)$$

Por lo tanto

$$|\delta_r| \leq 2u \left\{ |f_{n+1-r, n+1}^{-1}| + |\alpha_r| |f_{n+2-r, n+1}^{-1}| + |\delta_r| \right. \\ \left. + \sum_{s=n+1-r}^{n-2} \left(|f_{n+1-r, s+1}^{-1}| + |\alpha_r| |f_{n+2-r, s+1}^{-1}| \right) |\delta_{n-s}| \right\} + \mathcal{O}(u^2),$$

Dado que $u \cdot \delta_k = \mathcal{O}(u^2)$ para $n \cdot u \ll 1$, y hasta segundo orden en u , se obtiene

$$|\delta_r| \leq 2u \left(|f_{n+1-r, n+1}^{-1}| + |\alpha_r| |f_{n+2-r, n+1}^{-1}| \right) + \mathcal{O}(u^2)$$

Usando (2) y (41) y denotando $\widehat{\phi}_r(x) - \phi_r(x) \equiv d_r$, se tiene

$$\begin{cases} d_0 = 0, & d_1 = 0 \\ d_r = \alpha_r d_{r-1} + \beta_r d_{r-2} + \delta_r. \end{cases}$$

Si llamamos $Q_k^r = d_{r-k}$, se obtendrá $Q_0^r = d_r$ mediante

$$\begin{cases} Q_r^r = 0, & Q_{r-1}^r = 0, \\ Q_s^r = \alpha_{r-s} Q_{s+1}^r + \beta_{r-s} Q_{s+2}^r + \delta_{r-s}, & s = r-2, \dots, 0. \end{cases}$$

Esta relación puede interpretarse como la aplicación del algoritmo de Clenshaw a un polinomio de grado $r-2$ dado por $\sum_{i=0}^{r-2} \delta_{r-i} D_i^r(x)$, expresado como una suma finita de una nueva familia de polinomios ortogonales $\{D_0^r(x), \dots, D_{r-2}^r(x)\}$ determinada por la recurrencia lineal triple

$$\begin{aligned} D_0^r(x) &= 1, \\ D_1^r(x) &= \alpha_{r-2}(x), \\ D_s^r(x) - \alpha_{r-s-1}(x) D_{s-1}^r(x) - \beta_{r-s-2} D_{s-2}^r(x) &= 0, \quad s = 2, \dots, r-2, \end{aligned} \tag{43}$$

con $\alpha_i(x)$ y β_i los coeficientes de la recurrencia triple (2) que nos define la familia $\{\phi_k(x)\}$. Por tanto, el error de redondeo en la evaluación de los polinomios ortogonales originales $\phi_r(x)$ vendrá expresado como

$$|\widehat{\phi}_r(x) - \phi_r(x)| = |d_r| \leq \sum_{i=0}^{r-2} |\delta_{r-i}| |D_i^r(x)|, \quad \text{para } r \geq 2. \tag{44}$$

Una vez se ha considerado la contribución de la evaluación de la familia de polinomios ortogonales se ha de considerar el error en el producto interno, es decir, la diferencia entre $p_n(x)$ (1) y

$$\widehat{p}_n(x) = \text{fl} \left(\sum c_i \widehat{\phi}_i(x) \right) = \text{fl} \left(\sum c_i \text{fl}(\phi_i(x)) \right). \tag{45}$$

Como resultado final, si juntamos (44) y (45) se obtiene

$$|\widehat{p}_n(x) - p_n(x)| \leq \sum_{i=0}^n |d_i| |c_i| + 2u \cdot \sum_{i=0}^n (n-i) |\phi_i(x)| |c_i| + \mathcal{O}(u^2).$$

De donde reteniendo términos hasta orden dos en u se obtiene el siguiente resultado:

Teorema 2 *El error de redondeo en la evaluación de una suma finita de polinomios ortogonales $p_n(x) = \sum_{k=0}^n c_k \phi_k(x)$ usando el algoritmo de Forsythe está acotado por*

$$|\hat{p}_n(x) - p_n(x)| \leq u \sum_{i=0}^n |c_i| (|d_i^*| + 2(n-i)|\phi_i(x)|) + \mathcal{O}(u^2) \quad (46)$$

donde

$$\begin{cases} |d_0^*| = 0, & |d_1^*| = 0, \\ |d_r^*| = \sum_{i=0}^{r-2} 2 (|f_{n+i+1-r, n+1}^{-1}| + |\alpha_{r-i}| |f_{n+i+2-r, n+1}^{-1}|) |D_i^r(x)|, & r \geq 2, \end{cases} \quad (47)$$

siendo $f_{r, n+1}^{-1}$ los elementos de la última columna de la matriz \mathcal{F}^{-1} (42) y donde la evaluación de los polinomios ortogonales $D_i^r(x)$ se realiza mediante la recurrencia (43).

Hemos de notar que las cotas anteriores pueden ser particularizadas [7] a familias concretas de polinomios ortogonales, como los polinomios de Chebyshev de primera y segunda especie, polinomios de Legendre, etc, dando cotas más fáciles de interpretar.

4.3 Pruebas numéricas

En esta subsección comparamos las distintas cotas teóricas con simulaciones numéricas de errores de redondeo. Para ello, se realizan 500 simulaciones numéricas de cada caso en las cuales el error de redondeo es "estimulado" perturbando aleatoriamente el último bit significativo después de cada operación aritmética [11, 12]. Después, se toma como resultado de cada prueba el máximo valor absoluto de las 500 simulaciones. Todas las pruebas han sido realizadas usando el lenguaje de programación FORTRAN 77 en una estación de trabajo SUN ULTRASPARG 1 en doble precisión aritmética con unidad de redondeo $u \simeq 1.1 \times 10^{-16}$ (dado que se perturba el último bit significativo esto significa que la unidad de redondeo efectiva es $u \simeq 2.2 \times 10^{-16}$). Así mismo, se han fijado dos conjuntos de coeficientes para los polinomios a evaluar: conjunto S1, en el que los coeficientes decrecen con monotonía y vienen dados por $c_i = 1/(i+1)^2$ y conjunto S2, con coeficientes aleatorios con media 0 y varianza 1. Notemos que la situación del conjunto S1, es decir, tener coeficientes que decrecen, es muy habitual en aproximaciones de funciones mediante polinomios ortogonales. Estas especificaciones son válidas en todas las simulaciones de errores de redondeo realizadas en este artículo.

En primer lugar resulta interesante comparar las cotas clásicas (31) dadas por el condicionamiento de las matrices involucradas, y por otro, lado las nuevas cotas dadas en los Teoremas 1 y 2. En la tabla 3 se analizan ambas cotas para la evaluación de un polinomio de grado 200 escrito como una suma finita de polinomios de Gegenbauer y usando doble precisión aritmética. Dado que la cota clásica dada por el condicionamiento

Tabla 3.—Cotas teóricas en la evaluación, usando el algoritmo de Clenshaw, de un polinomio de grado $n = 200$ escrito como una suma finita de polinomios de Gegenbauer; cond (condicionamiento de la matriz) y T1 (cota del Teorema 1).

		$x = 0.$	0.3	0.7	0.9	0.99	1.
$\lambda = 1$	T1 : S1	5.6E-16	3.3E-13	2.3E-13	2.1E-13	2.0E-13	2.0E-13
	T1 : S2	5.2E-13	8.2E-14	9.5E-14	9.8E-14	9.9E-14	9.9E-14
	cond	2.8E-14	4.9E-14	8.5E-14	1.6E-14	5.1E-14	1.0E-11
$\lambda = 5$	T1 : S1	1.7E-14	3.3E-13	2.4E-13	2.1E-13	2.2E-13	2.2E-13
	T1 : S2	4.3E-13	8.7E-14	1.0E-13	1.0E-13	1.0E-13	1.1E-13
	cond	6.8E-09	1.1E-08	5.9E-08	7.8E-07	2.3E-04	4.9E+00

nos proporciona una cota relativa, hemos dividido la cota del Teorema 1 por $|p_n(x)|$. Se observa que cuando la matriz del sistema está bien condicionada la cota clásica da buenas acotaciones, del orden de la nueva cota. Pero cuando el condicionamiento crece, como sucede cuando aumenta el parámetro λ que nos define la familia de polinomios de Gegenbauer o bien cuando evaluamos cerca de $x = \pm 1$, la cota clásica da acotaciones demasiado conservativas, indicando en algunos casos que el algoritmo no es estable, como por ejemplo en el caso $x = 1$ y $\lambda = 5$ en el cual $u \cdot \text{cond}(\mathcal{S}) > 1$, cuando en realidad lo es para este caso particular.

Es importante remarcar el hecho de que cuando el valor del parámetro λ crece los polinomios de Gegenbauer toman valores cada vez más grandes, siendo este incremento muy notable, sobre todo en los extremos del intervalo. Por ello, el desarrollar una función en serie de polinomios de Gegenbauer con $\lambda > 1$ sólo será recomendable cuando la función experimente grandes incrementos de su valor en los extremos del intervalo. En otro caso, el error absoluto en la evaluación del polinomio será muy grande, así como el error relativo y, por lo tanto, todo algoritmo de evaluación dará grandes errores de redondeo debido a que la base de polinomios escogida no ha sido en modo alguno la más adecuada. En los casos considerados en el presente artículo se han tomado coeficientes (conjuntos S1 y S2) que no corresponden a ninguna función en particular. Si evaluamos estos polinomios tendrán un comportamiento similar al de la familia de polinomios ortogonales escogida, es decir, su valor absoluto en los extremos del intervalo es muy grande, dándonos por tanto buenas cotas de error relativo cuando usamos los algoritmos de evaluación.

En la figura 5 se presentan los resultados obtenidos al usar las acotaciones de los Teoremas 1 y 2 y al realizar simulaciones numéricas en la evaluación de un polinomio de

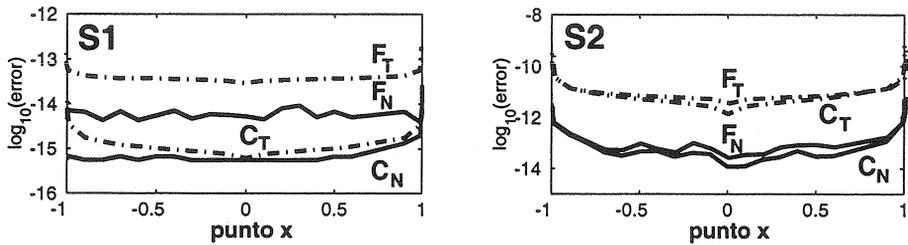


Figura 5.—Cotas teóricas de error (subíndice T) y pruebas numéricas (subíndice N) en la evaluación, mediante los algoritmos de Clenshaw (C) y Forsythe (F), del polinomio $\sum_{i=0}^{200} c_i T_i(x)$.

grado 200 escrito como una suma finita de polinomios de Chebyshev de primera especie ($T_n(x)$). En primer lugar resulta evidente el menor error exhibido por el algoritmo de Clenshaw, especialmente en el caso de usar los coeficientes S1 debido a que en el algoritmo de Forsythe se realiza la adición de los coeficientes del primero al último, situación no aconsejada al ser decrecientes los coeficientes.

En las figuras 6, 7 y 8 se analiza el comportamiento en el caso de tener polinomios de Gegenbauer. En la figura 6 se presentan cotas teóricas (Teoremas 1 y 2) de error absoluto y relativo y simulaciones numéricas. Las figuras de error absoluto (tanto las acotaciones como las simulaciones) exhiben un comportamiento creciente según aumenta el valor del parámetro λ y según nos acercamos a los extremos del intervalo $[-1, 1]$. Sin embargo, los resultados para el error relativo indican que el error de redondeo afecta en realidad a pocas cifras significativas. Este fenómeno, el notable aumento del error absoluto de redondeo que se aprecia en los extremos del intervalo y según crece el parámetro λ en la figura 6, se debe a que los polinomios de Gegenbauer toman su máximo valor absoluto en los extremos del intervalo cuando $\lambda > 0$ y a que dicho máximo aumenta enormemente con λ ya que $C_n^\lambda(1) = (2\lambda)_n/n!$ para $\lambda > 0$ [36], como puede verse en la figura 7. Comportamiento que luego reproducen las cotas y simulaciones numéricas. Notemos, como ya ha sido señalado anteriormente, que el error relativo es pequeño ya que el polinomio usado en las comparaciones toma valores semejantes en tamaño a los de la familia de polinomios ortogonales considerada, en caso contrario, los algoritmos de evaluación darían enormes errores de redondeo pero en estos casos el problema se debería a una mala elección de la base de polinomios.

Las figuras anteriores muestran que las cotas teóricas reproducen el comportamiento de las simulaciones numéricas y como, en general, el algoritmo de Clenshaw resulta más estable que el algoritmo de Forsythe. Sin embargo, en algunos puntos se aprecia como el algoritmo de Forsythe puede poseer un menor error de redondeo, como es el caso de

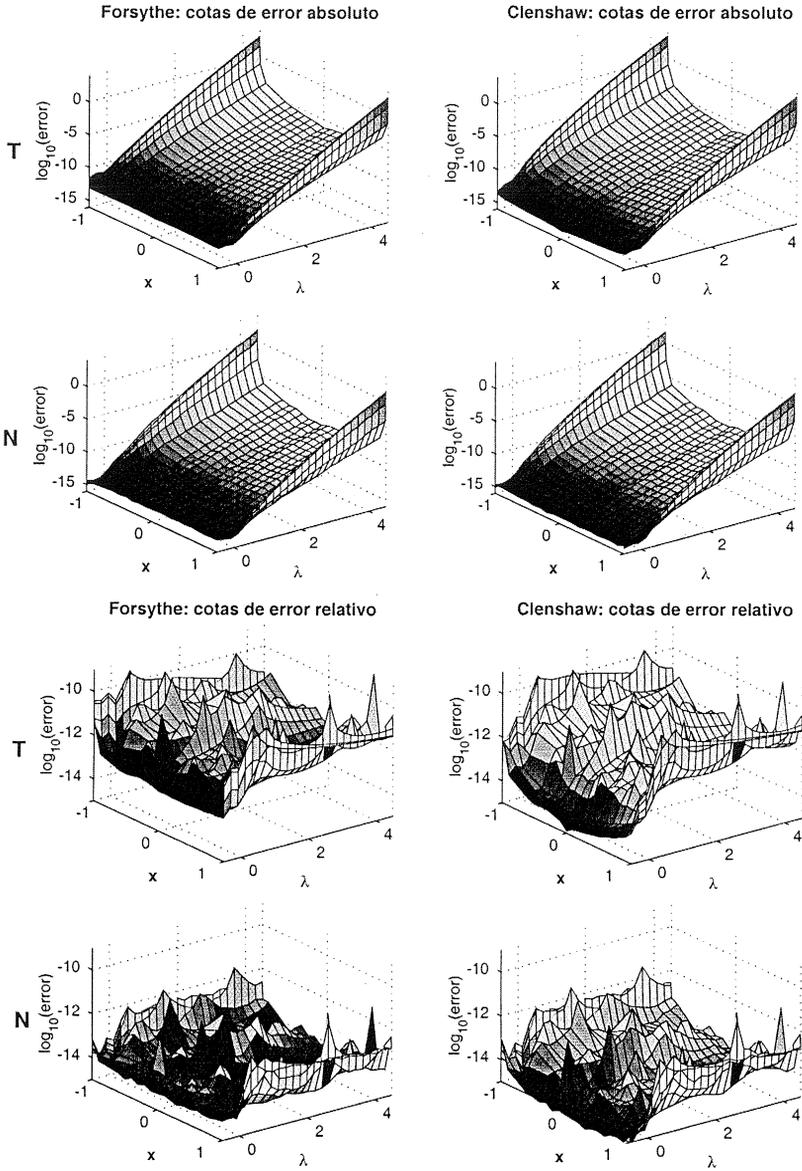


Figura 6.—Error relativo y absoluto, obtenido usando pruebas numéricas (N) y cotas teóricas (T), en la evaluación de polinomios escritos como una suma finita de polinomios de Gegenbauer con coeficientes aleatorios (conjunto S2).

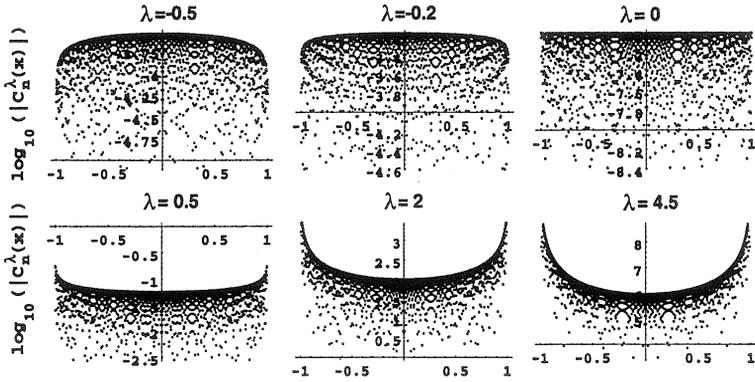


Figura 7.—Valor absoluto de varios polinomios de Gegenbauer de grado 200 ($C_{200}^\lambda(x)$).

valores de x cercanos a los extremos del intervalo para valores de $\lambda > 1$. En la figura 8 se representa el cociente entre el error de redondeo del algoritmo de Clenshaw y el de Forsythe (tomando estimaciones teóricas y numéricas del error). En el caso analizado se usa un polinomio de grado 200 y se evalúa en $x = -0.99$ para varias familias de polinomios de Gegenbauer. Se observa como cuando aumenta el valor del parámetro λ el algoritmo de Forsythe posee un menor error, eso sí, la diferencia es muy pequeña y en general es más preciso el algoritmo de Clenshaw.

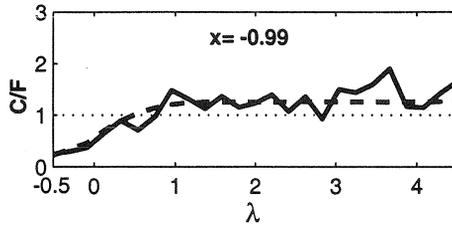


Figura 8.—Cociente entre los errores de redondeo de los algoritmos de Clenshaw y de Forsythe (C/F) usando cotas teóricas (línea discontinua) y pruebas numéricas (línea continua).

5. Estabilidad numérica: algoritmos paralelos

En esta sección analizamos el comportamiento de los algoritmos paralelos introducidos en la sección 2. En la mayor parte de los casos el análisis se realiza usando la formulación matricial de los algoritmos.

Paso 1: Resolver $\mathcal{I} \mathbf{y} = \mathbf{e}_{n+1}$.

Paso 2: Resolver en paralelo $\mathcal{R} \phi^* = \mathbf{y}$.

Paso 3: Evaluación del polinomio mediante el producto interno

$$p_n(x) = \sum_{m=0}^{p-1} \left(\sum_{j=0}^{k-1} c_{jp+m} T_{jp+m}(x) \right) = \sum_{m=0}^{p-1} \mathbf{c}_k^m (\phi_k^m)^\top. \quad (53)$$

En lo que sigue, usaremos ϕ y \mathbf{c} en lugar de ϕ^* y \mathbf{c}^* .

Usando las cotas de error de sistemas triangulares tridiagonales y la forma particular de las matrices involucradas, es fácil obtener [10] cotas de error backward del algoritmo CHPF

Teorema 3 *Los valores calculados $\hat{p}_n(x)$ usando el algoritmo CHPF satisfacen*

$$\hat{p}_n(x) = (\mathbf{c} + \Delta \mathbf{c})^\top \hat{\phi}, \quad (54)$$

con $|\Delta c_{ip+m}| \leq \gamma_{(k+p)-(i+m)} |c_{ip+m}| + \mathcal{O}\{u^2\}$ y donde $\hat{\phi}$ es la solución calculada del sistema $\mathcal{F} \phi = \mathbf{e}_{n+1}$, la cual verifica

$$(\mathcal{F} + \Delta \mathcal{F}) \hat{\phi} = \mathbf{e}_{n+1}, \quad |\Delta \mathcal{F}| \leq \gamma_6 |\mathcal{I} \mathcal{R}|. \quad (55)$$

A su vez, usando el Teorema 3 se obtienen cotas de error forward:

$$\frac{\|\delta \phi\|_\infty}{\|\hat{\phi}\|_\infty} \leq \gamma_6 \text{cond}(\mathcal{I} \mathcal{R}).$$

Hemos de remarcar que en el algoritmo CHPF también hemos de considerar el error de redondeo originado en el producto interno (53). Así, usando las técnicas clásicas para este tipo de operaciones se obtiene la acotación

$$|p_n(x) - \text{fl}(p_n(x))| = u \cdot \sum_{m=0}^{p-1} \left\{ \sum_{j=0}^{k-1} (2k+p-2-2j-m) |c_{jp+m}| |\phi_{jp+m}(x)| \right\} + \mathcal{O}(u^2). \quad (56)$$

En todos los análisis realizados hemos supuesto que el valor del polinomio $T_p(x)$ viene dado sin errores de redondeo, pero evidentemente esta situación no es realista ya que dicho polinomio ha de ser calculado bien mediante el algoritmo de Clenshaw o bien mediante la recurrencia triple. Nosotros supondremos que la evaluación se realiza usando el algoritmo de Clenshaw. Si procedemos de modo análogo que en el caso del algoritmo CHPC, pero ahora con \mathcal{S}_1 (50), se tiene

$$\frac{\|\delta T_p(x)\|_\infty}{\|\hat{T}_p(x)\|_\infty} \leq \gamma_2 \text{cond}(\mathcal{S}_1). \quad (57)$$

Como

$$\mathcal{S}_1^{-1} = (s_{ij}^{-1}) = \begin{cases} 0, & j < i, \\ U_{j-i}(x), & j \geq i, \end{cases}$$

y teniendo en cuenta las acotaciones [36, 42]

$$\begin{aligned} \|U_i(x)\|_\infty &\leq i + 1, \\ |U_i(x)| &= \frac{|\text{sen}((i+1)\arccos x)|}{|\text{sen}(\arccos x)|} \leq \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, \quad x \neq \pm 1, \end{aligned} \quad (58)$$

obtenemos

$$\text{cond}(\mathcal{S}_1) \leq 4 \sum_{i=0}^p |U_i(x)| \leq \begin{cases} 2(p+1)(p+2), & x \in [-1, 1], \\ \frac{4(p+1)}{\sqrt{1-x^2}}, & x \neq \pm 1. \end{cases} \quad (59)$$

Usando estas acotaciones del error en la evaluación de $T_p(x)$ obtenemos las nuevas cotas de error del algoritmo CHPC (en el algoritmo CHPF se realizarían cambios similares).

Teorema 4 *El error relativo forward en la solución \mathbf{q} del sistema $\mathcal{S}\mathbf{q} = \mathbf{c}$, obtenida usando el algoritmo CHPC, está acotado por:*

$$\frac{\|\delta\mathbf{q}\|_\infty}{\|\hat{\mathbf{q}}\|_\infty} \leq u \cdot \min \left\{ 2 + 4(p+1)(p+2), 2 + \frac{8(p+1)}{\sqrt{1-x^2}} \right\} \text{cond}(\mathcal{S}_p) + \mathcal{O}(u^2). \quad (60)$$

Notemos que la ecuación (60) nos indica que debemos esperar un incremento del error para $x = \pm 1$. Otra cuestión interesante es comparar las cotas del error de los algoritmos paralelos y secuenciales. En el caso secuencial se tiene la cota dada por (31) y siguiendo un análisis análogo al de \mathcal{S}_1 , ya que $T_p(x) \in [-1, 1]$, se obtiene

$$\begin{aligned} \text{cond}(\mathcal{S}) &\leq 4 \sum_{j=0}^n |U_j(x)| \leq \min \left\{ 2(n+1)(n+2), \frac{4(n+1)}{\sqrt{1-x^2}} \right\}, \\ \text{cond}(\mathcal{S}_p) &\leq 4 \sum_{i=0}^{k-1} |U_i(T_p(x))| \leq \min \left\{ 2k(k+1), \frac{4k}{\sqrt{1-T_p(x)^2}} \right\}. \end{aligned} \quad (61)$$

Así, una estimación del cociente entre el error paralelo y secuencial vendrá dada por

$$\frac{\|\delta q_{\text{paralelo}}\|_\infty}{\|\delta q_{\text{secuencial}}\|_\infty} \sim \frac{(1 + 4 \sum_{i=0}^p |U_i(x)|) \sum_{j=0}^{k-1} |U_j(T_p(x))|}{\sum_{i=0}^p |U_i(x)|}. \quad (62)$$

En la figura 9 representamos la estimación (62) para la evaluación de un polinomio de grado $n = 3199$ escrito como una suma finita de polinomios de Chebyshev de primera especie y variando el número de procesadores p . De estas estimaciones se puede esperar, además de un incremento del error cerca de los extremos del intervalo ($x \pm 1$), un

incremento del error en el caso paralelo en los extremos relativos de $T_p(x)$, es decir, para $x_i = \cos(m\pi/p)$, $m = 1, \dots, p-1$. La razón se debe a que el algoritmo paralelo evalúa en cada procesador un polinomio en el punto $T_p(x)$. Así mismo, al aumentar el número de procesadores aumenta el número de puntos en los que se produce un incremento del error pero a su vez este incremento disminuye en magnitud.

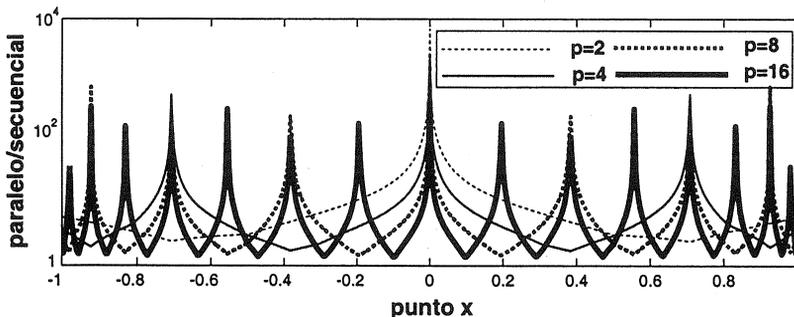


Figura 9.— Cociente entre las cotas teóricas del error de redondeo del algoritmo paralelo CHPC y el secuencial de Clenshaw para la evaluación de un polinomio de grado $n = 3199$ escrito como una suma finita de polinomios de Chebyshev de primera especie.

Otra forma de analizar estos algoritmos es seguir con el tipo de análisis realizado para el caso secuencial. Por ello, usaremos el Teorema 1 [7] con los coeficientes $\alpha_i = 2T_p(x)$ e introducimos el error de redondeo E_{T_p} en la evaluación de $T_p(x)$ (57). Si además tenemos en cuenta el Paso 3 del algoritmo CHPC, tendremos

$$\sum_{m=0}^{p-1} \left\{ \sum_{s=0}^{k-1} (p-1-m) |T_{sp+m}(x)| |c_{sp+m}| \right\}.$$

Así, reuniendo estas acotaciones se obtiene

Teorema 5 *El error de redondeo en la evaluación en paralelo con p procesadores del polinomio $p_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i T_i(x)$ usando el algoritmo CHPC está acotado por*

$$|\hat{p}_n(x) - p_n(x)| \leq u \cdot \sum_{m=0}^{p-1} \left\{ \sum_{s=0}^{k-1} \rho_s^m(x) |c_{sp+m}| \right\} + \mathcal{O}(u^2),$$

donde

$$\begin{cases} \rho_0^m(x) = (p+3-m) |T_m(x)| \\ \rho_s^m(x) = (p+3-m) |T_{sp+m}(x)| + \\ \sum_{j=1}^{s-1} (2|U_{s-j}(x)| + (3+E_{T_p}) |2T_p(x)| |U_{s-j-1}(x)|) |T_{jp+m}(x)|, \end{cases}$$

siendo E_{T_p} el error de redondeo en la evaluación de $T_p(x)$.

5.1.1 PRUEBAS NUMÉRICAS

Con el fin de analizar el comportamiento de las cotas aquí presentadas hemos realizado diversas pruebas numéricas. Como en las pruebas de secciones anteriores hemos usado una estación de trabajo SUN ULTRASPARC 1 y dos conjuntos de coeficientes: S1 y S2. En todas las simulaciones hemos usado un polinomio de grado $n = 3199$ escrito como una suma finita de polinomios de Chebyshev de primera especie. Dado que los resultados para los algoritmos CHPC y CHPF han sido similares, sólo presentamos el caso de la evaluación mediante el algoritmo CHPC (así mismo el caso de los polinomios de Chebyshev de primera y segunda especie dan resultados análogos).

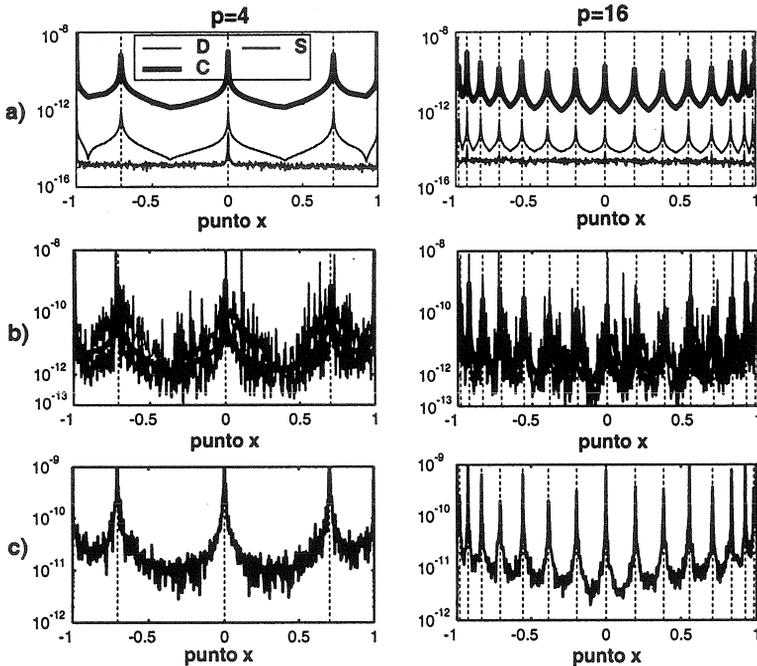


Figura 10.—Error relativo en la evaluación de un polinomio usando los conjuntos de coeficientes S1 (a) y S2 (b). Error absoluto en la evaluación de un polinomio usando el conjunto S2 (c). (C cota clásica usando el condicionamiento, D cota directa (Teorema 5) y S simulaciones numéricas).

En la figura 10, gráficas (c), se observa claramente el incremento del error en los puntos predichos por la teoría, es decir, los extremos relativos de $T_p(x)$, los cuales están marcados con líneas verticales discontinuas. En el caso de tomar el conjunto S1 estos incrementos ya no son tan patentes debido a que para este polinomio el error de redondeo

siendo $\mathcal{C} = \text{diag}\{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_p\}$, $\mathcal{A} = \text{diag}\{\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_p\}$, $\mathcal{B} = \text{diag}\{\mathcal{B}_1, \dots, \mathcal{B}_p\}$, y

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{D}_1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \mathcal{D}_{p-1} \\ & & & & 0 \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto, el algoritmo PC se puede describir como

Paso 1: Calcular en paralelo: $\mathcal{S} = \mathcal{L}\mathcal{U}$, siendo

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} \mathcal{C} & 0 \\ \mathcal{B} & \mathbb{I}_{2p} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{U} = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{n-2p} & \mathcal{R} \\ 0 & \mathcal{T} \end{pmatrix},$$

con $\mathcal{R} = \mathcal{C}^{-1}\mathcal{D}$ y $\mathcal{T} = \mathcal{A} - \mathcal{B}\mathcal{C}^{-1}\mathcal{D}$.

Paso 2: Resolver $\mathcal{L}\mathbf{y} = \mathbf{c}$.

Paso 3: Resolver $\mathcal{U}\mathbf{q} = \mathbf{y}$.

Paso 4: $\sum_{r=0}^n c_r \phi_r(x) = \beta_2 q_{p(k-2)+2} + q_{p(k-2)+1} \phi_1(x) + c_0$.

Usando las cotas clásicas en la resolución de los sistemas triangulares y después de varias acotaciones, se llega a

$$(\mathcal{L} + \Delta\mathcal{L})\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{c}, \quad |\Delta\mathcal{L}| \leq \gamma_3 |\mathcal{L}|,$$

$$(\hat{\mathcal{U}} + \Delta\mathcal{U})\hat{\mathbf{q}} = \hat{\mathbf{y}}, \quad |\Delta\mathcal{U}| \leq \gamma_4 |\hat{\mathcal{U}}|.$$

y a una cota de error backward del algoritmo PC:

$$(\mathcal{S} + \Delta\mathcal{S})\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{c}, \quad |\Delta\mathcal{S}| \leq \gamma_9 |\mathcal{L}| |\hat{\mathcal{U}}|. \quad (63)$$

Con intención de obtener cotas de error forward vamos a buscar cotas del producto $|\mathcal{L}| |\hat{\mathcal{U}}|$. Después de varias manipulaciones se llega a [18]:

$$|\mathcal{L}| |\hat{\mathcal{U}}| \leq (2 + \gamma_2) \begin{pmatrix} |\mathcal{C}| & |\mathcal{D}| \\ |\mathcal{B}| & |\mathcal{A}| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{n-2p} & |\widehat{\mathcal{R}}| \\ 0 & \mathbb{I}_{2p} \end{pmatrix}. \quad (64)$$

que usada junto con (63) nos da la expresión

$$|\delta\mathbf{q}| = |\mathcal{S}^{-1} \Delta\mathcal{S} \hat{\mathbf{q}}| \leq \gamma_{18} |\mathcal{S}^{-1}| |\mathcal{S}| \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{n-2p} & |\widehat{\mathcal{R}}| \\ 0 & \mathbb{I}_{2p} \end{pmatrix}, \quad (65)$$

que nos prueba el siguiente teorema:

Teorema 6 Una cota relativa del error forward, usando el algoritmo PC, en la obtención de la solución \hat{q} del sistema $\mathcal{S}q = c$ viene dada por

$$\frac{\|\delta q\|_\infty}{\|\hat{q}\|_\infty} \leq \gamma_{18} \left(1 + \|\widehat{\mathcal{R}}\|_\infty\right) \text{cond}(\mathcal{S}).$$

Dada la expresión de la cota del Teorema 6 resulta interesante analizar el comportamiento del término $\|\widehat{\mathcal{R}}\|_\infty$. Teniendo en cuenta que $\delta \mathcal{R}_i = \widehat{\mathcal{R}}_i - \mathcal{R}_i = -\mathcal{C}_i^{-1} \Delta \mathcal{C}_i \widehat{\mathcal{R}}_i$ y que $|\Delta \mathcal{C}_i| \leq \gamma_2 |\mathcal{C}_i|$, se tiene

$$\|\widehat{\mathcal{R}}\|_\infty \leq \|\mathcal{C}^{-1} \mathcal{D}\|_\infty + \gamma_2 \|\mathcal{C}^{-1} |\mathcal{C}|\|_\infty \|\widehat{\mathcal{R}}\|_\infty,$$

y por tanto

$$\|\widehat{\mathcal{R}}\|_\infty \leq \frac{\|\mathcal{C}^{-1} \mathcal{D}\|_\infty}{1 - \gamma_2 \text{cond}(\mathcal{C})} = \|\mathcal{C}^{-1} \mathcal{D}\|_\infty + \mathcal{O}(u). \quad (66)$$

Notemos que los elementos de la matriz \mathcal{R} no son arbitrarios, son los coeficientes que aparecen en la recurrencia a tres términos (2) que define la familia de polinomios ortogonales que se utiliza en cada caso. Por tanto, centraremos nuestro estudio a una clase particular de polinomios ortogonales, los polinomios de Gegenbauer con parámetro $\lambda \in (-1/2, 1]$ (intervalo que engloba, por ejemplo, a los polinomios de Chebyshev y de Legendre). En este caso particular los coeficientes α_i y β_i de la triple recurrencia (2) verifican $\alpha_i \in [-2, 2]$ con $|\alpha_i| \nearrow 2$ y $\beta_i \in [-1, 0]$ con $\beta_i \searrow -1$. Esto implica que el caso particular con mayores coeficientes es para $\alpha_i = 2x$ y $\beta_i = -1$, que corresponde con los polinomios de Chebyshev de segunda especie $U_n(x)$ (caso límite en el intervalo tomado, $\lambda = 1$). Por tanto $\|\mathcal{R}|_{\mathcal{C}_n^\lambda}\|_\infty \leq \|\mathcal{R}|_{U_n}\|_\infty$, con lo que sólo analizaremos el caso límite.

Volviendo a $\|\widehat{\mathcal{R}}\|_\infty$, dado que en general $u \cdot \text{cond}(\mathcal{C}) \ll 1$ entonces podremos estimar $\|\widehat{\mathcal{R}}\|_\infty$ (66) mediante $\|\mathcal{C}^{-1} \mathcal{D}\|_\infty$. En este producto de matrices se tiene una matriz diagonal por bloques \mathcal{C}^{-1} compuesta por p submatrices triangulares superiores $\mathcal{C}_i^{-1} \in \mathbb{R}^{(k-2) \times (k-2)}$ y otra matriz diagonal por bloques \mathcal{D} compuesta por $p-1$ submatrices $\mathcal{D}_i \in \mathbb{R}^{(k-2) \times 2}$ con únicamente tres elementos no nulos. Así, los elementos del producto matricial tomarán el aspecto

$$-\beta_{ik+1} \cdot c_{i+1,(j,k-3)}^{-1} - \alpha_{ik+1} \cdot c_{i+1,(j,k-2)}^{-1}, \quad \text{ó} \quad -\beta_{ik+2} \cdot c_{i+1,(j,k-2)}^{-1},$$

con $c_{i+1,(j,k-3)}^{-1}$ el elemento $(j, k-3)$ de \mathcal{C}_{i+1}^{-1} . En el caso particular de tener los polinomios $U_i(x)$, y usando las cotas dadas en (58), tendremos,

$$\|\mathcal{C}^{-1} \mathcal{D}\|_\infty \leq \min \left\{ \frac{2|x|+1}{\sqrt{1-x^2}}, 3(k+1) \right\}, \quad (67)$$

cota que en general toma el valor dado por $(2|x|+1)/\sqrt{1-x^2}$.

La cota (67) nos indica que los algoritmos paralelos serán tan estables como los secuenciales, salvo un cierto incremento del error cerca de los extremos. Incremento que

disminuye en magnitud según aumenta el número de procesadores p . Así mismo, notemos que para el algoritmo PC las cotas no dependen del número de procesadores si estamos en el interior del intervalo.

En el caso de usar el algoritmo PF el análisis anterior sigue siendo válido, salvo que ahora hay que tener en cuenta el **Paso 8** del algoritmo (el producto interno). En este caso el error de redondeo se minimizará según aumenta el número de procesadores debido a que la suma se divide en p subsumas. Por lo tanto, este algoritmo es sensible al número de procesadores involucrados, disminuyendo el error cuantos más procesadores usemos.

5.2.1 PRUEBAS NUMÉRICAS

En las figuras 11 y 12 analizamos el comportamiento de los algoritmos en la evaluación de un polinomio de grado $n = 4096$ escrito como una suma finita de polinomios de Legendre. Las gráficas muestran el cociente entre los errores de redondeo para los algoritmos paralelos y el secuencial de Clenshaw.

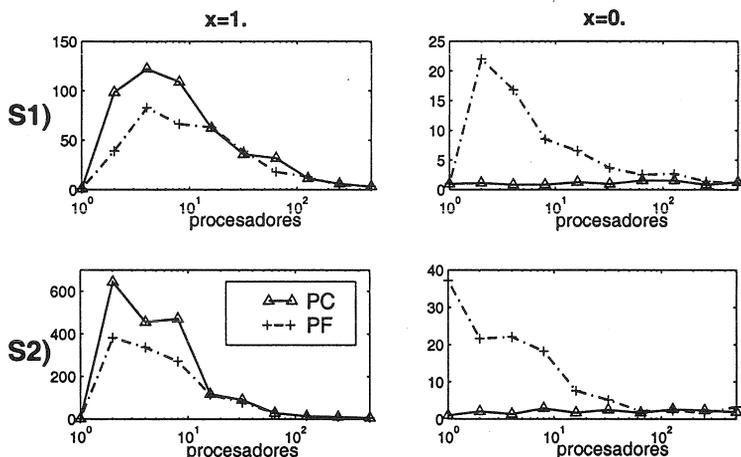


Figura 11.—Cociente entre el error de redondeo en los algoritmos paralelos PC y PF y el algoritmo de secuencial de Clenshaw usando los conjuntos de coeficientes S1 y S2.

En la figura 11 se observa como cuando evaluamos en puntos cercanos a los extremos del intervalo ($x = \pm 1$) el error en los algoritmos paralelos se incrementa pero, así mismo, se observa como este incremento disminuye al aumentar el número de procesadores p , tal y como indican las cotas teóricas. En el caso de evaluar en el interior del intervalo (en la gráfica se recoge el punto $x = 0$) el algoritmo PF presenta el mismo comportamiento ya que para este algoritmo hay que tener en cuenta el producto interno final (**Paso 8**), el cual introduce una nueva fuente de errores de redondeo, errores que decrecen al dividir

la evaluación del producto interno en p partes, con lo que el error decrece al aumentar p . En cambio, el algoritmo PC es insensible al número de procesadores cuando evaluamos en el interior del intervalo, situación también recogida por las cotas teóricas.

En la figura 12 presentamos los resultados usando exclusivamente el conjunto S1 de coeficientes. Para comparar también hemos analizado los algoritmos MPC y MPF. Observamos que los algoritmos PC y MPC presentan el mismo comportamiento, mientras que en el caso de los algoritmos PF y MPF el algoritmo PF presenta un menor error. Así mismo, aparece el comportamiento señalado anteriormente, al aumentar el número de procesadores el error decrece.

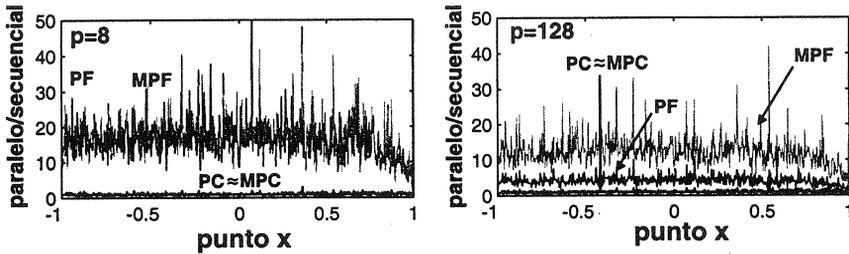


Figura 12.—Cociente entre el error de redondeo en los algoritmos paralelos PC, MPC, PF y MPF y el algoritmo secuencial de Clenshaw usando el conjunto S1 de coeficientes y dependiendo del punto de evaluación x .

Resumiendo, se observa en las pruebas realizadas como los algoritmos paralelos poseen un comportamiento similar a los algoritmos secuenciales, especialmente los algoritmos PC y MPC, tal y como indican las cotas teóricas. Es importante remarcar que los algoritmos PF y MPF se comportan mejor que su algoritmo secuencial (algoritmo de Forsythe) debido a la división de la evaluación final en p subsumas.

6. Conclusiones

En el presente artículo se ha realizado un estudio completo de la algorítmica necesaria para evaluar polinomios ortogonales en secuencial y en paralelo. Así, se han presentado algoritmos secuenciales clásicos y nuevos algoritmos paralelos de evaluación de polinomios escritos como sumas finitas de polinomios ortogonales. Por un lado, los estudios de eficiencia de los algoritmos paralelos demuestran su utilidad en la evaluación en paralelo de polinomios y recurrencias triples. Por otro lado, los estudios de estabilidad numérica realizados para los algoritmos secuenciales indican que su comportamiento no es tan malo como pudiera esperarse debido a la evolución del condicionamiento de la matriz de coeficientes. Las nuevas cotas dan aceptables errores de redondeo relativos. Además, los estudios realizados

sobre los algoritmos paralelos establecen que en general su estabilidad numérica es similar a la de los algoritmos secuenciales, salvo para un conjunto predeterminado de puntos para los casos CHPC y CHPF.

Agradecimientos

El autor quiere expresar su agradecimiento al Dr. J. Sabadell por su colaboración en el desarrollo de algoritmos paralelos para evaluar sumas finitas de polinomios de Chebyshev (Sección 3.1) y al Dr. P. Yalamov por su colaboración en el estudio de la estabilidad numérica de los algoritmos paralelos para evaluar sumas finitas de polinomios ortogonales genéricos (Sección 5.2).

El autor ha sido parcialmente financiado por el Ministerio de Educación y Ciencia (proyecto #ESP99-1074-CO2-01), por el Centre National d'Études Spatiales de Toulouse (France) y por el TRACS programme (Training and Research on Advanced Computing Systems), referencia ERB-FMGE-CT95-0051, Training and Mobility of Researchers (DG-XII TMR) Programme of the European Community, gracias al cual el autor realizó una estancia en el Department of Mathematics de la Heriot-Watt University (Edinburgh) y en el Edinburgh Parallel Computing Centre (EPCC), University of Edinburgh (Scotland).

Referencias

- [1] M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications, Inc, New York, (1965).
- [2] R. Askey, *Orthogonal Polynomials and Special Functions*, SIAM, Philadelphia, (1975).
- [3] R. Barrio, Minimax Chebyshev coefficients of the real dilogarithm, *Rev. Acad. Ciencias de Zaragoza*, **52**, 51-54, (1997).
- [4] R. Barrio, A matrix analysis of the stability of the Clenshaw algorithm, *Extracta Math.* **13**, 21-26 (1998).
- [5] R. Barrio, Comparisons of parallel algorithms to evaluate orthogonal series, en *VECPAR'98*, Oporto (Portugal), 45-58, (1998).
- [6] R. Barrio, Polynomial evaluation: algorithms and numerical stability, en *XVI CEDYA/VI CMA*, 915-922, (1999).

- [7] R. Barrio, Stability of the Clenshaw and Forsythe algorithms for the evaluation of orthogonal polynomial series, *Seminario Matemático García de Galdeano*, Sección I, n. 11, Universidad de Zaragoza, (1999).
- [8] R. Barrio, On the A-stability of RK collocation methods based on ultraspherical polynomials, *SIAM J. Numer. Anal.*, **36**, 1291–1303, (1999).
- [9] R. Barrio, Parallel algorithms to evaluate orthogonal polynomial series, *SIAM J. Sci. Comput.*, **21**, 2225–2239, (2000).
- [10] R. Barrio, Stability of parallel algorithms to evaluate Chebyshev series, *Comput. Math. Appl.* (en prensa).
- [11] R. Barrio and J.C. Berges, Analysis of Rounding Errors in the Evaluation of Chebyshev Series, *Report CNES, DGA/T/TI/MS/MN/97-222*, (1997).
- [12] R. Barrio and J.C. Berges, Perturbation simulations of rounding errors in the evaluation of Chebyshev series. *JUCS*, **4**, 561–573, (1998).
- [13] R. Barrio, A. Elipe and M. Palacios, Chebyshev collocation methods for fast orbit determination, *Appl. Math. Comput.*, **99**, 195–207, (1999).
- [14] R. Barrio and J. Sabadell, Parallel Evaluation of Chebyshev Series, en *Eight SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, Minneapolis, Minnesota (USA), Proceedings in Applied Mathematics 94 (CD-ROM), SIAM, (1997).
- [15] R. Barrio and J. Sabadell, Performance Comparisons on Cray T3D/IBM SP2 of a parallel algorithm to evaluate Chebyshev series, en *15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics*, Berlin (Alemania), 523–528, (1997).
- [16] R. Barrio and F. J. Sabadell, A parallel algorithm to evaluate Chebyshev series on a message-passing environment, *SIAM J. Sci. Comp.*, **20**, 964–969, (1998).
- [17] R. Barrio and J. Sabadell, Parallel evaluation of Chebyshev and Trigonometric series, *Comput. Math. Appl.*, **38**, 99–106, (1999).
- [18] R. Barrio and P. Y. Yalamov, Stability of parallel algorithms for polynomial evaluation, enviado a publicación.
- [19] C. de Boor and B. Swartz, Collocation at Gaussian Points, *SIAM J. Numer. Anal.*, **10**, 582–606, (1973).

- [20] J. C. Butcher, The role of orthogonal polynomials in numerical ordinary differential equations, *J. Comput. Appl. Math.*, **43**, 231–242, (1992).
- [21] C.W. Clenshaw, A note on the summation of Chebyshev series, *Math. Tab. Wash.*, **9**, 118–120, (1955).
- [22] C.W. Clenshaw, Chebyshev series for mathematical functions, National Physical Laboratory Mathematical Tables, 5, London H.M.S.O, (1962).
- [23] P. Deuffhard, On Algorithms for the Summation of Certain Special Functions, *Computing*, **17**, 37–48, (1976).
- [24] J. J. Dongarra, I. S. Duff, D. C. Sorensen and H. A. van der Vorst, *Solving Linear Systems on Vector and Shared Memory Computers*, SIAM, Philadelphia, (1991).
- [25] W. S. Dorn, Generalisations of Horner’s rule for polynomial evaluation, *IBM J. Res. Develop.*, **6**, 239–245, (1962). (1962).
- [26] D. Elliott, Error analysis of an algorithm for summing certain finite series, *J. Australian Math. Soc.*, **8**, 213–221, (1968).
- [27] G.E. Forsythe, Generation and use of orthogonal polynomials for data fitting with a digital computer, *J. SIAM*, **5**, 74–88, (1957).
- [28] D. Funaro, *Polynomial Approximation of Differential Equations*, Lecture Notes in Physics, **m8**, Springer-Verlag, (1992).
- [29] W.M. Gentleman, An error analysis of Goertzel’s (Watt’s) method for computing Fourier coefficients, *Comput. J.*, **12**, 160–165, (1969).
- [30] N.J. Higham, The accuracy of solutions to triangular systems, *SIAM J. Numer. Anal.*, **26**, 1252–1265, (1989).
- [31] N. J. Higham, Stability of parallel triangular solvers, *SIAM J. Stat. Comput.*, **16**, 400–413, (1995).
- [32] N.J. Higham, *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*, SIAM, Philadelphia, (1996).
- [33] A. Kiper, Modified Dorn’s Algorithm with Improved Speed-Up, *Lecture Notes in Computer Science*, **1184**, 432–442, (1997).
- [34] K.S. Kölbig, J.A. Mignaco and E. Remiddi, On Nielsen’s generalized polylogarithms and their numerical calculation, *BIT*, **10**, 38–74, (1970).

- [35] L. Li, J. Hu and T. Nakamura, A simple parallel algorithm for polynomial evaluation, *SIAM J. Sci. Comput.*, **17**, 260–262, (1996).
- [36] W. Magnus, F. Oberhettinger and R.P. Soni, *Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics*, Springer-Verlag, Berlin, (1966).
- [37] K. Maruyama, On the parallel evaluation of polynomials, *IEEE Trans. Comput.*, **C-22**, 2–5, (1973).
- [38] J. I. Munro and M. Paterson, Optimal algorithms for parallel polynomial evaluation, *J. Comput. System Sci.*, **7**, 189–198, (1973).
- [39] A.C.R. Newbery, Error analysis for polynomial evaluation, *Math. Comp.*, **28**, 789–793, (1974).
- [40] J. Oliver, An error analysis of the modified Clenshaw method for evaluating Chebyshev and Fourier series, *Math. Comp.*, **20**, 379–391, (1977).
- [41] J. Oliver, Rounding error propagation in polynomial evaluation schemes, *J. Comp. Appl. Math.*, **5**, 85–97, (1979).
- [42] T. Rivlin, *Chebyshev Polynomials*, Second Edition, John Wiley and Sons, New York, (1990).
- [43] J.L. Schonfelder and M. Ramaz, Error Control with Polynomial Evaluation, *IMA Journal of Num. Anal.*, **1**, 105–114, (1980).
- [44] R.D. Skeel, Scaling for numerical stability in Gaussian elimination, *J. Assoc. Comput. Mach.*, **26**, 494–526, (1979).
- [45] F.J. Smith, An algorithm for summing orthogonal polynomial series and their derivatives with applications to curve-fitting and interpolation, *Math. Comp.*, **19**, 33–36, (1965).
- [46] H. H. Wang, A Parallel Method for Tridiagonal Equations, *ACM TOMS*, **7**, 170–183, (1981).
- [47] J.H. Wilkinson, *Rounding Errors in Algebraic Processes*, Notes on Applied Science No. 32, Her Majesty's Stationery Office, London, (1963). Reprinted by Dover, New York, (1994).
- [48] P. Y. Yalamov, Stability of parallel bidiagonal solvers, *Lect. Notes in Comp. Scien.*, **879**, 520–533, (1994).

- [49] P. Y. Yalamov, Stability of a Partitioning Algorithm for Bidiagonal Systems, *Parallel Computing*, **23**, 333-348, (1997).

Aproximación grupo teórica a los Hamiltonianos A -relacionados *

Arturo Ramos Gutiérrez

Departamento de Física Teórica. Universidad de Zaragoza, 50009, Zaragoza.

* Premio de la Academia a la investigación (1999-2000)

Resumen

Mostramos que la fórmula de diferencias finitas de Fernández, Hussin y Mielnik es un caso particular de aplicación del grupo de transformaciones sobre el conjunto de ecuaciones de Riccati, introducido en un trabajo anterior. Posteriormente desarrollamos una aproximación grupo teórica al problema de los Hamiltonianos A -relacionados. Encontramos una generalización del algoritmo de diferencias finitas, y por ende del método de factorización en Mecánica Cuántica, que relaciona autofunciones de tres Hamiltonianos diferentes. Proporcionamos ejemplos ilustrativos de la teoría, encontrando de este modo nuevos potenciales para los cuales una autofunción y su autovalor correspondiente son conocidos exactamente.

Palabras clave: Algoritmo de diferencias finitas, técnica de entrelazamiento, Hamiltonianos A -relacionados, grupo de transformaciones de las ecuaciones de Riccati, potenciales solubles

1. Introducción

La factorización de operadores Hamiltonianos en términos de operadores diferenciales de primer orden desempeña un importante papel en la búsqueda de sistemas cuánticos cuyos operadores Hamiltonianos poseen un espectro conocido exactamente [1, 2, 3]. Tal método está estrechamente relacionado con la existencia de un operador de entrelazamiento (ver [4, 5] y las referencias allí incluidas), con la Mecánica Cuántica Supersimétrica [6] y las transformaciones de Darboux en este último contexto (ver, por ejemplo, [7, p. 24]). En realidad, la mayoría de los potenciales exactamente solubles pueden obtenerse haciendo uso de una transformación de entrelazamiento apropiada.

Además, la idea no consiste solamente en factorizar ciertos problemas en otros más sencillos sino en generar nuevos Hamiltonianos exactamente solubles partiendo de otros

conocidos. La clave está entonces en que dos Hamiltonianos han de estar entrelazados por un operador diferencial A , normalmente de primer orden (ver, por ejemplo, [3, 4, 5, 8, 9] y referencias allí incluidas) o superior [10] y se supone que uno de ellos es soluble. Con esta idea, Fernández, Hussin y Mielnik [4] han encontrado recientemente un *algoritmo de diferencias finitas*, que hace uso en cada paso de dos soluciones de ciertas ecuaciones de Riccati y dos constantes. Dicho algoritmo se ha usado en [4, 5] para obtener nuevos Hamiltonianos isoenergéticos a otros conocidos.

Por otro lado, se ha introducido recientemente un grupo de transformaciones que actúa sobre el conjunto de ecuaciones de Riccati [11], el cual fue utilizado para analizar la integrabilidad de la ecuación de Riccati. Nos preguntábamos entonces si éste podría ser útil para iluminar de algún modo el ya mencionado problema de los Hamiltonianos entrelazados o A -relacionados. Una pregunta natural es si existe alguna relación de tal grupo de transformaciones con el algoritmo de diferencias finitas.

Las respuestas, afirmativas, son el tema del presente trabajo, que se organiza como sigue. En la sección 2 presentamos brevemente el problema de dos Hamiltonianos entrelazados por un operador diferencial de primer orden, que también se conoce como el de dos Hamiltonianos A -relacionados. En la sección 3 relacionamos las ecuaciones de Schrödinger que aparecen en el anterior problema con ciertas ecuaciones de Riccati, haciendo uso de la teoría clásica de Lie de reducción de ecuaciones diferenciales por simetrías infinitesimales, cuando se aplica a ecuaciones diferenciales lineales y homogéneas de segundo orden. En la sección 4 presentamos el grupo de transformaciones en el conjunto de ecuaciones de Riccati introducido en [11]. Usándolo probaremos el Teorema de Fernández, Hussin y Mielnik referente a su algoritmo de diferencias finitas. En la sección 5 encontramos los elementos del grupo de transformaciones más generales que preservan la estructura de una ecuación de Riccati que puede identificarse con cierta ecuación de Schrödinger por medio del método indicado en la sección 3. Encontramos entonces resultados más generales que los dados por el Teorema de Fernández *et al.*, obteniendo entonces un modo de relacionar no dos sino *tres* ecuaciones de Schrödinger esencialmente diferentes. En la sección 6 encontramos que el problema de los Hamiltonianos A -relacionados puede explicarse exactamente en términos del grupo de transformaciones sobre el conjunto de ecuaciones de Riccati y el procedimiento de reducción de la sección 3. La sección 7 se dedica a ilustrar el uso de los nuevos Teoremas de la sección 5, encontrando nuevos potenciales para los cuales un autoestado y el correspondiente autovalor es conocido exactamente. En particular, los ejemplos 7.2, 7.4 y 7.5 proporcionarán potenciales finales esencialmente diferentes de los originales. Por último, mostramos en la sección 8 algunas conclusiones y perspectivas para futuros trabajos.

Usaremos a lo largo del presente artículo algunas propiedades bien conocidas de los problemas cuánticos con una sola dimensión, que son los que se tratarán aquí. Pueden encontrarse en referencias habituales como [12, 13].

2. Hamiltonianos relacionados por operadores diferenciales de primer orden.

La manera más simple de generar un nuevo Hamiltoniano \widetilde{H} exactamente soluble a partir de uno conocido H es considerar un operador acotado e invertible B , con inverso acotado, y definir $\widetilde{H} = BHB^{-1}$. Este nuevo Hamiltoniano \widetilde{H} posee el mismo espectro que el de partida H . Como generalización (ver p.ej. [3]), diremos que dos operadores Hamiltonianos H y \widetilde{H} están A -relacionados cuando $AH = \widetilde{H}A$, donde A puede ser singular. En tal caso, si ψ es una función propia de H correspondiente al autovalor E y $A\psi \neq 0$, entonces, al menos formalmente, $A\psi$ es también una función propia de \widetilde{H} correspondiente al mismo autovalor E .

Si suponemos que el operador de entrelazamiento A es un operador diferencial de primer orden,

$$A = \frac{d}{dx} + W(x), \quad \text{y} \quad A^\dagger = -\frac{d}{dx} + W(x), \quad (1)$$

entonces la relación $AH = \widetilde{H}A$ y su adjunta, con

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad \widetilde{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + \widetilde{V}(x), \quad (2)$$

llevan a

$$V = -2W' + \widetilde{V}, \quad W(V - \widetilde{V}) = -W'' - V'.$$

Teniendo en cuenta la primera ecuación, la segunda se vuelve $2WW' = W'' + V'$, que puede integrarse fácilmente, resultando

$$V = W^2 - W' + d, \quad (3)$$

y entonces,

$$\widetilde{V} = W^2 + W' + d, \quad (4)$$

donde d es una constante de integración. Lo importante aquí es que H y \widetilde{H} , dados por (2), pueden estar relacionados por un operador diferencial de primer orden A de la forma dada si, y sólo si, existen una constante d y una función W tal que el par de ecuaciones de Riccati (3) y (4) se satisfagan *simultáneamente*. Además, esto significa que ambos Hamiltonianos pueden factorizarse como

$$H = A^\dagger A + d, \quad \widetilde{H} = AA^\dagger + d. \quad (5)$$

Tomando la suma y la diferencia de las ecuaciones (3) y (4) obtenemos el par equivalente que relaciona V y \tilde{V}

$$\tilde{V} - d = -(V - d) + 2W^2, \quad (6)$$

$$\tilde{V} = V + 2W'. \quad (7)$$

La función W que satisface estas ecuaciones se suele denominar *superpotencial*, la constante d es la *energía de factorización* o *constante de factorización* y se dice que \tilde{V} y V (resp. \tilde{H} y H) son potenciales (resp. Hamiltonianos) *compañeros*.

3. Simetría bajo dilataciones y reducción de una ecuación diferencial lineal de segundo orden

Recordamos brevemente en esta sección un conocido método de relacionar una ecuación diferencial ordinaria lineal y homogénea de segundo orden, con una ecuación de Riccati, que puede considerarse como una aplicación de la teoría clásica de Lie de reducción de ecuaciones diferenciales por simetrías infinitesimales. Su importancia quedará clara cuando apliquemos el método a ciertas ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo.

La ecuación diferencial lineal y homogénea de segundo orden

$$\frac{d^2z}{dx^2} + b(x)\frac{dz}{dx} + c(x)z = 0 \quad (8)$$

admite como simetría infinitesimal el campo vectorial $X = z\partial/\partial z$, generador de dilataciones (ver p.ej. [14]) en la variable z , el cual está definido para $z \neq 0$. De acuerdo a la citada teoría de Lie, debemos cambiar de la coordenada z a una nueva, $u = \varphi(z)$, tal que el campo vectorial $X = z\partial/\partial z$ se escriba como un generador de traslaciones $X = \partial/\partial u$ en la nueva variable. Este cambio está determinado por la ecuación $Xu = 1$, que lleva a $u = \log|z|$, i.e. $|z| = e^u$. En ambos casos de regiones con $z > 0$ ó $z < 0$ tenemos

$$\frac{dz}{dx} = z\frac{du}{dx}, \quad \text{y} \quad \frac{d^2z}{dx^2} = z\left(\frac{du}{dx}\right)^2 + z\frac{d^2u}{dx^2},$$

de forma que la ecuación (8) se escribe

$$\frac{d^2u}{dx^2} + b(x)\frac{du}{dx} + \left(\frac{du}{dx}\right)^2 + c(x) = 0. \quad (9)$$

Comoquiera que la función incógnita u no aparece en la ecuación precedente sino solamente su derivada, podemos reducir su orden introduciendo la nueva variable $w = du/dx$. Llegamos a la ecuación de Riccati para w

$$\frac{dw}{dx} = -w^2 - b(x)w - c(x). \quad (10)$$

Notar que de $dz/dx = z du/dx$ y la definición de w se tiene

$$w = \frac{1}{z} \frac{dz}{dx}. \quad (11)$$

La ecuación diferencial de segundo orden (8) es equivalente a la pareja (10) y (11), porque dada una función w que satisfaga (10), la función z definida (salvo un factor no nulo) por (11), i.e. $z(x) = \exp(\int^x w(\zeta) d\zeta)$, satisface (8). Podríamos haber seguido unas pautas parecidas *rectificando* el campo vectorial en el sentido opuesto, es decir, imponiendo $Xu = -1$. Esto habría llevado a que $u = -\log |z|$, es decir $|z| = e^{-u}$. Ahora bien, en cada caso de $z > 0$ ó $z < 0$ tenemos $dz/dx = -z du/dx$ y $d^2z/dx^2 = z (du/dx)^2 - z d^2u/dx^2$, de modo que finalmente obtenemos la ecuación de Riccati

$$\frac{dw}{dx} = w^2 - b(x)w + c(x), \quad (12)$$

donde ahora

$$w = \frac{du}{dx} = -\frac{1}{z} \frac{dz}{dx}. \quad (13)$$

Denotaremos en lo que sigue los diferentes cambios de variables como $|z| = e^{u+}$, $w_+ = \frac{1}{z} \frac{dz}{dx}$, y $|z| = e^{-v-}$, $w_- = -\frac{1}{z} \frac{dz}{dx}$, respectivamente. Notar que ambos están definidos *localmente*, esto es, en intervalos abiertos donde z tiene signo constante.

Apliquemos estas ideas al caso particular de la ecuación de Schrödinger en una dimensión e independiente del tiempo

$$-\frac{d^2\phi}{dx^2} + (V(x) - d)\phi = 0, \quad (14)$$

donde $V(x)$ es el potencial y d es un autovalor de energía concreto. Como se ha explicado antes, podemos reducir (14) o bien al par

$$W'_+ = -W_+^2 + (V(x) - d), \quad W_+ = \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dx}, \quad (15)$$

o bien, al par

$$W'_- = W_-^2 - (V(x) - d), \quad W_- = -\frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dx}. \quad (16)$$

Las ecuaciones de Riccati que aparecen en estos pares recuerdan a aquéllas que aparecían en la sección 1, a saber, las ecuaciones (3) y (4). Pero en los sistemas (15) y (16) las funciones incógnita W_+ y W_- están relacionadas por $W_+ = -W_-$, mientras que en (3) y (4) la incógnita W es *la misma* función.

Sin embargo, este comentario es útil para interpretar el significado de las ecuaciones (3) y (4). Podemos reescribirlas como

$$W' = W^2 - (V(x) - d), \quad (17)$$

$$W' = -W^2 + (\tilde{V}(x) - d). \quad (18)$$

Entonces, podemos considerar la ecuación (17) (resp. (18)) como proveniente de una ecuación del tipo Schrödinger (14) (resp. del tipo $-d^2\tilde{\phi}/dx^2 + (\tilde{V}(x) - d)\tilde{\phi} = 0$) por medio de los cambios, respectivamente,

$$W = -\frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dx}, \quad \text{o} \quad W = \frac{1}{\tilde{\phi}} \frac{d\tilde{\phi}}{dx}, \quad (19)$$

de forma que las dos “funciones propias” ϕ y $\tilde{\phi}$ de las ecuaciones del tipo Schrödinger mencionadas están relacionadas por $\phi\tilde{\phi} = \text{Const.}$ Ni que decir tiene que los cambios (19) están definidos localmente, es decir, en intervalos abiertos comunes de los dominios de ϕ y $\tilde{\phi}$ que existan entre dos ceros consecutivos de ϕ ó $\tilde{\phi}$, o quizá entre un cero y una frontera del dominio del problema. Notar que no hay en principio razón alguna por la que debieran proporcionar funciones ϕ y $\tilde{\phi}$ definidas de la misma forma en el dominio completo de W , sino que en general estarán definidas intervalo a intervalo. Notar también que si elegimos la función W de los dos operadores A y A^\dagger , definidos por (1), como la dada por (19), entonces se tiene $A\phi = 0$ y $A^\dagger\tilde{\phi} = 0$.

Hemos visto que las ecuaciones de Riccati (17) y (18) corresponden, por medio de los cambios (19), a dos ecuaciones del tipo Schrödinger que a su vez son equivalentes a

$$H\phi = d\phi, \quad \tilde{H}\tilde{\phi} = d\tilde{\phi}, \quad (20)$$

donde H y \tilde{H} están dados por (2). Entonces, es equivalente decir que H y \tilde{H} están A -relacionados, con constante asociada d , a decir que el par de funciones ϕ y $\tilde{\phi}$, que satisfacen $\phi\tilde{\phi} = \text{Const.}$, son funciones propias respectivas, con autovalor d , de los Hamiltonianos H y \tilde{H} . Cada uno de estos hechos implica a su vez que ambos Hamiltonianos pueden factorizarse en la forma dada por (5). Finalmente, recordamos de nuevo que estas factorizaciones tienen sentido localmente, es decir, en intervalos abiertos comunes de los dominios de ϕ y $\tilde{\phi}$.

Sin embargo, hay un caso especial donde todo se vuelve definido globalmente, que es cuando ϕ ó $\tilde{\phi}$ es la función de ondas correspondiente al estado fundamental de su Hamiltoniano respectivo, la cual no tendrá ceros en el dominio de definición del problema.

4. Grupo de transformaciones sobre el conjunto de ecuaciones de Riccati

Introducimos en esta sección la técnica de relacionar diferentes ecuaciones de Riccati por medio de un grupo de transformaciones. Tal procedimiento será de importancia clave en lo que sigue, y fue introducido en [11] en orden a proporcionar una explicación grupo teórica de algunas propiedades de la ecuación de Riccati.

Recordemos que una ecuación de Riccati general es la ecuación diferencial no lineal de

primer orden

$$\frac{dy(x)}{dx} = a_2(x)y^2(x) + a_1(x)y(x) + a_0(x), \quad (21)$$

donde los coeficientes $a_i(x)$, $i = 0, 1, 2$ son funciones (suficientemente) diferenciables de la variable independiente x . Una ecuación de Riccati particular está determinada por una elección concreta de dichos coeficientes. En este sentido, cada ecuación de Riccati puede considerarse como una curva en \mathbb{R}^3 , o en otras palabras, identificada con un elemento de $\text{Map}(\mathbb{R}, \mathbb{R}^3)$. La ecuación de Riccati posee una estrecha relación con el grupo $SL(2, \mathbb{R})$ de matrices 2 por 2 con entradas reales y determinante unidad, como ha sido puesto de manifiesto, por ejemplo, en [11] y en las referencias allí incluídas.

Consideremos el grupo de curvas (suficientemente) diferenciables a valor $SL(2, \mathbb{R})$, es decir, $\text{Map}(\mathbb{R}, SL(2, \mathbb{R}))$, que de ahora en adelante denotaremos por \mathcal{G} , definido como sigue. Un elemento $A(x) \in \mathcal{G}$ si $A(x) \in SL(2, \mathbb{R})$ para todo x de su dominio. El producto está definido punto a punto, i.e. si $A_1(x), A_2(x) \in \mathcal{G}$ entonces $(A_1 A_2)(x) = A_1(x) A_2(x)$ para todo x . Es inmediato ver que que el elemento neutro es $I(x) = I \in SL(2, \mathbb{R})$ para todo x y que el inverso está dado por $(A^{-1})(x) = A(x)^{-1}$.

Podemos transformar toda función $y(x)$, definida en la recta real extendida (añadiendo el punto del infinito) $\overline{\mathbb{R}}$ por un elemento de \mathcal{G} , haciendo uso de la conocida acción $\Theta : \mathcal{G} \times \text{Map}(\mathbb{R}, \overline{\mathbb{R}}) \rightarrow \text{Map}(\mathbb{R}, \overline{\mathbb{R}})$ definida como sigue [11]:

$$\Theta(A(x), y(x)) = \frac{\alpha(x)y(x) + \beta(x)}{\gamma(x)y(x) + \delta(x)}, \quad \text{si } y(x) \neq -\frac{\delta(x)}{\gamma(x)}, \quad (22)$$

$$\Theta(A(x), \infty) = \frac{\alpha(x)}{\gamma(x)}, \quad \Theta\left(A(x), -\frac{\delta(x)}{\gamma(x)}\right) = \infty, \quad (23)$$

cuando

$$A(x) = \begin{pmatrix} \alpha(x) & \beta(x) \\ \gamma(x) & \delta(x) \end{pmatrix} \in \mathcal{G}. \quad (24)$$

Es fácil comprobar que la ecuación de Riccati (21) se transforma bajo la transformación genérica $\bar{y}(x) = \Theta(A(x), y(x))$ en una nueva ecuación de Riccati para $\bar{y}(x)$ con coeficientes $\bar{a}_i(x)$, $i = 0, 1, 2$. La relación entre los coeficientes nuevos y los antiguos está dada por

$$\bar{a}_2 = \delta^2 a_2 - \delta\gamma a_1 + \gamma^2 a_0 + \gamma\delta' - \delta\gamma', \quad (25)$$

$$\bar{a}_1 = -2\beta\delta a_2 + (\alpha\delta + \beta\gamma) a_1 - 2\alpha\gamma a_0 + \delta\alpha' - \alpha\delta' + \beta\gamma' - \gamma\beta', \quad (26)$$

$$\bar{a}_0 = \beta^2 a_2 - \alpha\beta a_1 + \alpha^2 a_0 + \alpha\beta' - \beta\alpha', \quad (27)$$

donde la prima denota derivada respecto a x . Nos gustaría resaltar que transformaciones similares a éstas últimas, cuando se considera $GL(2, \mathbb{R})$ en vez de $SL(2, \mathbb{R})$, han sido utilizadas en [15, 16], también en conexión con transformaciones de la ecuación de Riccati.

Sin embargo, ninguno de ellos puso de manifiesto que las mismas constituyen un grupo de transformaciones, como mostramos seguidamente.

Las relaciones anteriores pueden escribirse en forma matricial

$$\begin{pmatrix} \bar{a}_2 \\ \bar{a}_1 \\ \bar{a}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta^2 & -\delta\gamma & \gamma^2 \\ -2\beta\delta & \alpha\delta + \beta\gamma & -2\alpha\gamma \\ \beta^2 & -\alpha\beta & \alpha^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ a_1 \\ a_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \gamma\delta' - \delta\gamma' \\ \delta\alpha' - \alpha\delta' + \beta\gamma' - \gamma\beta' \\ \alpha\beta' - \beta\alpha' \end{pmatrix}. \quad (28)$$

Si definimos las aplicaciones

$$B(A) = \begin{pmatrix} \delta^2 & -\delta\gamma & \gamma^2 \\ -2\beta\delta & \alpha\delta + \beta\gamma & -2\alpha\gamma \\ \beta^2 & -\alpha\beta & \alpha^2 \end{pmatrix}, \quad (29)$$

$$\theta(A) = \begin{pmatrix} \gamma\delta' - \delta\gamma' \\ \delta\alpha' - \alpha\delta' + \beta\gamma' - \gamma\beta' \\ \alpha\beta' - \beta\alpha' \end{pmatrix}, \quad (30)$$

donde $A \in \mathcal{G}$, puede comprobarse fácilmente que B es una representación lineal del grupo \mathcal{G} en $\text{Map}(\mathbb{R}, \mathbb{R}^3)$. La restricción de B al subgrupo de curvas a valor $SL(2, \mathbb{R})$ constantes no es otra cosa que la representación adjunta de $SL(2, \mathbb{R})$ en su álgebra de Lie [11]. Por otro lado, puede probarse que θ define un 1-cociclo para B , lo cual significa que (ver [11, 17])

$$\theta(A_1 A_2) = B(A_1)(\theta(A_2)) + \theta(A_1), \quad \forall A_1, A_2 \in \mathcal{G}, \quad (31)$$

y que además θ no es un 1-coborde para B . Como consecuencia, ver por ejemplo [17], la expresión (28) define una acción afín de \mathcal{G} en el conjunto de ecuaciones de Riccati, que a su vez puede identificarse con el conjunto de curvas (suficientemente) diferenciables a valor el álgebra de Lie $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{R})$.

En términos más prácticos todo esto quiere decir que la composición de dos transformaciones del tipo (28) en el conjunto de ecuaciones de Riccati es exactamente igual que realizar una sola transformación del siguiente modo. Si T_A denota la transformación del tipo (28) asociada con $A \in \mathcal{G}$, entonces se cumple

$$T_{A_1} \circ T_{A_2} = T_{A_1 A_2}, \quad \forall A_1, A_2 \in \mathcal{G}. \quad (32)$$

Es posible generalizar esta acción afín a situaciones más generales, donde esté involucrado un grupo de Lie arbitrario de dimensión finita en lugar de $SL(2, \mathbb{R})$ [18].

En pocas palabras, lo que ocurre es que \mathcal{G} actúa por medio de Θ transformando soluciones de una ecuación de Riccati en soluciones de otra ecuación de Riccati obtenida por medio de la acción, definida por (28), de \mathcal{G} sobre la ecuación original. Como ejemplo del interés y la utilidad que estas transformaciones poseen, probaremos el siguiente resultado.

Teorema 1 (Fernández, Hussin y Mielnik [4]) Sean $\alpha_k(x)$ y $\alpha_l(x)$ dos soluciones diferentes de las ecuaciones de Riccati $\alpha' + \alpha^2 = V(x) - \epsilon_k$ y $\alpha' + \alpha^2 = V(x) - \epsilon_l$, respectivamente, donde $\epsilon_k < \epsilon_l$. Entonces la función $\beta_{kl}(x)$, definida por

$$\beta_{kl}(x) = -\alpha_k(x) - \frac{\epsilon_k - \epsilon_l}{\alpha_k(x) - \alpha_l(x)}, \quad (33)$$

es una solución de la ecuación de Riccati $\beta' + \beta^2 = V(x) - 2\alpha'_k(x) - \epsilon_l$.

Demostración. La función $\alpha_l(x)$ satisface la ecuación de Riccati $\alpha' + \alpha^2 = V(x) - \epsilon_l$ por hipótesis. La transformaremos por medio de Θ haciendo uso del elemento $A_0(x)$ de \mathcal{G} dado por

$$A_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_l - \epsilon_k}} \begin{pmatrix} \alpha_k(x) & -\alpha_k^2(x) + \epsilon_l - \epsilon_k \\ -1 & \alpha_k(x) \end{pmatrix}, \quad (34)$$

donde $\alpha_k(x) \neq \alpha_l(x)$ y $\epsilon_k < \epsilon_l$. En efecto $A_0(x) \in \mathcal{G}$ ya que su determinante es siempre uno, para todo x en el dominio de $\alpha_k(x)$. De acuerdo con (22) y (23) calculamos

$$\begin{aligned} \Theta(A_0(x), \alpha_l(x)) &= \frac{\alpha_k(x)\alpha_l(x) - \alpha_k^2(x) + \epsilon_l - \epsilon_k}{\alpha_k(x) - \alpha_l(x)} \\ &= -\alpha_k(x) - \frac{\epsilon_k - \epsilon_l}{\alpha_k(x) - \alpha_l(x)}. \end{aligned}$$

Esta función es una solución de la ecuación de Riccati con coeficientes dados por (25), (26) y (27), teniendo en cuenta los elementos de matriz de $A_0(x) \in \mathcal{G}$ y que la ecuación de Riccati inicial $\alpha' + \alpha^2 = V(x) - \epsilon_l$ posee como coeficientes $a_2(x) = -1$, $a_1(x) = 0$ y $a_0(x) = V(x) - \epsilon_l$, en la notación de (21). Operando, tenemos

$$\begin{aligned} \bar{a}_2(x) &= \frac{1}{\epsilon_l - \epsilon_k} \{-\alpha_k^2(x) - \alpha'_k(x) + V(x) - \epsilon_k\} - 1, \\ \bar{a}_1(x) &= \frac{2\alpha_k(x)}{\epsilon_l - \epsilon_k} \{-\alpha_k^2(x) - \alpha'_k(x) + V(x) - \epsilon_k\}, \\ \bar{a}_0(x) &= \frac{\alpha_k^2(x)}{\epsilon_l - \epsilon_k} \{-\alpha_k^2(x) - \alpha'_k(x) + V(x) - \epsilon_k\} \\ &\quad + \alpha_k^2(x) + \alpha'_k(x) - 2\alpha'_k(x) - (\epsilon_l - \epsilon_k). \end{aligned}$$

Si ahora la función $\alpha_k(x)$ satisface a su vez la ecuación de Riccati $\alpha^2 + \alpha' = V(x) - \epsilon_k$, los coeficientes finales se reducen a $\bar{a}_2(x) = -1$, $\bar{a}_1(x) = 0$ y $\bar{a}_0(x) = V(x) - 2\alpha'_k(x) - \epsilon_l$. \square

5. Elementos que preservan el subconjunto de las ecuaciones de Riccati $u' + u^2 = V(x) - c$

Acabamos de ver que el grupo de transformaciones definido en el conjunto de ecuaciones de Riccati proporciona una demostración directa del Teorema 1. Éste relaciona una solución $\alpha_l(x)$ de la ecuación de Riccati *inicial* $\alpha' + \alpha^2 = V(x) - \epsilon_l$ con una solución $\beta_{kl}(x)$ de la ecuación de Riccati *final* $\beta' + \beta^2 = V(x) - 2\alpha'_k(x) - \epsilon_l$, usando una solución $\alpha_k(x)$ de la ecuación de Riccati *intermedia* $\alpha' + \alpha^2 = V(x) - \epsilon_k$. Estas tres ecuaciones de Riccati pueden obtenerse a partir de otras tres ecuaciones de tipo Schrödinger por medio de una de las posibilidades de reducción explicadas en la sección 3. Además, las asociadas a las ecuaciones de Riccati inicial e intermedia, a saber $-\psi'' + (V(x) - \epsilon_l)\psi = 0$ y $-\psi'' + (V(x) - \epsilon_k)\psi = 0$, pueden considerarse como las ecuaciones de autovalores que aparecen para las dos energías ϵ_l, ϵ_k del mismo potencial $V(x)$, mientras que la ecuación de Riccati final puede asociarse a la ecuación de autovalores para el potencial $V(x) - 2\alpha'_k(x)$ y energía ϵ_l .

Ésto lleva de forma natural a la pregunta de cuál es el subconjunto de los elementos más generales de \mathcal{G} que preservan el subconjunto de las ecuaciones de Riccati caracterizadas por el hecho de tener los coeficientes $a_2(x) = -1$, $a_1(x) = 0$ y $a_0(x)$ igual a cierta función, la cual escribiremos como una expresión de la forma $V(x) - c$. Notar que tal subconjunto de \mathcal{G} *no* será necesariamente un subgrupo, ya que el coeficiente $a_0(x)$ no es siempre la misma función.

La ecuación de la que partiremos es

$$u' = -u^2 + V(x) - c, \quad (35)$$

que posee los coeficientes $a_2(x) = -1$, $a_1(x) = 0$ y $a_0(x) = V(x) - c$ en la notación de (21). La condición de obtener una ecuación de Riccati final en el subconjunto mencionado es

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ \bar{V}(x) - \bar{c} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \delta^2 & -\delta\gamma & \gamma^2 \\ -2\beta\delta & \alpha\delta + \beta\gamma & -2\alpha\gamma \\ \beta^2 & -\alpha\beta & \alpha^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ V(x) - c \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} \gamma\delta' - \delta\gamma' \\ \delta\alpha' - \alpha\delta' + \beta\gamma' - \gamma\beta' \\ \alpha\beta' - \beta\alpha' \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (36)$$

para cierta $A(x) \in \mathcal{G}$ de la forma (24) a determinar, y donde $\bar{V}(x) - \bar{c}$ será en general diferente de $V(x) - c$. La ecuación matricial (36) es equivalente a las tres ecuaciones escalares

$$-1 = -\delta^2 + \gamma^2(V(x) - c) + \gamma\delta' - \delta\gamma', \quad (37)$$

$$0 = 2\beta\delta - 2\alpha\gamma(V(x) - c) + \delta\alpha' - \alpha\delta' + \beta\gamma' - \gamma\beta', \quad (38)$$

$$\overline{V}(x) - \overline{c} = -\beta^2 + \alpha^2(V(x) - c) + \alpha\beta' - \beta\alpha'. \quad (39)$$

Derivando $\det A(x) = \alpha(x)\delta(x) - \beta(x)\gamma(x) = 1$ tenemos también

$$\alpha'\delta + \delta'\alpha - \gamma'\beta + \beta'\gamma = 0. \quad (40)$$

De estas cuatro ecuaciones, (37), (38) y (40) proporcionarán condiciones sobre los elementos de matriz α , β , γ , δ y sus derivadas tales que la condición (36) se satisfaga. La restante, (39), definirá $\overline{V}(x) - \overline{c}$ en términos de todas las demás funciones, incluyendo $V(x) - c$.

Tras tomar la suma y la diferencia de (38) y (40) se obtiene

$$(V(x) - c)\alpha^2 = \frac{\alpha\beta\delta}{\gamma} + \frac{\delta\alpha\alpha'}{\gamma} - \alpha\beta', \quad (41)$$

$$(V(x) - c)\gamma^2 = \frac{\gamma\beta\delta}{\alpha} + \frac{\beta\gamma\gamma'}{\alpha} - \gamma\delta'. \quad (42)$$

Sustituyéndolas en (37) y (39) obtenemos

$$\begin{aligned} -1 &= -\delta^2 + \frac{\gamma\beta\delta}{\alpha} + \frac{\beta\gamma\gamma'}{\alpha} - \delta\gamma', \\ \overline{V}(x) - \overline{c} &= -\beta^2 + \frac{\alpha\beta\delta}{\gamma} + \frac{\delta\alpha\alpha'}{\gamma} - \beta\alpha'. \end{aligned}$$

Multiplicando la primera de estas ecuaciones por α y la segunda por γ , y usando el hecho de que $\alpha\delta - \beta\gamma = 1$ llegamos a

$$\alpha = \delta + \gamma', \quad (43)$$

$$(\overline{V}(x) - \overline{c})\gamma = \beta + \alpha'. \quad (44)$$

Sustituyendo (43) en (42), obtenemos

$$(V(x) - c)\gamma = \beta - \delta'. \quad (45)$$

Tenemos dos relaciones entre las funciones α , β , γ y δ , a saber (43) y la condición del determinante, así que podemos expresar estos elementos de matriz en términos de solamente dos de ellos y sus derivadas. Podemos escribir entonces $\alpha = \delta + \gamma'$ y $\beta = (\delta(\delta + \gamma') - 1)/\gamma$. Usando además la relación

$$\frac{\delta'}{\gamma} = \left(\frac{\delta}{\gamma}\right)' + \frac{\delta\gamma'}{\gamma^2} \quad (46)$$

la ecuación (45) se escribe

$$\left(-\frac{\delta}{\gamma}\right)' + \left(-\frac{\delta}{\gamma}\right)^2 = V(x) + \frac{1}{\gamma^2} - c \quad (47)$$

de forma que la nueva función v definida como $v = -\delta/\gamma$ debe satisfacer la ecuación de Riccati

$$v' + v^2 = V(x) + \frac{1}{\gamma^2} - c. \quad (48)$$

Ahora bien, sustituyendo en (44) la expresión de β y α' en términos de δ , γ y sus derivadas, usando la definición de v y la ecuación (48) se obtiene

$$\bar{V}(x) - \bar{c} = V(x) - 2 \left(\frac{\gamma'}{\gamma} v + v' \right) + \frac{\gamma''}{\gamma} - c. \quad (49)$$

Sólomente queda encontrar la expresión de la función solución de la ecuación de Riccati final, en términos de u y v . La curva a valor $SL(2, \mathbb{R})$ usada para la transformación puede escribirse como

$$C_0(x) = \gamma \begin{pmatrix} -v + \frac{\gamma'}{\gamma} & v^2 - v\frac{\gamma'}{\gamma} - \frac{1}{\gamma^2} \\ 1 & -v \end{pmatrix}, \quad (50)$$

de modo que la función buscada es

$$\begin{aligned} z(x) &= \Theta(C_0(x), u(x)) = \frac{-vu + u\gamma'/\gamma - 1/\gamma^2 + v^2 - v\gamma'/\gamma}{u - v} \\ &= -v - \frac{1/\gamma^2}{u - v} + \frac{\gamma'}{\gamma}. \end{aligned} \quad (51)$$

Resumiendo, acabamos de probar el siguiente

Teorema 2 *Sea $u(x)$ una solución de la ecuación de Riccati*

$$u' + u^2 = V(x) - c \quad (52)$$

para cierta función $V(x)$ y cierta constante c . Sea $\gamma(x)$ una función (suficientemente) diferenciable sin ceros, definida en el dominio de $V(x)$. Sea $v(x)$ una solución de la ecuación de Riccati

$$v' + v^2 = V(x) + \frac{1}{\gamma^2(x)} - c, \quad (53)$$

que se supone definida en el mismo dominio de $u(x)$ y tal que $u(x) - v(x)$ sea no nula para todo x . Entonces la función $z(x)$ definida por

$$z(x) = -v(x) - \frac{1/\gamma^2(x)}{u(x) - v(x)} + \frac{\gamma'(x)}{\gamma(x)} \quad (54)$$

es una solución de la ecuación de Riccati

$$z' + z^2 = V(x) - 2 \left(\frac{\gamma'}{\gamma} v + v' \right) + \frac{\gamma''}{\gamma} - c. \quad (55)$$

Ni que decir tiene, los coeficientes de la ecuación final pueden calcularse directamente haciendo uso de (25), (26), (27) y teniendo en cuenta (50), (52) y (53).

Corolario 1 *El Teorema 1 es un caso particular del Teorema 2.*

Demostración. Es suficiente elegir en el Teorema 2 $u(x) = \alpha_l(x)$, $v(x) = \alpha_k(x)$, $c = \epsilon_l$ y $\gamma = 1/\sqrt{\epsilon_l - \epsilon_k}$, con $\epsilon_l < \epsilon_k$. \square

El Teorema 2 tiene su contrapartida para ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden del tipo Schrödinger, que a su vez tendrá un interés inmediato en aplicaciones físicas. La clave es usar en sentido inverso el procedimiento de reducción descrito en la sección 3.

Consideremos la solución u de la ecuación de Riccati (52). Podemos definir (localmente y salvo una constante multiplicativa no nula) la nueva variable ϕ_u como

$$\phi_u(x) = \exp\left(\int^x u(\xi) d\xi\right), \quad (56)$$

la cual satisfará

$$-\phi_u'' + (V(x) - c)\phi_u = 0, \quad (57)$$

para la constante concreta c . Análogamente, considerando la solución v de la ecuación de Riccati (53) podemos definir (localmente etc.) ϕ_v como

$$\phi_v(x) = \exp\left(\int^x v(\xi) d\xi\right), \quad (58)$$

que a su vez satisfará

$$-\phi_v'' + \left(V(x) + \frac{1}{\gamma^2(x)} - c\right)\phi_v = 0, \quad (59)$$

para la misma constante concreta c . Entonces la función z definida por (54) satisfará la ecuación de Riccati (55). Podemos definir también (localmente etc.) la nueva función ϕ_z como

$$\phi_z(x) = \exp\left(\int^x z(\xi) d\xi\right), \quad (60)$$

que a su vez satisfará

$$-\phi_z'' + \left\{V(x) - 2\left(\frac{\gamma'}{\gamma}v + v'\right) + \frac{\gamma''}{\gamma} - c\right\}\phi_z = 0. \quad (61)$$

Lo que hemos de hacer ahora es relacionar la función ϕ_z con ϕ_u y ϕ_v , teniendo en cuenta la relación existente entre z , u y v .

Proposición 1 *Sean u , v y z las funciones para las cuales se cumple el Teorema 2. Sean ϕ_u , ϕ_v y ϕ_z las funciones definidas por (56), (58) y (60), respectivamente. Entonces se tiene que*

$$\frac{\phi_u'}{\phi_u} = u, \quad \frac{\phi_v'}{\phi_v} = v, \quad \frac{\phi_z'}{\phi_z} = z, \quad (62)$$

y se cumple

$$\phi_z = \gamma\left(-\frac{d}{dx} + \frac{\phi_v'}{\phi_v}\right)\phi_u, \quad (63)$$

salvo una constante multiplicativa no nula.

Demostración. La primera aserción es inmediata. Como consecuencia, tenemos $\gamma(-\frac{d}{dx} + \frac{\phi'_u}{\phi_u})\phi_u = \gamma(v-u)\phi_u$. Tomando la derivada logarítmica

$$\begin{aligned} \frac{(\gamma(v-u)\phi_u)'}{\gamma(v-u)\phi_u} &= \frac{\gamma'}{\gamma} + \frac{v'-u'}{v-u} + \frac{\phi'_u}{\phi_u} \\ &= \frac{\gamma'}{\gamma} + \frac{u^2-v^2}{v-u} + \frac{1/\gamma^2}{v-u} + u = \frac{\gamma'}{\gamma} - u - v + \frac{1/\gamma^2}{v-u} + u \\ &= \frac{\gamma'}{\gamma} - v + \frac{1/\gamma^2}{v-u} = z = \frac{\phi'_z}{\phi_z}, \end{aligned}$$

donde se ha hecho uso de las ecuaciones (52), (53) y (54). □

De estos resultados previos, tenemos el siguiente:

Teorema 3 *Sea $\phi_u(x)$ una solución de la ecuación diferencial de segundo orden lineal y homogénea*

$$-\phi_u'' + (V(x) - c)\phi_u = 0, \quad (64)$$

para $V(x)$ y c concretas. Sea $\gamma(x)$ una función (suficientemente) diferenciable sin ceros, con dominio el de $V(x)$. Sea la función $\phi_v(x) \neq \phi_u(x)$ una solución de la ecuación

$$-\phi_v'' + \left(V(x) + \frac{1}{\gamma^2(x)} - c\right)\phi_v = 0, \quad (65)$$

definida en el mismo dominio que $\phi_u(x)$. Entonces la función $\phi_z(x)$, definida (salvo una constante multiplicativa no nula) por

$$\phi_z = \gamma \left(-\frac{d}{dx} + \frac{\phi'_v}{\phi_v} \right) \phi_u, \quad (66)$$

satisface la nueva ecuación

$$-\phi_z'' + \left\{ V(x) - 2\left(\frac{\gamma'}{\gamma}v + v'\right) + \frac{\gamma''}{\gamma} - c \right\} \phi_z = 0, \quad (67)$$

donde la función $v(x)$ está definida (localmente) por $\phi'_v/\phi_v = v$.

Nota 1. Los Teoremas 2 y 3 son invariantes bajo un cambio de signo de γ .

Nota 2. El operador $\gamma(x)\{-d/dx + \phi'_v(x)/\phi_v(x)\}$, que aparece en (66), se reduce al operador apropiado del tipo $A^\dagger = -d/dx + W(x)$ cuando $\gamma(x)$ es constante. Veremos este punto con más detalle en la sección siguiente.

6. El algoritmo de diferencias finitas y los Hamiltonianos A -relacionados desde un punto de vista grupo-teórico

Recordemos que el conocido como *algoritmo de diferencias finitas* fue introducido en [4], en conexión con el problema de dos Hamiltonianos A -relacionados o entrelazados, y usado

posteriormente en [5]. En tales trabajos la idea esencial es usar el método al menos *dos veces*.

El importante resultado que trataremos a continuación es que, usando apropiadamente el algoritmo de diferencias finitas *sólamete* una vez, conjuntamente con el procedimiento de reducción explicado en la sección 3, es posible explicar desde un punto de vista grupo-teórico el problema usual de dos Hamiltonianos A -relacionados o entrelazados. Obtendremos de esta manera una nueva visión acerca de la naturaleza de estos problemas.

Consideremos los dos Hamiltonianos

$$H_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0(x), \quad H_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x), \quad (68)$$

que por hipótesis estarán A_1 -relacionados, i.e. $A_1 H_1 = H_0 A_1$ y $H_1 A_1^\dagger = A_1^\dagger H_0$, donde

$$A_1 = \frac{d}{dx} + \alpha_1, \quad \text{y} \quad A_1^\dagger = -\frac{d}{dx} + \alpha_1, \quad (69)$$

siendo α_1 una función a determinar.

Supongamos que H_0 es un Hamiltoniano exactamente soluble para el cual se conoce un conjunto completo de funciones propias de cuadrado integrable $\psi_n^{(0)}$ con energías respectivas E_n , $n = 0, 1, 2, \dots$. Por lo que se ha visto en la sección 3, se tiene

$$V_0(x) - E_0 = \alpha_1^2(x, E_0) + \alpha_1'(x, E_0), \quad (70)$$

$$V_1(x) - E_0 = \alpha_1^2(x, E_0) - \alpha_1'(x, E_0), \quad (71)$$

o equivalentemente

$$V_0(x) - E_0 = -(V_1(x) - E_0) + 2\alpha_1^2(x, E_0), \quad (72)$$

$$V_1(x) = V_0(x) - 2\alpha_1'(x, E_0). \quad (73)$$

donde hemos elegido $\alpha_1(x, E_0)$ como

$$\alpha_1(x, E_0) = \psi_0^{(0)'} / \psi_0^{(0)}, \quad (74)$$

Definamos la función $\psi_0^{(1)}$ por $\psi_0^{(1)} = 1/\psi_0^{(0)}$, salvo una constante multiplicativa no nula. Tenemos entonces también

$$\alpha_1(x, E_0) = -\psi_0^{(1)'} / \psi_0^{(1)}. \quad (75)$$

Entonces, ambos Hamiltonianos factorizan en la forma

$$H_0 = A_1(E_0)A_1^\dagger(E_0) + E_0, \quad H_1 = A_1^\dagger(E_0)A_1(E_0) + E_0. \quad (76)$$

Notar que hemos escrito explícitamente E_0 en la función α_1 y como consecuencia en los operadores A_1 y A_1^\dagger . No obstante no deben considerarse como dependientes de tal cantidad

sino que esta última debe verse como una forma de recordar la factorización con la que estamos trabajando. De (74) y (75) tenemos $A_1^\dagger(E_0)\psi_0^{(0)} = 0$ y $A_1(E_0)\psi_0^{(1)} = 0$, y como consecuencia $H_1\psi_0^{(1)} = E_0\psi_0^{(1)}$ en añadidura a $H_0\psi_0^{(0)} = E_0\psi_0^{(0)}$.

Notar también que como $\psi_0^{(0)}$ no posee ceros en todo el dominio de $V_0(x)$, todas las funciones definidas hasta ahora en esta sección están globalmente definidas en dicho dominio, siempre que sea conexo.

La ecuación (73) relaciona el potencial $V_1(x)$ con $V_0(x)$. Como es sabido, debido a la $A_1(E_0)$ -relación de los Hamiltonianos H_0 y H_1 , es posible encontrar las funciones propias normalizadas de H_1 transformando las de H_0 por medio del operador $A_1^\dagger(E_0)$, excepto $\psi_0^{(0)}$, ya que $A_1^\dagger(E_0)\psi_0^{(0)} = 0$. En efecto, un simple cálculo muestra que las funciones

$$\psi_n^{(1)} = \frac{A_1^\dagger(E_0)\psi_n^{(0)}}{\sqrt{E_n - E_0}}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (77)$$

satisfacen

$$H_1\psi_n^{(1)} = E_n\psi_n^{(1)} \quad \text{y} \quad (\psi_n^{(1)}, \psi_m^{(1)}) = \delta_{nm}, \quad (78)$$

para todos $n, m = 1, 2, 3, \dots$, a condición de que $\psi_n^{(0)}$ estén normalizadas.

Aunque la función $\psi_0^{(1)}$ satisface $H_1\psi_0^{(1)} = E_0\psi_0^{(1)}$, no corresponde a un estado físico de H_1 porque no es de cuadrado integrable, como puede verse fácilmente de su definición. Entonces, E_0 no pertenece al espectro físico de H_1 . Por esta razón los Hamiltonianos H_1 y H_0 se dicen *cuasi-isoespectrales*.

Vamos a formular ahora todos estos resultados en términos del grupo de transformaciones en el conjunto de ecuaciones de Riccati introducido en la sección 4. Por hipótesis tenemos

$$H_0\psi_n^{(0)} = E_n\psi_n^{(0)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (79)$$

Como H_0 está dado por (68), la ecuación espectral (79) puede escribirse como el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales lineales y homogéneas de segundo orden

$$-\psi_n^{(0)''} + (V_0(x) - E_n)\psi_n^{(0)} = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (80)$$

De cada una de estas ecuaciones podemos obtener una ecuación de Riccati a través de la definición de las nuevas variables

$$\alpha_1(E_k) = \frac{\psi_k^{(0)'}}{\psi_k^{(0)}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (81)$$

donde la dependencia en x se ha omitido por brevedad. Por lo dicho en la sección 3, estos cambios están definidos *localmente*, es decir, para cada k , el dominio de $\alpha_1(E_k)$ es la unión de los intervalos abiertos contenidos entre dos ceros consecutivos de $\psi_k^{(0)}$ o quizá un cero y una frontera del dominio de $V_0(x)$. En particular, $\alpha_1(E_0)$ está definido globalmente en

el dominio completo de $V_0(x)$ ya que $\psi_0^{(0)}$ no tiene ceros en tal intervalo. Con los cambios (81), el conjunto de ecuaciones (80) se transforma en el conjunto de ecuaciones de Riccati

$$\alpha_1'(E_n) + \alpha_1^2(E_n) = V_0(x) - E_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (82)$$

Apliquemos ahora el Teorema 1. Hemos de hacer *actuar* ciertos elementos apropiados del grupo \mathcal{G} sobre todas las ecuaciones (82) salvo una. Dichas curvas a valor $SL(2, \mathbb{R})$ han de ser construidas haciendo uso de la función que satisface la ecuación del conjunto (82) que se ha de dejar aparte. Y esta última ecuación debe tener una constante asociada E_n menor que cualquier otra del conjunto, de modo que es la ecuación de (82) con $n = 0$.

Los elementos de \mathcal{G} que necesitamos pueden encontrarse fácilmente por analogía con el elemento de \mathcal{G} que hemos utilizado en la demostración del Teorema 1. Éstos son

$$B_n = \frac{1}{\sqrt{E_n - E_0}} \begin{pmatrix} \alpha_1(E_0) & -\alpha_1^2(E_0) + E_n - E_0 \\ -1 & \alpha_1(E_0) \end{pmatrix}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (83)$$

Definamos las nuevas funciones $\beta(E_n)$ como

$$\begin{aligned} \beta(E_n) &= \Theta(B_n, \alpha_1(E_n)) = \frac{\alpha_1(E_0)\alpha_1(E_n) - \alpha_1^2(E_0) + E_n - E_0}{\alpha_1(E_0) - \alpha_1(E_n)} \\ &= -\alpha_1(E_0) - \frac{E_0 - E_n}{\alpha_1(E_0) - \alpha_1(E_n)}, \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (84)$$

Por el Teorema 1 dichas funciones $\beta(E_n)$ satisfarán las nuevas ecuaciones de Riccati

$$\beta'(E_n) + \beta^2(E_n) = V_1(x) - E_n, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (85)$$

donde $V_1(x) = V_0(x) - 2\alpha_1'(E_0)$. Ahora bien, podemos definir (localmente etc.) el nuevo conjunto de funciones $\phi_n^{(1)}$, para $n = 1, 2, \dots$, por medio de

$$\phi_n^{(1)}(x) = \exp\left(\int^x \beta(\xi, E_n) d\xi\right), \quad n = 1, 2, \dots, \quad (86)$$

de modo que satisfarán las nuevas ecuaciones

$$-\phi_n^{(1)''} + (V_1(x) - E_n)\phi_n^{(1)} = 0, \quad n = 1, 2, \dots \quad (87)$$

Entonces, $\phi_n^{(1)}$ son funciones propias del Hamiltoniano $H_1 = -\frac{d}{dx} + V_1(x)$, con autovalores asociados E_n , para $n = 1, 2, \dots$

Por otro lado, ya conocemos un conjunto de funciones propias $\psi_n^{(1)}$ con exactamente las mismas energías asociadas E_n , dadas por (77). Uno podría estar tentado de concluir que ambos conjuntos son iguales (quizá salvo ciertas constantes multiplicativas). Pero la situación no es tan simple, ya que cada ecuación diferencial lineal y homogénea de segundo orden (p.ej. las de (87)) posee dos soluciones linealmente independientes. Como

estamos trabajando siempre con problemas unidimensionales con niveles no degenerados, sólomente una de las soluciones será de cuadrado integrable.

Por tanto, hasta ahora sólo podemos asegurar que $\phi_n^{(1)}$ son una combinación lineal general de las funciones $\psi_n^{(1)}$ y sus soluciones asociadas linealmente independientes, para cada n , las cuales pueden calcularse, por ejemplo, haciendo uso de la conocida fórmula de Liouville $\psi_n^{(1)}(x) \int^x \frac{d\xi}{\psi_n^{(1)2}(\xi)}$.

Pero lo importante es que para cada $n = 1, 2, \dots$, se tiene que $\psi_n^{(1)}$ y $\phi_n^{(1)}$ son iguales, salvo una constante multiplicativa no nula. En efecto, tomando la derivada logarítmica de $\psi_n^{(1)}$ obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\psi_n^{(1)'}}{\psi_n^{(1)}} &= \frac{\frac{d}{dx}(A_1^\dagger(E_0)\psi_n^{(0)})}{A_1^\dagger(E_0)\psi_n^{(0)}} = \frac{\frac{d}{dx}(-\psi_n^{(0)'} + \frac{\psi_0^{(0)'}}{\psi_0^{(0)}}\psi_n^{(0)})}{-\psi_n^{(0)'} + \frac{\psi_0^{(0)'}}{\psi_0^{(0)}}\psi_n^{(0)}} \\ &= \frac{-\psi_n^{(0)''} + \frac{\psi_0^{(0)''}}{\psi_0^{(0)}}\psi_n^{(0)} - \left(\frac{\psi_0^{(0)'}}{\psi_0^{(0)}}\right)^2\psi_n^{(0)} + \frac{\psi_0^{(0)'}}{\psi_0^{(0)}}\psi_n^{(0)'}}{-\psi_n^{(0)'} + \frac{\psi_0^{(0)'}}{\psi_0^{(0)}}\psi_n^{(0)}}. \end{aligned}$$

Sacando el factor común $\psi_n^{(0)}$ en numerador y denominador, usando las relaciones

$$\frac{\psi_n^{(0)''}}{\psi_n^{(0)}} = V_0(x) - E_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (88)$$

y las definiciones (81), llegamos a

$$\frac{\psi_n^{(1)'}}{\psi_n^{(1)}} = -\alpha_1(E_0) - \frac{E_0 - E_n}{\alpha_1(E_0) - \alpha_1(E_n)} = \beta(E_n) = \frac{\phi_n^{(1)'}}{\phi_n^{(1)}}, \quad (89)$$

para $n = 1, 2, \dots$, de modo que $\psi_n^{(1)}$ y $\phi_n^{(1)}$ son como se ha dicho. Es claro además que estas ecuaciones son válidas intervalo a intervalo.

Ahora bien, en lo que concierne a $\psi_0^{(0)}$, es claro que el Teorema 1 no tiene sentido si $\alpha_k(x) = \alpha_l(x)$ y $\epsilon_k = \epsilon_l$. De forma similar, no podemos tomar $E_n = E_0$ en (83): los factores de normalización $1/\sqrt{E_n - E_0}$, que se pusieron con el objeto de tener realmente curvas a valor $SL(2, \mathbb{R})$, dejarían de tener sentido porque tales matrices, si dejamos aparte dichos factores, tendrían determinante cero. Esto significa que *no* se puede usar una transformación del tipo (84) con $E_n = E_0$ para la función $\alpha_1(E_0)$ propiamente dicha. Pero existe una función asociada a $\psi_0^{(1)}$ que es solución de una ecuación de Riccati, dada por (75), es decir, la nueva función $\beta(E_0) = -\alpha_1(E_0)$ satisface una ecuación del tipo (85) para $n = 0$, que no es otra que (71). En definitiva, el hecho de que $A_1^\dagger(E_0)\psi_0^{(0)} = 0$, se manifiesta al nivel de soluciones de ecuaciones de Riccati en el hecho de que $\alpha_1(E_0)$ no puede ser transformada en el sentido explicado. Recíprocamente, no es posible escribir $\beta(E_0) = \Theta(B_0, \alpha_1(E_0))$ para algún $B_0 \in \mathcal{G}$.

Acabamos de explicar las características del problema de dos Hamiltonianos $A_1(E_0)$ -relacionados por medio del Teorema 1, que a su vez es un caso particular del Teorema 2. Mostramos a continuación, por completitud, cómo se aplica al mismo problema su contrapartida al nivel de soluciones de ecuaciones de Schrödinger, dada por el Teorema 3.

Consideremos de nuevo el conjunto de ecuaciones (80). Retenemos la correspondiente a $n = 0$, la cual desempeñará el papel de la ecuación (65). Todas las demás desempeñarán el papel de la ecuación (64). Para cada $n = 1, 2, \dots$, la función γ debe estar definida por

$$-E_0 = -E_n + \frac{1}{\gamma^2},$$

de donde podemos elegir $\gamma = 1/\sqrt{E_n - E_0}$. De acuerdo con (66) y (67) las funciones

$$\varphi_n^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{E_n - E_0}} \left(-\frac{d}{dx} + \frac{\psi_0^{(0)'}}{\psi_0^{(0)}} \right) \psi_n^{(0)}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (90)$$

satisfacen

$$-\varphi_n^{(0)''} + (V_0(x) - 2\alpha_1'(E_0) - E_n)\varphi_n^{(0)} = 0, \quad n = 1, 2, \dots,$$

donde se ha usado que $\alpha_1(E_0) = \psi_0^{(0)'}/\psi_0^{(0)}$. De este modo, hemos recuperado las funciones propias normalizadas (77) del nuevo potencial $V_1(x) = V_0(x) - 2\alpha_1'(x, E_0)$.

7. Ejemplos ilustrativos

Aplicaremos en esta sección el Teorema 3 a algunos casos donde $\gamma(x)$ no es constante, lo cual proporciona una situación que generaliza la técnica de entrelazamiento usual. Sin embargo, hemos de notar que con este método seremos capaces de encontrar potenciales para los cuales conoceremos exactamente *una* autofunción y su autovalor correspondiente. Usaremos una ligera generalización de dos conocidos tipos de potenciales, a saber, los potenciales del oscilador y de Coulomb en problema radial, generalización que consiste en tomar los intervalos más amplios para los parámetros que aparecen en los potenciales, de forma que sea posible encontrar funciones propias de cuadrado integrable.

7.1 Potenciales del tipo oscilador radial

Consideremos la familia de potenciales

$$V_{l,b}(x) = \frac{b^2 x^2}{4} + \frac{l(l+1)}{x^2}, \quad (91)$$

donde $x \in (0, \infty)$ y l, b son parámetros reales. Cada miembro puede verse como parte de un par de potenciales compañeros invariantes de forma, respecto de la traslación del parámetro $l \rightarrow l+1$. Este hecho permite encontrar los autovalores y las funciones propias

correspondientes, incluso normalizadas, de una forma puramente algebraica. La clave es encontrar, en lo que a este caso respecta, funciones en el núcleo del operador diferencial lineal de primer orden $d/dx - (l + 1)/x + bx/2$ que sean además normalizables respecto de la norma inducida por el producto escalar usual en $L^2((0, \infty))$. Ésto proporcionará la función propia del estado fundamental. Las de los estados excitados se obtienen por aplicación iterada del operador $-d/dx - (l + 1)/x + bx/2$, con cierto l apropiado en cada paso, multiplicado por ciertos factores. Ver [1, 8] para más detalles. Sin embargo, es importante notar que con este procedimiento, se obtienen las condiciones de contorno de las funciones propias como consecuencia más que ser condiciones *a priori*. El resultado para esta familia de potenciales son las funciones propias normalizadas (salvo una fase) [19]

$$\zeta_k^{l,b}(x) = \sqrt{\frac{\Gamma(k+1)}{\Gamma(k+l+3/2)}} \left(\frac{b^{2l+3}}{2^{2l+1}}\right)^{1/4} x^{l+1} e^{-bx^2/4} L_k^{l+1/2}\left(\frac{bx^2}{2}\right), \quad (92)$$

donde $k = 0, 1, 2, \dots$, para $l > -3/2$ y $b > 0$. Se introduce la notación $L_n^a(u)$ para el polinomio de Laguerre de grado n y parámetro a en la variable u .

Notar que en el intervalo $l \in (-3/2, -1)$ estas autofunciones van a infinito cuando x tiende a cero, en contra de la condición usual de que vayan a cero, a pesar de ser de cuadrado integrable. Sin embargo, para $l > -1$, satisfacen tal condición. Lo que ocurre es que los potenciales de la familia (91) proporcionan Hamiltonianos $-d^2/dx^2 + V_{l,b}(x)$, con dominio $C_0^\infty(0, \infty)$ de funciones diferenciables de soporte compacto en $(0, \infty)$, esencialmente autoadjuntos para el rango $b > 0$ y $l > -3/2$, con extensiones autoadjuntas diferentes en cada uno de los intervalos $l \in (-3/2, -1)$ y $l \in (-1, \infty)$, incluyendo la primera de ellas autofunciones que no necesariamente van a cero cuando $x \rightarrow 0$ [20]. Veremos además que una de las funciones propias que aparecen cuando $l \in (-3/2, -1)$ proporciona la aplicación más interesante de nuestro nuevo método en lo que se refiere a la familia (91).

En ambos casos, los valores propios de los potenciales (91) correspondientes a las autofunciones (92) son [19]:

$$E_k^{l,b} = b\left(2k + l + \frac{3}{2}\right), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (93)$$

Si $b = 2$ estos autovalores se reducen a los dados en [21]. Comparar también con las autofunciones y autovalores dados en [22, pp. 391-2].

Ejemplo 1. Deseamos utilizar el Teorema 3, usando dos potenciales de la familia (91) obtenidos para diferentes valores *concretos* de l . La diferencia entre ambos potenciales debe ser una función positiva y sin ceros en $(0, \infty)$, con el objeto de poder definir una

función $\gamma(x)$ con los requerimientos del Teorema. Tenemos

$$V_{l,b}(x) - V_{l-r,b}(x) = \frac{(2l+1-r)r}{x^2} = \frac{1}{\gamma_{l,r}^2(x)},$$

donde $r > 0$, de modo que en principio elegimos $\gamma_{l,r}(x) = x/\sqrt{r(2l+1-r)}$. Como potencial original hemos elegido $V_{l-r,b}(x)$, para el cual se satisfacen las siguientes ecuaciones:

$$-\frac{d^2 \zeta_k^{l-r,b}(x)}{dx^2} + \left\{ V_{l-r,b}(x) - b \left(2k+l-r + \frac{3}{2} \right) \right\} \zeta_k^{l-r,b}(x) = 0,$$

para todo $k = 0, 1, 2, \dots$. Tomaremos *una* de estas ecuaciones como la ecuación original (64). Ahora debemos resolver la ecuación del tipo (65)

$$-\frac{d^2 \phi_v}{dx^2} + \left\{ V_{l,b}(x) - b \left(2k+l-r + \frac{3}{2} \right) \right\} \phi_v = 0,$$

es decir, encontrar una solución apropiada $\phi_v(x)$ definida en $(0, \infty)$. Como (92) son las funciones propias de $V_{l,b}(x)$, la idea más inmediata es elegir $\phi_v(x)$ como $\zeta_m^{l,b}(x)$ para algún $m \in \mathbb{N}$ apropiado, que estará obviamente definido por la condición $E_m^{l,b} = b(2k+l-r+3/2)$. Tenemos entonces que $m = k - r/2$. Como m, k son enteros no negativos, es necesario que $k \geq r/2$ y que r sea un entero par no negativo.

De acuerdo con la ecuación (67), el potencial final, para el cual conoceremos una función propia con autovalor asociado $b(2k+l-r+3/2)$ es

$$V_{l-r,b}(x) - 2 \left(\frac{\gamma'_{l,r}}{\gamma_{l,r}} v_m^{l,b} + \frac{dv_m^{l,b}}{dx} \right) + \frac{\gamma''_{l,r}}{\gamma_{l,r}} = V_{l-r,b}(x) - 2 \left(\frac{v_m^{l,b}}{x} + \frac{dv_m^{l,b}}{dx} \right),$$

donde se ha usado

$$v_m^{l,b}(x) = \frac{1}{\zeta_m^{l,b}(x)} \frac{d\zeta_m^{l,b}(x)}{dx}$$

y la expresión de $\gamma_{l,r}(x)$. Debido a la presencia de los polinomios de Laguerre en (92), las funciones $\zeta_m^{l,b}(x)$ poseen m ceros en $(0, \infty)$ y entonces $v_m^{l,b}(x)$ tendrán m singularidades en el mismo intervalo, y como consecuencia también el potencial final. Deseamos evitar tales singularidades de modo que elegimos $m = 0$ y por tanto $k = r/2$. En otras palabras, hemos de transformar la función propia con k entero y positivo del potencial $V_{l-2k,b}(x)$, con autovalor asociado $b(l+3/2)$, usando el estado fundamental del potencial $V_{l,b}(x)$, el cual posee el mismo valor propio de energía. Como

$$-2 \left(\frac{v_0^{l,b}}{x} + \frac{dv_0^{l,b}}{dx} \right) = 2b,$$

el potencial final es simplemente $V_{l-2k,b}(x) + 2b$. Tras algunos cálculos obtenemos que la función propia final, proporcionada por (66), es de hecho

$$\eta_k^{l,b}(x) = \gamma_{l,2k}(x) \left(-\frac{d\zeta_k^{l-2k,b}(x)}{dx} + v_0^{l,b} \zeta_k^{l-2k,b}(x) \right) = \zeta_{k-1}^{l-2k,b}(x).$$

De este modo hemos recuperado el potencial original $V_{l-2k,b}(x)$ pero desplazado en energía la cantidad de $2b$. Este desplazamiento se refleja también en el índice k de la función propia final. Notar que $\eta_k^{l,b}(x)$ está normalizada.

Ejemplo 2. Consideraremos ahora la familia de potenciales, relacionada obviamente con la del ejemplo precedente

$$V_{l,b}(x) = \frac{b^2 x^2}{4} + \frac{l(l+1)}{x^2} - b\left(l + \frac{3}{2}\right), \quad (94)$$

donde $x \in (0, \infty)$ y $l > -3/2$, $b > 0$. Las funciones propias normalizadas son también (92), con las mismas propiedades, pero los valores propios correspondientes son ahora

$$E_k^{l,b} = 2bk, \quad (95)$$

donde $k = 0, 1, 2, \dots$

Usaremos también dos potenciales de la familia (94) con valores diferentes de l . Tenemos ahora

$$V_{l,b}(x) - V_{l+r,b}(x) = r\left(b - \frac{2l+1+r}{x^2}\right),$$

donde r es un entero positivo. Como $b > 0$, la condición para que el miembro de la derecha sea siempre positivo es que $2l+1+r < 0$. Podemos encontrar una solución si $r = 1$, ya que entonces debe ocurrir $2l+2 < 0$ o de forma equivalente $l < -1$. Para $r = 2, 3, \dots$, encontraríamos $l < -3/2$, lo cual es incompatible con el rango de definición original de l . De este modo hemos de elegir $r = 1$ y $-3/2 < l < -1$. La función $\gamma(x)$ apropiada es entonces

$$\gamma_{l,b}(x) = \left(b - \frac{2l+2}{x^2}\right)^{-1/2}.$$

Ahora debemos transformar una función propia de $V_{l+1,b}(x)$ usando otra de $V_{l,b}(x)$ con la misma energía, es decir, con la misma k . Con el objeto de evitar singularidades en el potencial final, como en el ejemplo anterior, debemos elegir $k = 0$. Por tanto, transformamos la autofunción $\zeta_0^{l+1,b}(x)$, solución de

$$-\frac{d^2 \zeta_0^{l+1,b}(x)}{dx^2} + V_{l+1,b}(x) \zeta_0^{l+1,b}(x) = 0, \quad (96)$$

usando la función $\zeta_0^{l,b}(x)$, solución de una ecuación similar a (96) con l en lugar de $l+1$.

El potencial final es, después de algunos cálculos,

$$\begin{aligned} V_{l,b}^{im}(x) &= V_{l+1,b}(x) - 2\left(\frac{\gamma'_{l,b}}{\gamma_{l,b}} v_0^{l,b} + \frac{dv_0^{l,b}}{dx}\right) + \frac{\gamma''_{l,b}}{\gamma_{l,b}} \\ &= \frac{b^2 x^2}{4} + \frac{(l+1)(l+2)}{x^2} - b\left(l + \frac{3}{2}\right) + \frac{6b(l+1)}{(bx^2 - 2(l+1))^2}, \end{aligned}$$

para el cual obtenemos la función propia con autovalor nulo

$$\begin{aligned}\eta_0^{l,b}(x) &= \gamma_{l,b}(x) \left(-\frac{d\zeta_0^{l+1,b}(x)}{dx} + v_0^{l,b} \zeta_0^{l+1,b}(x) \right) \\ &= \sqrt{\frac{b^{l+5/2}}{2^{l+3/2}\Gamma(l+5/2)}} \frac{x^{l+2} e^{-bx^2/4}}{\sqrt{bx^2 - 2(l+1)}},\end{aligned}$$

como puede comprobarse por cálculo directo. Notar que $bx^2 - 2(l+1) > 0$ ya que $x > 0$, $l < -1$ y $b > 0$, de modo que $V_{l,b}^{im}(x)$ y $\eta_0^{l,b}(x)$ están definidos en el intervalo $(0, \infty)$ completo. Notar también que $\eta_0^{l,b}(x)$ no tiene nodos en tal intervalo. Y que tiende a cero cuando x tiende a 0 ó ∞ suficientemente rápido para ser una función propia de cuadrado integrable. En efecto, puede comprobarse fácilmente que

$$(\eta_0^{l,b}, \eta_0^{l,b}) = \int_0^\infty |\eta_0^{l,b}(x)|^2 dx = \frac{e^{-l-1}}{2} (-l-1)^{l+3/2} \Gamma\left(-l - \frac{3}{2}, -l-1\right),$$

donde $\Gamma(\alpha, x)$ denota la función Gamma incompleta definida por $\Gamma(\alpha, x) = \int_x^\infty e^{-t} t^{\alpha-1} dt$, simplemente realizando el cambio de variable $bx^2 = 2t$ y usando [23, Fórmula 8.353.3]:

$$\Gamma(\alpha, x) = \frac{e^{-x} x^\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^\infty \frac{e^{-t} t^{-\alpha}}{t+x} dt, \quad \text{Re } \alpha < 1, x > 0.$$

Se obtiene entonces que la norma de la función propia final es función de l , que toma valores reales sólomente si $l < -1$, lo cual coincide con el rango de aplicación de nuestro método en este ejemplo.

7.2 Potenciales de tipo Coulomb radiales

Consideremos ahora la familia de potenciales

$$V_{l,q}(x) = \frac{2q}{x} + \frac{l(l+1)}{x^2}, \quad (97)$$

donde $x \in (0, \infty)$ y $q \neq 0$, l son parámetros reales. Esta familia comparte varias características con la dada por (91). Para empezar, cada miembro puede verse también como parte de un par de potenciales compañeros invariantes de forma, respecto de la traslación del parámetro $l \rightarrow l+1$. De forma similar a la anterior, se pueden obtener las autofunciones normalizadas (salvo una fase) [19]

$$\zeta_k^{l,q}(x) = \sqrt{\frac{\Gamma(k+1)}{\Gamma(2l+2+k)}} \frac{2^{l+1} |q|^{l+3/2}}{(k+l+1)^{l+2}} x^{l+1} e^{\frac{qx}{k+l+1}} L_k^{2l+1}\left(\frac{-2qx}{k+l+1}\right). \quad (98)$$

Estas autofunciones son de cuadrado integrable sólomente en los casos siguientes: en el rango $l \in (-3/2, -1)$ y $q > 0$, sólomente la función propia con $k = 0$. Para $l \in (-1, \infty)$ y $q < 0$, las funciones (98) son normalizables para todo $k = 0, 1, 2, \dots$. La autofunción normalizable en el rango $l \in (-3/2, -1)$, $q > 0$ se va a infinito cuando x tiende a cero,

mientras que las demás van a cero cuando $x \rightarrow 0$. De nuevo, la razón es la existencia de extensiones autoadjuntas diferentes en los dos rangos, siendo los Hamiltonianos $H_{l,q} = -\frac{d^2}{dx^2} + V_{l,q}(x)$, con dominio $C_0^\infty(0, \infty)$, esencialmente autoadjuntos si $l > -3/2$ y $q/(l+1) < 0$.

Los autovalores correspondientes a las funciones propias (98) para la familia (97) son [19]:

$$E_k^{l,q} = -\frac{q^2}{(k+l+1)^2}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (99)$$

Si $q = -1$ y por tanto $l > -1$, recuperamos el espectro dado, por ejemplo, en [24]. Comparar también con [22, p. 389].

Ejemplo 3. Usaremos el Teorema 3 en esta situación, siguiendo los pasos del ejemplo 1. Queremos usar dos potenciales de la familia (97) con diferentes valores concretos de l . Tenemos

$$V_{l,q}(x) - V_{l-r,q}(x) = \frac{(2l+1-r)r}{x^2} = \frac{1}{\gamma_{l,r}^2(x)},$$

donde $r > 0$, de modo que podemos elegir de nuevo la función $\gamma(x)$ como $\gamma_{l,r}(x) = x/\sqrt{r(2l+1-r)}$. Hemos de transformar una función propia $\zeta_k^{l-r,q}(x)$ que satisface

$$-\frac{d^2 \zeta_k^{l-r,q}(x)}{dx^2} + \left\{ V_{l-r,q}(x) + \frac{q^2}{(k+l-r+1)^2} \right\} \zeta_k^{l-r,q}(x) = 0,$$

para algún $k = 0, 1, 2, \dots$, usando una solución ϕ_v apropiada de

$$-\frac{d^2 \phi_v}{dx^2} + \left\{ V_{l,q}(x) + \frac{q^2}{(k+l-r+1)^2} \right\} \phi_v = 0.$$

Como (98) expresa las funciones propias de $V_{l,q}(x)$, elegiremos $\phi_v(x)$ como $\zeta_m^{l,q}(x)$ para cierto $m \in \mathbb{N}$, que estará definido por la condición $E_m^{l,q} = -q^2/(k+l-r+1)^2$, cuya solución más sencilla es $m = k-r$. Al ser m, k números enteros no negativos, $k \geq r$, y r debe ser un entero no negativo a su vez.

Análogamente a lo que ocurría en el ejemplo 1, el único m que podemos elegir con el objeto de evitar singularidades en el potencial final es $m = 0$ y por tanto $k = r$. Entonces, hemos de transformar la función propia correspondiente al entero $k > 0$ del potencial $V_{l-k,q}(x)$, con autovalor $-q^2/(l+1)^2$, usando el estado fundamental del potencial $V_{l,q}(x)$, con el mismo valor propio. Denotando $v_0^{l,q}(x) = (1/\zeta_0^{l,q}(x))d\zeta_0^{l,q}(x)/dx$ tenemos que el potencial final es

$$V_{l-k,q}(x) - 2\left(\frac{v_0^{l,q}}{x} + \frac{dv_0^{l,q}}{dx}\right) = V_{l-k,q}(x) - \frac{2q}{(l+1)x} = V_{l-k,q/(l+1)}(x).$$

Tras algunos cálculos, encontramos que la función propia final es

$$\eta_k^{l,q}(x) = \gamma_{l,k}(x) \left(-\frac{d\zeta_k^{l-k,q}(x)}{dx} + v_0^{l,q} \zeta_k^{l-2,q}(x) \right) = \sqrt{\frac{l}{l+1}} \zeta_{k-1}^{l-k,q/(l+1)}(x).$$

Por tanto, recuperamos el potencial original $V_{l-k,q}(x)$ pero con la *constante de acoplo* q reescalada por el factor $l/(l+1)$. Este cambio de escala se refleja también en la autofunción final, que por otra parte tiene norma $\sqrt{l/(l+1)}$. No es difícil ver que en el rango de aplicación de este ejemplo se tiene $l/(l+1) > 0$.

Ejemplo 4. Consideraremos ahora la familia de potenciales del ejemplo precedente pero modificada ligeramente, es decir, tomaremos

$$V_{l,q}(x) = \frac{2q}{x} + \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{q^2}{(l+1)^2}, \quad (100)$$

donde de nuevo $x \in (0, \infty)$ y $q \neq 0$, l , son parámetros reales.

Las funciones propias normalizadas son también las dadas por (98), con las particularidades ya indicadas, aunque los valores propios correspondientes son ahora

$$E_k^{l,q} = \frac{q^2}{(l+1)^2} - \frac{q^2}{(k+l+1)^2}, \quad (101)$$

donde $k = 0, 1, 2, \dots$

Como en los ejemplos precedentes, usaremos dos potenciales de la familia (100) con diferentes valores de l . Siguiendo la línea del ejemplo 2, nuestra primera idea es tratar de usar el potencial $V_{l+1,q}(x)$ como el inicial y $V_{l,q}(x)$ como el intermedio, cuando $-3/2 < l < -1$. Pero si hemos de elegir una solución física del inicial (es decir, de cuadrado integrable), debemos tomar $q < 0$. Entonces, el potencial intermedio no tendrá autofunciones de cuadrado integrable. Una manera simple de superar esta aparente dificultad es simplemente cambiar el signo de q en el problema intermedio, que es lo que haremos en este ejemplo. Sin embargo, es posible usar incluso una solución no de cuadrado integrable en el problema intermedio, sin cambiar el signo de q , proporcionando al final interesantes resultados físicos, como veremos en el ejemplo siguiente a éste.

Además, del análisis de estos dos ejemplos puede verse que el rango $-3/2 < l < -1$ es en efecto el único posible si imponemos que q tenga el mismo valor absoluto en el potencial inicial y en el intermedio.

Suponiendo $q < 0$, calculamos la diferencia

$$V_{l,-q}(x) - V_{l+1,q}(x) = \frac{q^2}{(l+1)^2} - \frac{q^2}{(l+2)^2} - \frac{2(l+1)}{x^2} - \frac{4q}{x}.$$

Los dos primeros términos coinciden con $E_1^{l,q} > 0$. El tercero y cuarto son siempre positivos para $x \in (0, \infty)$ si $l < -1$ y $q < 0$. La función $\gamma(x)$ apropiada se puede tomar como

$$\gamma_{l,q}(x) = \frac{x}{\sqrt{\frac{(2l+3)q^2x^2}{(l+1)^2(l+2)^2} - 4qx - 2(l+1)}}.$$

Los espectros, dados por (101), de dos miembros de la familia (100) con valores de l que difieren en una unidad, s3lamente coinciden en la energ3a de los estados fundamentales de ambos. Como $E_0^{l,q} = 0$ para todos l, q , hemos de transformar el estado fundamental de $V_{l+1,q}(x)$ usando el de $V_{l,-q}(x)$, ambos con energ3a nula. El potencial final es, tras algunos c3lculos,

$$\begin{aligned} V_{l,q}^{im}(x) &= V_{l+1,q}(x) - 2\left(\frac{\gamma'_{l,q} v_0^{l,-q}}{\gamma_{l,q}} + \frac{dv_0^{l,-q}}{dx}\right) + \frac{\gamma''_{l,q}}{\gamma_{l,q}} \\ &= \frac{2q}{x} + \frac{(l+1)(l+2)}{x^2} + \frac{q^2}{(l+2)^2} \\ &\quad + \frac{2(l+1)q\{2(l+1)(l+2)^3 + (2l^2 + 6l + 5)qx\}}{2(l+1)^2(l+2)^2(l+1+2qx)x - (2l+3)q^2x^3} \\ &\quad + \frac{4(l+1)^2(l+2)^2(2l+3)q^3x^2}{x\{2(l+1)^2(l+2)^2(l+1+2qx) - (2l+3)q^2x^2\}^2} \\ &\quad - \frac{2(l+1)^3(l+2)^2q\{(2l^3 + 10l^2 + 10l - 1)qx + 4(l+1)^2(l+2)^2\}}{x\{2(l+1)^2(l+2)^2(l+1+2qx) - (2l+3)q^2x^2\}^2}, \end{aligned}$$

donde $v_0^{l,-q}(x) = (1/\zeta_0^{l,-q}(x))d\zeta_0^{l,-q}(x)/dx$. La autofunci3n que se obtiene para este potencial, con valor propio cero, es

$$\begin{aligned} \eta_0^{l,q}(x) &= \gamma_{l,q}(x) \left(-\frac{d\zeta_0^{l+1,q}(x)}{dx} + v_0^{l,-q}\zeta_0^{l+1,q}(x) \right) \\ &= -\frac{2^{l+1}|q|^{l+5/2}e^{i\frac{\pi x}{2}}x^{l+2}\{(l+1)(l+2) + (2l+3)qx\}}{(l+1)(l+2)^{l+4}\sqrt{\Gamma(2l+4)}\sqrt{\frac{(2l+3)q^2x^2}{(l+1)^2(l+2)^2} - 4qx - 2(l+1)}}. \end{aligned}$$

Como $-3/2 < l < -1$ y $q < 0$, $\eta_0^{l,q}(x)$ no tiene nodos ni singularidades en $(0, \infty)$. Adem3s, es de cuadrado integrable, ya que la integral

$$(\eta_0^{l,q}, \eta_0^{l,q}) = \int_0^\infty |\eta_0^{l,q}(x)|^2 dx,$$

se vuelve tras el cambio de variable $t = 2|q|x/(l+2)$,

$$\frac{1}{2(l+2)\Gamma(2l+4)}\{4(l+1)I_1(l) - 4(l+1)(2l+3)I_2(l) + (2l+3)^2I_3(l)\},$$

donde

$$I_k(l) = \int_0^\infty \frac{e^{-t}t^{2l+3+k}}{d(l,t)} dt, \quad k = 1, 2, 3,$$

y $d(l,t) = (3+2l)t^2 + 8(l+2)(l+1)^2t - 8(l+1)^3$. Estas integrales convergen cuando $l \in (-3/2, -1)$. No hemos encontrado una expresi3n final expl3cita de la expresi3n completa, pero la hemos evaluado num3ricamente y hemos comprobado que toma valores positivos reales en dicho intervalo. Es una funci3n estrictamente creciente con l , que var3a de aproximadamente 0.4 a 1. De acuerdo con estas propiedades, la funci3n $\eta_0^{l,q}(x)$ debe ser el estado fundamental del potencial final encontrado.

Ejemplo 5. Como ejemplo final, consideraremos una variación del anterior en el sentido ya indicado. Es decir, en el problema intermedio consideraremos una solución no de cuadrado integrable, y veremos cómo al final se encuentra un resultado físico de interés.

Tomemos de nuevo la familia de potenciales (100). Elegimos $V_{l+1,q}(x)$ como el potencial inicial, con $-3/2 < l < -1$ y $q < 0$, y $V_{l,q}(x)$ como potencial intermedio. Los espectros asociados coinciden únicamente en la energía nula como ya se ha dicho. No obstante, en el segundo caso la función propia correspondiente no es de cuadrado integrable. Tomando la diferencia

$$V_{l,q}(x) - V_{l+1,q}(x) = \frac{q^2}{(l+1)^2} - \frac{q^2}{(l+2)^2} - \frac{2(l+1)}{x^2},$$

vemos de nuevo que los dos primeros términos son $E_1^{l,q} > 0$ y que el tercero es positivo siempre para $x \in (0, \infty)$ si $l < -1$, de modo que tomamos

$$\gamma_{l,q}(x) = \frac{x}{\sqrt{\frac{(2l+3)q^2x^2}{(l+1)^2(l+2)^2} - 2(l+1)}}.$$

Ahora, hemos de transformar el estado fundamental de $V_{l+1,q}(x)$ usando la función propia de $V_{l,q}(x)$ con autovalor nulo, que no es de cuadrado integrable. El potencial final es en este caso

$$\begin{aligned} V_{l,q}^{im}(x) &= V_{l+1,q}(x) - 2 \left(\frac{\gamma'_{l,q} v_0^{l,q}}{\gamma_{l,q}} + \frac{dv_0^{l,q}}{dx} \right) + \frac{\gamma''_{l,q}}{\gamma_{l,q}} = \frac{q^2}{(l+2)^2} \\ &+ \frac{2q}{x} + \frac{(l+1)(l+2)}{x^2} - \frac{2(l+1)q\{2(l+1)(l+2)^2 + (2l+3)qx\}}{2(l+1)^3(l+2)^2x - (2l+3)q^2x^3} \\ &+ \frac{6(l+1)^3(l+2)^2(2l+3)q^2}{\{2(l+1)^3(l+2)^2 - (2l+3)q^2x^2\}^2}, \end{aligned}$$

donde $v_0^{l,q}(x) = (1/\zeta_0^{l,q}(x)) d\zeta_0^{l,q}(x)/dx$. Obtenemos también la función propia del potencial final, con autovalor nulo

$$\begin{aligned} \eta_0^{l,q}(x) &= \gamma_{l,q}(x) \left(-\frac{d\zeta_0^{l+1,q}(x)}{dx} + v_0^{l,q} \zeta_0^{l+1,q}(x) \right) \\ &= -\frac{2^{l+1}|q|^{l+5/2} e^{\frac{qx}{l+2}} x^{l+2} \{(l+1)(l+2) - qx\}}{(l+1)(l+2)^{l+4} \sqrt{\Gamma(2l+4)} \sqrt{\frac{(2l+3)q^2x^2}{(l+1)^2(l+2)^2} - 2(l+1)}}. \end{aligned}$$

Como $-3/2 < l < -1$ y $q < 0$, $\eta_0^{l,q}(x)$ no tiene singularidades en $x \in (0, \infty)$ pero posee un nodo en el valor $x_n = (l+1)(l+2)/q > 0$. Es además de cuadrado integrable, ya que la integral

$$(\eta_0^{l,q}, \eta_0^{l,q}) = \int_0^\infty |\eta_0^{l,q}(x)|^2 dx$$

se transforma bajo el cambio de variable $t = 2|q|x/(l+2)$ en

$$\frac{1}{2(l+2)\Gamma(2l+4)} \{4(l+1)^2 I_1(l) + 4(l+1) I_2(l) + I_3(l)\},$$

donde

$$I_k(l) = \int_0^\infty \frac{e^{-t} t^{2l+3+k}}{d(l, t)} dt, \quad k = 1, 2, 3,$$

siendo ahora $d(l, t) = (3 + 2l)t^2 - 8(l + 1)^3$. Estas integrales pueden calcularse explícitamente con la ayuda de [23, Fórmula 8.389.6]:

$$\int_0^\infty \frac{t^\nu e^{-\mu t}}{\beta^2 + t^2} dt = \frac{\Gamma(\nu)}{2} \beta^{\nu-1} \{ e^{i(\mu\beta + (\nu-1)\pi/2)} \Gamma(1 - \nu, i\beta\mu) + e^{-i(\mu\beta + (\nu-1)\pi/2)} \Gamma(1 - \nu, -i\beta\mu) \},$$

$$\text{Re } \beta > 0, \text{ Re } \mu > 0, \text{ Re } \nu > -1.$$

En este caso, $\mu = 1 > 0$, $\beta = \sqrt{-8(l+1)^3/(2l+3)}$ es real y positivo para $l \in (-3/2, -1)$ y ν es alternativamente $2l + 4$, $2l + 5$ y $2l + 6$, todos ellos mayores que -1 . La expresión final para $\int_0^\infty |\eta_0^{l,q}(x)|^2 dx$ es

$$\frac{4(l+1)^2 i_1(l) + 8(l+1)(l+2) i_2(l) + 2(2l+5)(l+2) i_3(l)}{4(l+2)(2l+3)},$$

donde

$$i_k(l) = \beta(l)^{2l+2+k} \{ e^{ig(l,k)} \Gamma(-2l-2-k, i\beta(l)) + e^{-ig(l,k)} \Gamma(-2l-2-k, -i\beta(l)) \}, \quad k = 1, 2, 3,$$

siendo $g(l, k) = \beta(l) + (2l + 2 + k)\pi/2$ y $\beta(l) = \sqrt{-8(l+1)^3/(2l+3)}$. El resultado final es una función real, que toma valores positivos y es estrictamente decreciente desde aproximadamente 3 a 1 si $l \in (-3/2, -1)$. Por tanto, el autoestado calculado debe ser el primer estado excitado del potencial final, lo que implica que debe existir un autoestado fundamental para el mismo potencial con energía menor que cero, según la referencia de energías que se ha tomado.

8. Conclusiones y perspectivas

A lo largo de este artículo hemos estudiado varios hechos importantes referentes al problema de dos Hamiltonianos A -relacionados o entrelazados. Con este fin, hemos usado varias ideas grupo-teóricas que son a la vez sencillas pero enormemente poderosas como herramienta matemática.

Los resultados más importantes son los siguientes. En primer lugar, hemos establecido la relación entre el algoritmo de diferencias finitas introducido en [4] y el grupo de transformaciones en el conjunto de ecuaciones de Riccati introducido en [11], mostrando que el primero es un caso particular del segundo.

Segundo, hemos encontrado los elementos más generales de tal grupo de transformaciones que preservan el subconjunto de ecuaciones de Riccati que pueden ser identificadas

con el conjunto de ecuaciones diferenciales del tipo Schrödinger por medio del procedimiento de reducción explicado en la sección 3. De este modo hemos generalizado los resultados del algoritmo de diferencias finitas a una situación que creemos completamente nueva.

Tercero, hemos explicado el problema de dos Hamiltonianos A -relacionados o entrelazados en términos del mencionado algoritmo de diferencias finitas y por ende, en términos del grupo de transformaciones en el conjunto de ecuaciones de Riccati, conjuntamente con el procedimiento de reducción de la sección 3, proporcionando una nueva perspectiva de la naturaleza de estos problemas.

Finalmente, hemos ilustrado con algunos ejemplos el uso de los nuevos Teoremas encontrados, encontrando potenciales para los cuales un autoestado y su correspondiente energía son conocidos exactamente por medio del método. Algunos de estos potenciales no parecen haber sido estudiados antes.

Sin embargo, estas cuestiones son simplemente el punto de partida para otras nuevas entre las que proponemos las siguientes. Como ya se ha dicho, nuestros nuevos Teoremas generalizan en cierto sentido el problema de los Hamiltonianos A -relacionados o entrelazados. Pero en esta situación generalizada no está claro aún si es posible definir ciertos operadores Hamiltonianos que factorizen en operadores diferenciales de orden inferior, aunque ya conocemos un candidato para generalizar el operador A^\dagger de la técnica de entrelazamiento usual.

Otro punto de gran interés es la posterior aplicación de los nuevos Teoremas aquí encontrados, principalmente en dos direcciones. Una es, obviamente, el intentar usar otros potenciales diferentes de los del tipo oscilador armónico y de Coulomb en problema radial. La otra está inspirada por el ejemplo 5, donde hemos considerado explícitamente una función propia no normalizable, aunque sin ceros, proporcionando sin embargo un resultado físico de interés. Deberíamos intentar resolver la ecuación de tipo Schrödinger intermedia, o bien su ecuación de Riccati asociada, con total generalidad y buscar las soluciones particulares sin ceros en el intervalo de interés en el primer caso o sin singularidades en el segundo, incluso cuando no tengan una interpretación física. En cierto sentido esto sería adaptar a nuestro nuevo método actual la idea principal de Mielnik en [25], desarrollada más tarde en [26, 27, 28] y otros artículos, de tomar en cierta ecuación de Riccati todas las soluciones posibles sin singularidades.

Esperamos proporcionar algunas respuestas y resultados referentes a éstas y otras cuestiones en futuros trabajos.

Agradecimientos

El autor agradece al Ministerio de Educación y Cultura una beca de investigación FPI, proyecto de investigación PB96-0717. Asimismo, agradece al Dr. Manuel Asorey y especialmente al Dr. José F. Cariñena sus muy útiles comentarios e ideas acerca de este trabajo.

Referencias

- [1] L. Infeld y T.E. Hull, *Rev. Mod. Phys.* **23** (1951), 21.
- [2] L.É. Gendenshtein y I.V. Krive, *Soviet Phys. Usp.* **28** (1985), 645.
- [3] J.F. Cariñena, G. Marmo, A.M. Perelomov y M.F. Rañada, *Int. J. Mod. Phys. A* **13** (1998), 4913.
- [4] D.J. Fernández, V. Hussin y B. Mielnik, *Phys. Lett. A* **244** (1998), 309.
- [5] D.J. Fernández y V. Hussin, *J. Phys. A: Math. Gen.* **32** (1999), 3603.
- [6] F. Cooper, A. Khare y U.P. Sukhatme, *Phys. Rep.* **251** (1995), 267.
- [7] V.B. Matveev y M.A. Salle, "Darboux Transformations and Solitons," Springer-Verlag, Berlin and Heidelberg, 1991.
- [8] J.F. Cariñena y A. Ramos, *Rev. Math. Phys.*, en prensa.
- [9] J.F. Cariñena y A. Ramos, *J. Phys. A: Math. Gen.* **33** (2000), 3467.
- [10] D.J. Fernández, *Int. J. Mod. Phys. A* **12** (1997), 171.
- [11] J.F. Cariñena y A. Ramos, *Int. J. Mod. Phys. A* **14** (1999), 1935.
- [12] A. Galindo y P. Pascual, "Mecánica Cuántica," 1a. ed., Alhambra, Madrid, 1978.
- [13] A. Messiah, "Mécanique Quantique," Dunod, Paris, 1964.
- [14] J.F. Cariñena, G. Marmo y J. Nasarre, *Int. J. Mod. Phys. A* **13** (1998), 3601.
- [15] F. Calogero, *J. Math. Phys.* **4** (1963), 427.
- [16] V.M. Strelchenya, *J. Phys. A: Math. Gen.* **24** (1991), 4965.
- [17] P. Libermann y Ch.-M. Marle, "Symplectic Geometry and Analytical Mechanics," Reidel, Dordrecht, 1987.

- [18] J.F. Cariñena, J. Grabowski y A. Ramos, *Act. Appl. Math.*, en prensa.
- [19] J.F. Cariñena y A. Ramos, en preparación.
- [20] M. Reed and B. Simon, "Methods of Modern Mathematical Physics II: Fourier Analysis, Self-Adjointness," Academic Press, New York, 1975.
- [21] D.J. Fernández, J. Negro y M.A. del Olmo, *Ann. Phys. (N. Y.)* **252** (1996), 386.
- [22] V.G. Bagrov y B.F. Samsonov, *Phys. Part. Nucl.* **28** (1997), 374.
- [23] I.S. Gradshteyn y I.M. Ryzhik, "Table of Integrals, Series, and Products," 4th ed., Academic Press, New York, 1965.
- [24] J.O. Rosas-Ortiz, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31** (1998), 10163.
- [25] B. Mielnik, *J. Math. Phys.* **25** (1984), 3387.
- [26] M.M. Nieto, *Phys. Lett.* **B145** (1984), 208.
- [27] D.J. Fernández, *Lett. Math. Phys.* **8** (1984), 337.
- [28] Z. Dongpei, *J. Phys. A: Math. Gen.* **20** (1987), 4331.

