

Evaluación numérica de las funciones gamma incompletas

(Numerical evaluation of incomplete gamma functions)

Autor: Diego Ruiz Antolín
Director: José Javier Segura Sala

Facultad de Ciencias
Máster en Matemáticas y Computación
Junio 2014



Título: Evaluación numérica de las funciones gamma incompletas

Resumen

Las funciones gamma incompletas son un tipo de funciones especiales obtenidas al dividir el intervalo de integración de la función gamma. Fueron estudiadas por primera vez por Legendre en 1786, pero a lo largo de la historia no han sido estudiadas de forma intensiva hasta las últimas décadas debido a sus recientes aplicaciones en física, ingeniería y estadística. En este trabajo repasamos algunas de las propiedades básicas de las funciones gamma incompletas tales como expansiones en serie, fracciones continuas o relaciones de recurrencia. Veremos la situación actual de las funciones gamma incompletas en términos de su evaluación. Finalmente, propondremos y analizaremos en este trabajo algunos métodos numéricos que surgieron a partir de experimentar con métodos de cuadratura.

Title: Numerical evaluation of incomplete gamma functions

Abstract

Incomplete gamma functions are a type of special functions obtained by breaking up the interval of integration of the gamma function. They were studied for the first time by Legendre in 1786, but through history they haven't been studied intensively until the last decades due to its recent applications in physics, engineering and statistics. In this work we review some of the basic properties of incomplete gamma functions such as series expansions, continued fractions and recurrence relations. We will see the current situation of the incomplete gamma function in terms of its evaluation. Finally, we will propose and analyze in this work some numerical methods that arised from numerical experimentation with quadrature methods.

Keywords: incomplete gamma functions, numerical methods, quadrature methods.

Índice general

Introducción	1
1. Definición y propiedades básicas	3
1.1. Expansiones en serie	5
1.2. Fracción continua para $\Gamma(a, z)$	6
2. Sobre el condicionamiento	9
2.1. Condicionamiento sobre la variable a	9
2.1.1. Caso $z > 0$	9
2.1.2. Caso de $z < 0$	12
2.2. Condicionamiento sobre la variable z	13
3. Avances en la evaluación de $\gamma(a, z)$ y $\Gamma(a, z)$	15
3.1. Caso $z > 0$	15
3.2. Caso $z < 0$	19
4. Métodos de cuadratura	23
4.1. La regla trapezoidal	23
4.2. Cuadratura gaussiana	28
4.3. Aplicación de las reglas de cuadratura	33
Apéndice	42
Bibliografía	43

ÍNDICE GENERAL

Introducción

Las funciones gamma incompletas se definen como las integrales

$$\gamma(a, z) = \int_0^z t^{a-1} e^{-t} dt, \quad \Gamma(a, z) = \int_z^\infty t^{a-1} e^{-t} dt$$

donde a y z son variables complejas.

Estudiadas por primera vez por Legendre en [9], en el caso de variable real, las funciones gamma incompletas se consideran funciones especiales ya que muchos problemas en diversas ramas de la física, la ingeniería y la estadística se pueden reescribir en términos de estas funciones, como la distribución de probabilidad chi cuadrado, además de algunas funciones especiales conocidas, como las integrales exponenciales o las funciones error.

Se conocen muchas propiedades de las funciones gamma incompletas tales como desarrollos en series de potencias, expansiones asintóticas o relaciones de recurrencia, que detallaremos en las primeras páginas de este trabajo apoyados en el clásico *NIST Handbook of Mathematical Functions* [2] y en el texto de Nico M. Temme en [1].

Como suele ser habitual en la evaluación de funciones especiales, no es posible calcular las funciones gamma incompletas de forma eficiente y para un amplio rango de valores de las variables utilizando un único método. Es por ello que se ha dedicado un considerable esfuerzo a la búsqueda de algoritmos que combinen varias propiedades para evaluar con suficiente precisión y, en caso de ser posible, eficiencia estas funciones en diversas regiones del plano real (z, a) y el plano complejo (z, a) .

Para ilustrar esta situación, dedicaremos el capítulo 3 de este trabajo a hacer un breve recorrido bibliográfico con el fin de señalar algunos algoritmos en variable

real que han probado cumplir los criterios exigidos y así aclarar hasta qué punto se conoce la evaluación de las funciones gamma incompletas en variable real y qué regiones son todavía desconocidas con vistas a la elaboración de un algoritmo que sea completamente satisfactorio para todos los valores reales de a y z .

Hasta la fecha, se sabe que en el caso en que z sea variable positiva, existen algoritmos eficientes para el cálculo de las funciones gamma incompletas. Podemos citar en este sentido los artículos [3] y [5].

Por otro lado, en el caso en que z es negativo, todavía queda mucho trabajo por hacer. En [7] se propone un estudio del comportamiento asintótico de las funciones gamma incompletas cuando $a \rightarrow -\infty$, mientras que en [6] se estudia la evaluación de la función $\gamma(a, z)$ en el caso en que a es de la forma $n+1/2$ con n entero.

En el capítulo 4 propondremos un acercamiento a la evaluación de las funciones gamma incompletas en varios cuadrantes del plano real (z, a) mediante un adecuado uso de la regla trapezoidal y las cuadraturas gaussianas, previa transformación de las integrales que las definen.

Inspirados en la rapidez de cálculo de la regla trapezoidal para ciertos tipos de integrales, durante la realización del trabajo se han buscado diversos cambios de variable sobre las representaciones integrales de las funciones gamma incompletas para obtener otras sobre las que funciona bien esta regla de cuadratura.

Del mismo modo, algunas cuadraturas gaussianas son bien conocidas en el sentido de que existen fórmulas analíticas para definir todos los parámetros que intervienen en el método y también hemos probado varios cambios de variable para ajustar las funciones gamma incompletas a uno de estos tipos de cuadratura.

Estos algoritmos pueden resultar interesantes para un futuro estudio, pues en un primer acercamiento se ha comprobado que son bastante precisos y eficientes, incluso viables para la evaluación de las funciones gamma incompletas en algunos casos de variable compleja.

Capítulo 1

Definición y propiedades básicas

Antes de hablar sobre aspectos de la evaluación de las funciones gamma incompletas, es conveniente dar una serie de definiciones y resultados al respecto para fijar notación y poder apoyarnos en las propiedades mencionadas con el fin de que este trabajo pueda ser suficientemente autorreferente. Para ello, nos basaremos en la referencia de Temme [1] y en el clásico *NIST Handbook of Mathematical Functions* [2].

Las funciones gamma incompletas deben su nombre a la separación del intervalo de integración de la función gamma de Euler.

Definición 1.0.1. Se definen las *funciones gamma incompletas* $\gamma(a, z)$ y $\Gamma(a, z)$ de la siguiente forma:

$$\gamma(a, z) = \int_0^z t^{a-1} e^{-t} dt, \quad \Gamma(a, z) = \int_z^\infty t^{a-1} e^{-t} dt.$$

Observación 1.0.2. También se llama *función gamma incompleta inferior* a la función $\gamma(a, z)$ y *función gamma incompleta superior* a la función $\Gamma(a, z)$.

Observación 1.0.3. Notar la relación de las funciones gamma incompletas con la función gamma de Euler mediante la identidad

$$\gamma(a, z) + \Gamma(a, z) = \Gamma(a). \tag{1.1}$$

Observación 1.0.4. Hay que señalar que la definición de la función gamma incompleta inferior no es válida para a negativo. No obstante, esta función admite representaciones que sí permiten extender su validez al caso a negativo. Por señalar

alguna, podemos relacionar la función gamma incompleta inferior con la función hipergeométrica confluyente

$$M(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!}$$

mediante la siguiente fórmula

$$\gamma(a, z) = a^{-1} z^a e^{-z} M(1, a+1, z) = a^{-1} z^a M(a, a+1, -z)$$

donde $(a)_n$ es el símbolo de Pochhammer definido por

$$(a)_0 = 1, (a)_n = a(a+1) \cdots (a+n-1) = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)}, \quad n \geq 1.$$

Observación 1.0.5. Es útil a veces trabajar con las normalizaciones de las funciones gamma incompletas siguientes

$$P(a, z) = \frac{\gamma(a, z)}{\Gamma(a)}, \quad Q(a, z) = \frac{\Gamma(a, z)}{\Gamma(a)}, \quad (1.2)$$

que cumplen la propiedad de que $P(a, z) + Q(a, z) = 1$. Estas normalizaciones mantienen una estrecha relación con las funciones de distribución de probabilidad chi-cuadrado ya que se cumple

$$P(\chi^2 | \nu) = P(a, z), \quad Q(\chi^2 | \nu) = Q(a, z), \quad \nu = 2a, \quad \chi^2 = 2z.$$

Cuando a es entero no negativo, se pueden calcular directamente las funciones gamma incompletas aplicando repetidamente integración por partes, obteniendo

$$\gamma(a+1, z) = a! \left[1 - e^{-z} \sum_{m=0}^a \frac{z^m}{m!} \right],$$

$$\Gamma(a+1, z) = a! e^{-z} \sum_{m=0}^a \frac{z^m}{m!}.$$

Las siguientes relaciones de recurrencia, obtenidas directamente de la representación integral de las funciones gamma incompletas usando integración por partes

$$\gamma(a+1, z) = a\gamma(a, z) - z^a e^{-z}, \quad \Gamma(a+1, z) = a\Gamma(a, z) + z^a e^{-z},$$

que en el caso de las funciones normalizadas sería

$$P(a+1, z) = P(a, z) - \frac{z^a e^{-z}}{\Gamma(a+1)}, \quad Q(a+1, z) = Q(a, z) + \frac{z^a e^{-z}}{\Gamma(a+1)}, \quad (1.3)$$

son muy útiles para el cálculo numérico de dichas funciones.

1.1. Expansiones en serie

Las dos siguientes expansiones en serie son útiles en el desarrollo de algoritmos numéricos,

$$\gamma(a, z) = e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{a+n}}{(a)_{n+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{z^{a+n}}{a+n}. \quad (1.4)$$

Vamos a explicar brevemente como se obtienen. En primer lugar, partiendo de la definición de $\gamma(a, z)$, hacemos el cambio de variable $t = z(1 - u)$

$$\gamma(a, z) = \int_0^z t^{a-1} e^{-t} dt = z^a e^{-z} \int_0^1 (1-u)^{a-1} e^{uz} du.$$

A continuación, desarrollamos en serie de potencias la función exponencial que hay dentro del integrando y tenemos que

$$\gamma(a, z) = e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{a+n}}{n!} \int_0^1 (1-u)^{a-1} u^n du = e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{a+n}}{n!} B(n+1, a),$$

donde $B(p, q)$ es la *integral beta de Euler* que cumple la fórmula

$$B(p, q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}.$$

Finalmente, obtenemos la primera expansión en serie de $\gamma(a, z)$

$$\gamma(a, z) = e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{a+n}}{n!} \frac{\Gamma(n+1)\Gamma(a)}{\Gamma(n+1+a)} = e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{a+n}}{(a)_{n+1}}.$$

Para obtener la segunda expansión en serie, vamos a expandir en serie de potencias la función e^{-t} que aparece en el integrando de la definición de $\gamma(a, z)$ y tendremos

$$\gamma(a, z) = \int_0^z t^{a-1} e^{-t} dt = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^z t^{a-1+n} dt = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{z^{a+n}}{a+n}.$$

Dichas series son convergentes salvo en el caso de a entero no negativo. De hecho, la primera expansión es bastante útil para computaciones numéricas, sobre todo cuando $a > z$ (en particular, en [5] se utiliza esta propiedad).

Para el caso en que $z > a$ se pueden utilizar expansiones en serie de la función $\Gamma(a, z)$ que se derivan de la relación $\Gamma(a, z) = \Gamma(a) - \gamma(a, z)$.

Además de las series convergentes, también se dispone de series divergentes (asintóticas) que pueden ser interesantes para la evaluación numérica. Un ejemplo

sencillo de una expansión de este tipo es la siguiente, que permite calcular $\Gamma(a, z)$ para $z \gg a$,

$$\Gamma(a, z) = z^{a-1} e^{-z} \left[\sum_{n=0}^{N-1} \frac{(-1)^n (1-a)_n}{z^n} + \theta_N \frac{(-1)^N (1-a)_N}{z^N} \right], \quad (1.5)$$

(para $N = 0$ el sumatorio es nulo). La cantidad θ_N es el resto y vale

$$\theta_N = z \int_0^\infty (t+1)^{a-N-1} e^{-zt} dt.$$

Esta expansión asintótica se puede construir a partir de la representación

$$\Gamma(a, z) = z^a e^{-z} \int_0^\infty (u+1)^{a-1} e^{-zu} du,$$

obtenida tras aplicar el cambio de variable $t = z(1+u)$ sobre la definición de $\Gamma(a, z)$. Aplicando de forma recurrente la integración por partes sobre esta representación, obtenemos la expansión asintótica buscada.

Existen otros tipos de expansiones que son válidas cuando ambos parámetros son grandes. Este tipo de expansión uniforme fue empleada en [5] para el caso $a > 0$, $z > 0$. Existen también expansiones para valores negativos de los parámetros, como comentaremos más adelante, que esperamos permitan extender el rango de evaluación de estas funciones.

1.2. Fracción continua para $\Gamma(a, z)$

Cuando z no es lo suficientemente grande como para aplicar expansiones asintóticas, podemos usar fracciones continuas sobre $\Gamma(a, z)$. Hay varios ejemplos de fracciones continuas para representar $\Gamma(a, z)$. El siguiente ejemplo se debe a Legendre.

Empezamos por la representación integral de $\Gamma(a, z)$,

$$\Gamma(a, z) = \frac{e^{-z}}{\Gamma(1-a)} \int_0^\infty \frac{e^{-zt} t^{-a}}{t+1} dt. \quad (1.6)$$

Definimos ahora

$$U^{\nu, \rho} = \int_0^\infty e^{-zt} t^\nu (1+t)^\rho dt. \quad (1.7)$$

Uniendo ambas fórmulas, tenemos que

$$U^{-a,-1} = \Gamma(1-a)e^z\Gamma(a, z). \quad (1.8)$$

Integrando por partes en $U^{\nu,\rho}$, tomando $t^\nu dt = \frac{1}{\nu+1}dt^{\nu+1}$, obtenemos

$$zU^{\nu+1,\rho} = (\nu+1)U^{\nu,\rho} + \rho U^{\nu+1,\rho-1},$$

que podemos expresar también como

$$\frac{U^{\nu+1,\rho}}{U^{\nu,\rho}} = \frac{\nu+1}{z - \rho \frac{U^{\nu+1,\rho-1}}{U^{\nu+1,\rho}}} \quad (1.9)$$

Por otro lado, en la fórmula (1.7) podemos reescribir

$$t^{\nu+1}(1+t)^\rho = t^{\nu+1}(1+t)^{\rho-1} + t^{\nu+2}(1+t)^{\rho-1},$$

de forma que la fracción obtenida en (1.9) queda de la forma

$$\frac{U^{\nu+1,\rho}}{U^{\nu,\rho}} = \frac{\nu+1}{z - \frac{\rho}{1 + \frac{U^{\nu+2,\rho-1}}{U^{\nu+1,\rho-1}}}}, \quad (1.10)$$

aplicando esta fórmula de forma recursiva, obtenemos una representación en forma de fracción continua. Ahora bien, de (1.8) se sigue que

$$\frac{U^{1-a,-1}}{U^{-a,-1}} = \frac{\Gamma(2-a)\Gamma(a-1, z)}{\Gamma(1-a)\Gamma(a, z)} = \frac{(1-a)\Gamma(a-1, z)}{\Gamma(a, z)}.$$

Aplicando esto y lo visto en (1.10) obtenemos que

$$\frac{U^{1-a,-1}}{U^{-a,-1}} = -1 + \frac{e^{-z}z^{a-1}}{\Gamma(a, z)}.$$

Despejando $\Gamma(a, z)$ y aplicando (1.10) para $\nu = -a, \rho = -1$ repetidamente, obtenemos

$$\Gamma(a, z) = \frac{e^{-z}z^a}{z + \frac{1-a}{1 + \frac{1}{z + \frac{2-a}{2 + \frac{1}{z + \frac{3-a}{1 + \dots}}}}}}$$

que denotaremos de forma más compacta por

$$\Gamma(a, z) = e^{-z} z^a \left(\frac{1}{z+} \frac{1-a}{1+} \frac{1}{z+} \frac{2-a}{1+} \frac{2}{z+} \frac{3-a}{1+} \dots \right). \quad (1.11)$$

Esta representación converge para todo $z \neq 0$, $|\arg z| < \pi$ y para todo a . Esta fracción continua converge mejor cuando mayor es $|z/a|$. En [3] se da utilidad a esta representación para el cálculo de $\Gamma(a, z)$ en el caso de z real positiva.

Capítulo 2

Sobre el condicionamiento

Observando las secciones 8.2 y 8.8 de [2], vemos que las funciones gamma incompletas cumplen una serie de ecuaciones diferenciales y relaciones de recurrencia (alguna ya vista en el capítulo anterior) que podemos usar para hallar el valor numérico de las funciones en un determinado punto partiendo de un valor inicial conocido.

Sin embargo, según los valores de las variables, el comportamiento de estos procedimientos puede ser numéricamente inestable según la dirección de cálculo. Por ello, vamos a hacer un análisis del condicionamiento de estos cálculos.

2.1. Condicionamiento sobre la variable a

Partiendo de la definición de $\gamma(a, x)$ e integrando por partes tenemos la relación

$$\gamma(a, z) = \frac{1}{a}(\gamma(a+1, z) + z^a e^{-z}). \quad (2.1)$$

2.1.1. Caso $z > 0$

Asumamos, de momento, que estamos considerando tanto a como z positivos.

La relación de recurrencia (2.1) nos permite calcular la función $\gamma(a, z)$ para valores de a pequeños partiendo de valores de a grandes. Observamos que en el miembro de la derecha los dos términos se suman, lo que es indicativo de que su utilización es numéricamente estable. Reescribimos ahora la ecuación como

$$\gamma(a+1, z) = a\gamma(a, z) - z^a e^{-z}.$$

y vemos que la situación cambia al aplicar la recurrencia en sentido opuesto. Esta misma ecuación en diferencias es satisfecha por $\gamma(a, z) - \Gamma(a)$ (ya que $\Gamma(a)$ es solución de la ecuación homogénea), es decir, por $-\Gamma(a, z)$.

Es decir, que dos soluciones de la ecuación en diferencias

$$y_{a+1} = ay_a - z^a e^{-z}$$

son $\gamma(a, z)$ y $-\Gamma(a, z)$. Nos planteamos ahora si esta recurrencia puede utilizarse para calcular valores de $\gamma(a, z)$ en la dirección de a creciente. La respuesta en este caso es que no, y la razón es que, como comprobaremos,

$$\lim_{a \rightarrow +\infty} \frac{\gamma(a, z)}{\Gamma(a, z)} = 0, \quad (2.2)$$

y esto implica que el cálculo de $\gamma(a, z)$ con valores crecientes de a está mal condicionado. En efecto, la evaluación de $\gamma(a, z)$ siempre estará afectada de cierto error; por lo tanto, se introducirá una pequeña componente de la solución $-\Gamma(a, z)$, que acabará dominando el cálculo. Finalmente, para a suficientemente grande la solución poco tendrá que ver con $\gamma(a, z)$.

En una situación como la que describe la ecuación (2.2) diríamos que $\gamma(a, z)$ es recesiva (o mínima) cuando $a \rightarrow +\infty$ mientras que $\Gamma(a, z)$ es dominante.

El estudio del condicionamiento de ecuaciones en diferencias inhomogéneas de primer orden puede ser llevado a cabo en término de ecuaciones homogéneas de segundo orden como sigue. Partiendo de $y_{n+1} = a_n y_n + b_n$, y suponiendo que $b_n \neq 0$ para todo n

$$\frac{y_{n+1} - a_n y_n}{b_n} = \frac{y_{n+2} - a_{n+1} y_{n+1}}{b_{n+1}},$$

de modo que

$$y_{n+2} - \left(a_{n+1} + \frac{b_{n+1}}{b_n} \right) y_{n+1} + a_n \frac{b_{n+1}}{b_n} y_n = 0.$$

Todas las soluciones de la inhomogénea son soluciones de la ecuación homogénea. Por otra parte, todas las soluciones de la ecuación homogénea son soluciones de la inhomogénea salvo factor multiplicativo menos en un caso: cuando la solución corresponda a la solución de la ecuación homogénea de primer orden, que también es solución de la homogénea de segundo orden (pero no así de la ecuación de partida que es inhomogénea).

En el caso que nos ocupa, obtenemos que tanto $\gamma(a, z)$ como $\Gamma(a, z)$ son solución de la recurrencia

$$y_{a+2} - (a + 1 + z)y_{a+1} + az y_a = 0. \quad (2.3)$$

Existe un resultado, llamado teorema de Perron-Kreuser, que en algunos casos proporciona información simple de analizar respecto a la existencia de solución mínima (ver capítulo 4 de [4]). Se trata de plantear la ecuación característica

$$\lambda^2 - (a + 1 + z)\lambda + az = 0, \quad (2.4)$$

y comprobar si sus raíces $\lambda_1(a)$ y $\lambda_2(a)$ son tales que

$$\lim_{a \rightarrow +\infty} |\lambda_1(a)/\lambda_2(a)| \neq 1.$$

Si esto es así, la recurrencia (2.4) tiene solución mínima (que es única salvo factor multiplicativo).

Supongamos que la menor de las raíces es $\lambda_1(a)$, entonces la solución mínima $\{f_a\}$ cumplirá que

$$\frac{f_{a+1}}{f_a} \sim \lambda_1(a), \quad a \rightarrow +\infty$$

mientras que el resto de soluciones independientes tendrán un comportamiento gobernado por $\lambda_2(a)$.

En el caso de nuestra recurrencia tenemos una raíz $\lambda_1(a) \sim z$ y otra $\lambda_2(a) \sim a$, lo que demuestra que hay solución mínima cuando $a \rightarrow +\infty$. Sospechamos que tal solución es $\gamma(a, z)$ lo que queda confirmado teniendo en cuenta la expansión asintótica 8.11.4 de [2] de donde vemos que

$$\frac{\gamma(a+1, z)}{\gamma(a, z)} \sim z, \quad a \rightarrow +\infty,$$

y es evidente que

$$\frac{\Gamma(a+1, z)}{\Gamma(a, z)} \sim a, \quad a \rightarrow +\infty.$$

En definitiva, la recurrencia sólo se puede aplicar en la dirección de a decreciente para $\gamma(a, z)$ (y sólo para esta función), mientras que se puede aplicar en la dirección de a creciente para cualquier solución independiente de $\gamma(a, z)$ (como $\Gamma(a, z)$).

Para $a \rightarrow -\infty$ ocurre algo similar pero el papel desempeñado por las soluciones cambia. El teorema de Perron-Kreuser de nuevo nos dice que existirán soluciones independientes f_a y g_a tales que

$$\frac{f_a}{f_{a-1}} \sim a, \quad \frac{g_a}{g_{a-1}} \sim z, \quad a \rightarrow -\infty.$$

En este caso f_a es mínima cuando $a \rightarrow -\infty$ porque $f_{a-1}/f_a \sim 1/a$ (observemos que en la dirección de a decreciente f_{a-1} se calcula a partir de f_a), mientras que g_a sería dominante.

En este caso, tanto $\gamma(a, z)$ como $\Gamma(a, z)$ resultan ser dominantes cuando $a \rightarrow -\infty$. No damos una prueba de este resultado, pero sólo recordamos que $\gamma(a, z) + \Gamma(a, z) = \Gamma(a)$ cuando $a \notin \mathbb{Z}^-$, y que, utilizando la fórmula de reflexión

$$\Gamma(a) = \frac{\pi}{\sin(\pi a)} \frac{1}{\Gamma(1-a)},$$

vemos que $\Gamma(a)$ tiende a cero rápidamente cuando $a \rightarrow -\infty$ y se puede comprobar que no es así para $\Gamma(a, z)$ (por ejemplo, observemos que $\lim_{z \rightarrow 0^+} \Gamma(a, z) = \infty$ si $a < 0$). Todo esto nos lleva a que $\Gamma(a, z) \approx \gamma(a, z)$ cuando a es negativo y grande en valor absoluto, de lo que se deduce que, en efecto, ambas son soluciones dominantes cuando $a \rightarrow -\infty$.

Es importante señalar que los argumentos hasta ahora empleados son válidos siempre que $|a|$ sea suficientemente grande, pero que el comportamiento puede ser distinto para $|a|$ moderado.

Según hemos visto, $\Gamma(a, z)$ es dominante tanto cuando $a \rightarrow +\infty$ como cuando $a \rightarrow -\infty$, lo que indica que para algún valor de a se ha de producir una transición entre el comportamiento dominante en una y otra dirección de la recurrencia. Esta transición se produce aproximadamente para los valores negativos de a tales que $-a = z$. Observemos que la recurrencia (2.3) tiene, para a negativo, coeficiente negativo en el último término (el de y_a), mientras que el coeficiente central cambia de signo cuando $z = -(a+1)$. Como se discute en [10], esto es indicativo del cambio de tendencia que era esperable.

Por lo tanto, esperamos que la recurrencia para $\Gamma(a, z)$ sea aplicable en la dirección de a creciente si $a > -z$ y en la dirección contraria si $a < -z$ ($z > 0$). Por otra parte, $\gamma(a, z)$ y $\Gamma(a, z)$ son, para a negativo, soluciones de valores parecidos, y es lo habitual calcular $\Gamma(a, z)$ en lugar de $\gamma(a, z)$, ya que la primera función está definida para todo a real cuando $z > 0$, mientras que $\gamma(a, z)$ se puede calcular a partir de $\Gamma(a, z)$ mediante $\gamma(a, z) = \Gamma(a) - \Gamma(a, z)$ sólo si $a \notin \mathbb{Z}^-$.

2.1.2. Caso de $z < 0$

Para este caso, nos restringimos a la situación $a > 0$, en el que la definición inicial de $\Gamma(a, z)$ a partir de integrales tiene sentido y la función $\gamma(a, z)$ se puede

calcular a partir de la relación (1.1). En este caso, y por los mismos motivos que antes, $\gamma(a, z)$ es mínima cuando $a \rightarrow +\infty$. Pero al igual que antes, la recurrencia presenta un punto de transición cuando $a = -(z + 1)$. En este caso, la recurrencia hacia atrás (a decreciente) se puede aplicar si $a > -z$ mientras que hay que revertir la aplicación si $a < -z$.

2.2. Condicionamiento sobre la variable z

De la misma forma que podemos calcular funciones desplazándonos discretamente sobre a , podemos hacerlo desplazándonos continuamente sobre z . Una forma sería integrar la ecuación de primer orden para $\gamma(a, z)$,

$$\frac{d}{dz}\gamma(a, z) = z^{a-1}e^{-z},$$

también satisfecha por $-\Gamma(a, z)$. O bien podemos integrar la ecuación de segundo orden satisfecha tanto por $\gamma(a, z)$ como por $\Gamma(a, z)$:

$$zy''(z) + (z + 1 - a)y'(z) = 0.$$

La relación entre una y otra ecuación es paralela a la relación entre la ecuación de primer y segundo orden para el caso de las recurrencias que vimos antes.

En cualquiera de los casos, la integración debería llevarse a cabo en la dirección en la que la solución que se quiera calcular no sea recesiva para evitar problemas de condicionamiento.

Para $z > 0$ es evidente a partir de la definición de las integrales que

$$\frac{d}{dz} \left| \frac{\gamma(a, z)}{\Gamma(a, z)} \right| > 0,$$

lo que indica que la integración habría de realizarse en el sentido de z creciente para $\gamma(a, z)$ y al revés para $\Gamma(a, z)$.

Por otra parte, para $z < 0$ podemos utilizar que

$$\Gamma(a, -z) = \Gamma(a) - \gamma(a, -z), \quad z > 0$$

pero $\gamma(a, -z) = \int_0^{-z} t^{a-1}e^{-t}dt = -e^{\pm i\pi(a-1)} \int_0^z u^{a-1}e^u du = -e^{\pm i\pi(a-1)}|\gamma(a, -z)|$.

De aquí

$$|\Gamma(a, -z)|^2 = \Gamma(a)^2 - 2 \cos(\pi a)\Gamma(a)|\gamma(a, -z)| + |\gamma(a, -z)|^2,$$

luego

$$\left| \frac{\Gamma(a, -z)}{\gamma(a, -z)} \right|^2 = H^2 - 2 \cos(\pi a)H + 1, \quad H = \left| \frac{\Gamma(a)}{\gamma(a, -z)} \right|$$

y entonces, como $dH/dz < 0$ tenemos que

$$\text{signo} \left(\frac{d}{dz} \left| \frac{\Gamma(a, -z)}{\gamma(a, -z)} \right|^2 \right) = \text{signo} \left(\cos(\pi a) - \frac{\Gamma(a)}{|\gamma(a, -z)|} \right).$$

Entonces, vemos que si $a = -n + 1/2$, $n \in \mathbb{N}$, $|\Gamma(a, -z)/\gamma(a, -z)|$ decrece con $z > 0$, y esto quiere decir que la integración en el sentido de z decreciente y negativo de $\gamma(a, z)$ está mejor condicionada que la de $\Gamma(a, z)$, como en el caso de [6].

Por otra parte $|\gamma(a, -\infty)| = +\infty$ y por lo tanto la función $f(z) = \cos(\pi a) - \frac{\Gamma(a)}{|\gamma(a, -z)|}$ es tal que $f(0) = -\infty$ y $f(+\infty) = \cos \pi a$. Por lo tanto, si $\cos \pi a > 0$ es claro que el condicionamiento cambiará e inicialmente será estable el cálculo de $\Gamma(a, z)$ en lugar de $\gamma(a, z)$.

Nosotros propondremos una evaluación mediante métodos de cuadratura numérica que no tendrán estos potenciales problemas de condicionamiento.

Capítulo 3

Avances en la evaluación de $\gamma(a, z)$ y $\Gamma(a, z)$

En este capítulo vamos a hacer un recorrido por la literatura relativa a la evaluación de las funciones gamma incompletas para saber hasta qué punto se conocen técnicas efectivas para su computación numérica. Daremos una breve descripción de algunos de los algoritmos y estudios hechos al respecto.

En el caso en que la variable z es real positiva, se conocen varios algoritmos eficientes para la evaluación de las funciones gamma incompletas con a real, como se puede ver en [3] o en [5].

Para el caso en que la variable z es real negativa, todavía queda mucho por estudiar. Por citar algunos artículos al respecto, veremos un estudio del comportamiento asintótico de las funciones gamma incompletas cuando $a \rightarrow -\infty$ en [7] y un algoritmo para evaluar las funciones gamma incompletas en el que caso en que a es igual a $n + 1/2$ con n entero en [6].

Dado que la función gamma, $\Gamma(a)$, aparecerá a lo largo de toda la sección en varios algoritmos, en adelante supondremos que disponemos de algoritmos para calcular de forma eficiente esta función.

3.1. Caso $z > 0$

Basado, en parte, en el trabajo de Gautschi [3], en el artículo de Gil, Segura y Temme [5] se trata la evaluación de las funciones gamma incompletas, más concretamente de sus versiones normalizadas (1.2), para valores de a y z reales y positivos.

Para z positivo y a negativo, el método de evaluación propuesto por Gautschi en [3] es similar (basado en la fracción continua de Legendre (1.11)), salvo para z pequeño, en cuyo caso se utiliza recurrencia para $\Gamma(a, z)$ en sentido de a decreciente.

Seguimos en esta sección la notación del artículo en términos de las funciones gamma incompletas normalizadas (1.2). Para el cálculo de las funciones $P(a, z)$ y $Q(a, z)$, se calcula para cada par (a, z) el valor de la función primaria (la menor de las dos) y la otra utilizando la relación

$$P(a, z) + Q(a, z) = 1.$$

Para empezar, se define una función para separar el cuadrante (z, a) en dos partes para asignar la función primaria. Esta elección está basada en estimaciones asintóticas que en la práctica demuestran ser una elección bastante precisa (en [3] se usa una función similar que en [5] fue ligeramente mejorada). La función es

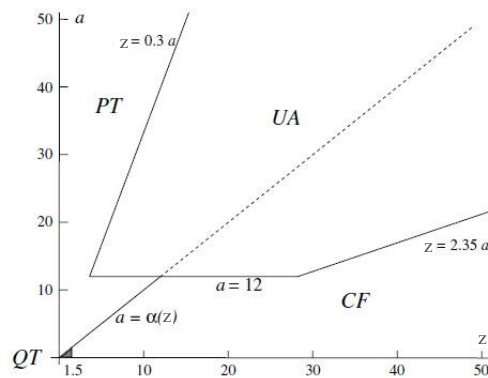
$$\alpha(z) = \begin{cases} z & \text{si } z \geq \frac{1}{2} \\ \frac{\ln(\frac{1}{2})}{\ln(\frac{1}{2}z)} & \text{si } 0 < z < \frac{1}{2} \end{cases}$$

Así, la función primaria será

$$P(a, z) \text{ si } a \geq \alpha(z)$$

$$Q(a, z) \text{ si } a < \alpha(z).$$

El algoritmo que se trata en el artículo consta de varias partes, dependiendo de la región del cuadrante (z, a) en el que se esté trabajando. Estas regiones se pueden ver en la siguiente imagen:



Estos dominios se trazaron en base a encontrar un equilibrio entre eficiencia y precisión. Si dos métodos dan la misma precisión en cierta región, se elige uno u otro en función de su eficiencia.

(PT) En este caso la función primaria es $P(a, z)$ y se usa su expansión en serie

$$P(a, z) = \frac{z^a e^{-z}}{\Gamma(a+1)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{(a+1)_n}.$$

La serie converge para todo a y z en el dominio PT y la convergencia mejora a medida que el cociente $\frac{a}{z}$ tiende a infinito. Además, dado que $a > z$, los términos del sumatorio van decreciendo.

(QT) Se utiliza la otra expansión en serie de la función $P(a, z)$,

$$P(a, z) = \frac{z^a}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^n}{(a+n)n!}. \quad (3.1)$$

Sin embargo, no se puede usar directamente $Q(a, z) = 1 - P(a, z)$ cuando a es pequeño (como es este caso). En su lugar, se escribe

$$Q(a, z) = u + v$$

donde

$$u = 1 - \frac{1}{\Gamma(1+a)} + \frac{1-z^a}{\Gamma(1+a)}, \quad v = \frac{z^a}{\Gamma(1+a)} (1 - \Gamma(1+a)z^{-a}P(a, z)).$$

Hay disponibles algoritmos para calcular cada uno de los sumandos especificados. Para $1 - z^a = 1 - \exp(a \ln(z))$ basta hallar su serie de Taylor. Para v se puede usar la expansión (3.1) eliminando el término $n = 0$.

(CF) En esta región se usa la fracción continua

$$Q(a, z) = \frac{z^a e^{-z}}{(z+1-a)\Gamma(a)} \left(\frac{1}{1+} \frac{a_1}{1+} \frac{a_2}{1+} \frac{a_3}{1+} \frac{a_4}{1+} \dots \right)$$

donde

$$a_k = \frac{k(a-k)}{(z+2k-1-a)(z+2k+1-a)}, k \geq 1.$$

(UA) Se parte de las representaciones siguientes

$$Q(a, z) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(\eta\sqrt{a/2}) + R_a(\eta)$$

$$P(a, z) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(-\eta\sqrt{a/2}) - R_a(\eta)$$

donde $\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2}$ es la *función de error complementaria*. En general, estas estrategias funcionan bastante bien para funciones de tipo sigmoide. El valor de η se define como

$$\frac{1}{2}\eta^2 = \lambda - 1 - \ln\lambda, \lambda = \frac{z}{a}. \quad (3.2)$$

Si tomamos raíz cuadrada para despejar η en la última ecuación, consideraremos que $\operatorname{signo}(\eta) = \operatorname{signo}(\lambda - 1)$. Para $R_a(\eta)$ se tiene que

$$R_a(\eta) = \frac{e^{-\frac{1}{2}a\eta^2}}{\sqrt{2\pi a}} S_a(\eta), \quad S_a(\eta) \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C_n(\eta)}{a^n}, a \rightarrow \infty. \quad (3.3)$$

A pesar de existir expresiones analíticas para los coeficientes $C_n(\eta)$, estas representaciones son difíciles de evaluar para η pequeño, es decir, en la zona de transición $z \sim a$.

Sin embargo, en lugar de computar los coeficientes $C_n(\eta)$, se da una expansión de $S_a(\eta)$ en serie de potencias de η , de forma que

$$S_a(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \eta^n.$$

Cada uno de los coeficientes α_n es de la forma

$$\alpha_n = \frac{\beta_n}{\Gamma^*(a)}, n = 0, 1, 2, \dots$$

donde los β_n se definen mediante la recurrencia

$$\beta_n = \frac{1}{a}(n+2)\beta_{n+2} + d_{n+1}, n = 0, 1, 2, \dots$$

y los coeficientes d_n se definen como los coeficientes de la serie de potencias

$$\frac{\eta}{\lambda - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} d_n \eta^n.$$

Para calcular los β_n , se utiliza recurrencia hacia atrás empezando desde un N suficientemente grande y considerando $\beta_{N+2} = \beta_{N+1} = 0$. Con todo esto, se tiene que una buena aproximación de $S_a(\eta)$ será

$$S_a(\eta) \approx \frac{a}{a + \beta_1} \sum_{n=0}^N \beta_n \eta^n.$$

3.2. Caso $z < 0$

En el artículo de Thompson [6] se da un algoritmo para evaluar la función gamma incompleta inferior en el caso en que $a = n + \frac{1}{2}$ con n entero y $z < 0$. Sin entrar en mucho detalle sobre el análisis del algoritmo, resumiremos los principales puntos del artículo para obtener una idea general del procedimiento que propone.

Como en [6], definimos la función $S_n(z)$

$$S_n(z) = -i(-1)^n e^{-z} z^{-(n+1/2)} \gamma(n + \frac{1}{2}, -z)$$

de forma que la segunda serie de (1.4) se puede reescribir como sigue

$$\gamma(n + \frac{1}{2}, -z) = i(-1)^n e^z z^{n+\frac{1}{2}} S_n(z)$$

y así, la relación de recurrencia (1.3) para la función gamma incompleta inferior quedará de la forma

$$(n + \frac{1}{2})S_n(z) + zS_{n+1}(z) = 1. \quad (3.4)$$

Observar que el valor de $\gamma(n + 1/2, -z)$ es una cantidad imaginaria pura. Es por ello, que este caso particular en que $a = n + 1/2$ es útil para calcular $\Gamma(n + 1/2, -z)$ sin pérdida de precisión a partir de la fórmula $\gamma(a, z) + \Gamma(a, z) = \Gamma(a)$.

Dado que $S_n(z)$ es una versión escalada de la función $\gamma(n + 1/2, -z)$, el condicionamiento para la recurrencia que hemos estudiado en el capítulo anterior se mantiene.

En este sentido, en el caso en que n es positivo, Thompson aplica recurrencia teniendo en cuenta la zona de transición que hay en los puntos $(z, n + 1/2)$ con $n + 1/2 \sim -z$, es decir, como ya vimos en el capítulo anterior, se aplica recurrencia en sentido de n decreciente sólo si $n + 1/2 > -z$ y recurrencia en sentido de n creciente sólo si $n + 1/2 < -z$.

En el caso en que n es negativo, es importante tener en cuenta que para $z \geq 0$ cada función $S_n(z)$ tiene un único cero que denotamos z_n . Disponer de un procedimiento para el cálculo de los ceros de las funciones $S_n(z)$ es importante para este caso.

Thompson observa que para un z fijo, existe μ entero negativo tal que $S_\mu(z)$ se puede usar para aplicar recurrencia estable en el sentido de n decreciente y $S_{\mu+1}(z)$ se puede utilizar para calcular $S_i(z)$ con $i = \mu + 2, \dots, -1$ usando recurrencia con n creciente.

Para calcular $S_\mu(z)$ y $S_{\mu+1}(z)$ usa la expansión en serie de Taylor de $\gamma(a, z)$ en términos de la función $S_n(z)$. Para construirla, notar que

$$\frac{d}{dz}\gamma(a, z) = z^{a-1}e^{-z},$$

y por tanto,

$$\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}\gamma(a, z) = (-1)^n z^{a-1} e^{-z} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (1-a)_k z^{-k}, \quad n = 0, 1, \dots$$

Luego la serie de Taylor en un punto arbitrario queda de la forma

$$\gamma(a, z + \Delta z) = \gamma(a, z) - z^{a-1} e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\Delta z)^{n+1}}{(n+1)!} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (1-a)_k z^{-k}, \quad |\Delta z| < |z|$$

y simplificando un poco tenemos finalmente,

$$\gamma(a, z + \Delta z) = \gamma(a, z) + z^{a-1} e^{-z} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(1-a)_k}{k!(-z)^k} \gamma(k+1, \Delta z), \quad |\Delta z| < |z|. \quad (3.5)$$

Para el caso de $S_n(z)$ tendremos una serie de Taylor como la siguiente,

$$S_n(z + \Delta z) = e^{-\Delta z} \left(\frac{z}{z + \Delta z} \right)^{n+1/2} \left[S_n(z) - \frac{1}{t} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\frac{1}{2} - n)_k}{k! z^k} \gamma(k+1, -\Delta z) \right], \quad |\Delta z| < |z|.$$

El análisis de la estabilidad tanto de la recurrencia como de la aplicación de las series de Taylor depende de la localización del cero negativo de la función de S_n , y se han de combinar estrategias de cálculo en ambas direcciones de n (con recurrencias) y de z (series de Taylor).

Los valores iniciales para la aplicación de las series de Taylor son precalculados en el algoritmo de Thompson utilizando cálculos en precisión arbitraria, sirviéndose

para ello de Maple. Esta es una característica claramente mejorable del algoritmo, que no puede considerarse, por lo tanto, un algoritmo "autosuficiente".

Como ya habíamos mencionado al principio de este capítulo, en el caso en que z es negativo, todavía queda bastante por hacer. Ya hemos dado algunos desarrollos en serie de potencias de esta función en (1.4) que sí admiten que z sea negativo.

No obstante, a medida que el valor absoluto de z crece, la convergencia de estas series se ralentiza y resulta en un cálculo poco eficiente. En este sentido, el estudio del comportamiento asintótico de las funciones gamma incompletas parece una buena alternativa para su evaluación.

Temme propone en [7] calcular numéricamente el valor de las funciones gamma incompletas en el caso de parámetro a negativo utilizando expansiones asintóticas uniformes obtenidas utilizando técnicas similares a las que se usan para obtener ese tipo de expansiones en el caso de parámetro a positivo.

El estudio del comportamiento asintótico de las funciones gamma incompletas todavía requiere de mucho trabajo para ser completado, por lo que el artículo de Temme deja abierto el camino a futuras investigaciones sobre el tema.

Capítulo 4

Métodos de cuadratura

Las funciones gamma incompletas están definidas a partir de una representación integral. Por ello, parece razonable pensar que mediante algún cambio de variable adecuado, sería posible obtener una representación susceptible al uso de ciertas reglas de cuadratura.

En este capítulo, vamos a hacer un breve repaso del uso de la regla trapezoidal y los métodos de cuadratura gaussiana y, posteriormente, aplicaremos dichos conocimientos al caso de las funciones gamma incompletas.

4.1. La regla trapezoidal

Una *regla de cuadratura* para evaluar una integral es una fórmula de la siguiente forma

$$\int_a^b f(x) dx \approx Q(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i). \quad (4.1)$$

Los w_i se llaman *pesos de la cuadratura* y los x_i son los *nodos de la cuadratura*.

Diremos que una regla de cuadratura $Q(f)$ es una regla de cuadratura de grado de exactitud k para aproximar una integral $I(f)$ si $I(f) = Q(f)$ para todo polinomio f de grado menor o igual que k , pero no así para polinomios de grado mayor que k .

El propósito de las reglas de cuadratura es aproximar el integrando $f(x)$ por una función más sencilla que pueda ser integrada con técnicas de análisis.

Las *reglas de cuadratura de Newton-Cotes* se basan en la idea de aproximar la función $f(x)$ por un polinomio de interpolación de Lagrange $P_n(x)$ que interpola $f(x)$

en $n+1$ nodos $a = x_0, x_1, \dots, x_n = b$ con $x_{i+1} - x_i = h$ para todo $i = 0, 1, \dots, n-1$. Diremos que los nodos están *igualmente espaciados*.

La regla de cuadratura de Newton-Cotes más simple es la *regla trapezoidal* que consiste en aproximar $f(x)$ en el intervalo $[a, b]$ por un polinomio interpolador $P(x)$ de grado 1 tal que $P(a) = f(a)$ y $P(b) = f(b)$. De esta forma, obtenemos la regla

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx Q(f) = \frac{h}{2}(f_0 + f_1),$$

donde $f_i \equiv f(x_i)$ ($x_0 = a, x_1 = b$) y $h = b - a$. Dado que aproximamos la función $f(x)$ por una función lineal, es directo comprobar que el grado de exactitud de la regla trapezoidal es 1.

Una estimación del error cometido al aplicar la regla trapezoidal para calcular el valor de una integral viene dado por el siguiente teorema, que se demuestra directamente a partir de la fórmula de estimación del error de la interpolación de Lagrange.

Teorema 4.1.1. *Sea $f(x)$ una función con derivada segunda continua en el intervalo $[a, b]$, entonces existe $c \in (a, b)$ tal que*

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + R_n(f)$$

donde

$$R_n(f) = -\frac{h^3}{12}f^{(2)}(c).$$

Dado que estamos aproximando una función $f(x)$ por una función lineal, la regla trapezoidal puede llegar a ser bastante inexacta, salvo en casos de intervalo de integración pequeño. Por esto, una buena idea para mejorar la regla trapezoidal sería dividir el intervalo de integración en pequeños subintervalos, aplicar la regla trapezoidal en cada intervalo y sumar los resultados obtenidos.

Consideramos, como antes, la partición del intervalo $[a, b]$ en los $n+1$ nodos igualmente espaciados x_0, x_1, \dots, x_n y aplicamos la regla trapezoidal en cada uno de los subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, \dots, n$. Sumando cada uno de los resultados obtenidos, tenemos la aproximación

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx T_n(f) = \frac{h}{2}(f_0 + f_n) + h \sum_{i=1}^{n-1} f_i.$$

A $T_n(f)$ la llamaremos la *regla trapezoidal compuesta* sobre n subintervalos. El error de truncamiento cometido al utilizar esta cuadratura se puede estimar, como muestra el siguiente teorema.

Teorema 4.1.2. Sea $f(x)$ una función con derivada segunda continua en el intervalo $[a, b]$ y sea $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$, $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, 1, \dots, n$ una partición del intervalo $[a, b]$. Entonces

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + h \sum_{i=1}^{n-1} f_i + R_n,$$

donde $f_i = f(x_i)$ y

$$\exists \tau \in (a, b) : R_n = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\tau) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\tau).$$

Demostración. En cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$ tenemos, como en el teorema 4.1.1,

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx = \frac{h}{2}(f_{i-1} + f_i) - \frac{h^3}{12} f^{(2)}(c_i), \quad c_i \in (x_{i-1}, x_i).$$

Por otra parte,

$$\sum_{i=1}^n -\frac{h^3}{12} f^{(2)}(c_i) = -\frac{(b-a)h^2}{12n} \sum_{i=1}^n f^{(2)}(c_i).$$

Como $f^{(2)}$ es continua en $[a, b]$, entonces alcanza el máximo y el mínimo absoluto en $[a, b]$, y tenemos que

$$\min_{x \in [a, b]} f^{(2)}(x) \leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f^{(2)}(c_i) \leq \max_{x \in [a, b]} f^{(2)}(x).$$

Por el teorema de los valores intermedios, existe $r \in [a, b]$ de modo que:

$$f^{(2)}(r) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f^{(2)}(c_i).$$

□

Una estimación alternativa del error de truncamiento para la regla trapezoidal compuesta viene dada por la siguiente fórmula, llamada *estimación asintótica del error* (asintótica en el sentido de que es válida cuando $h \rightarrow 0$),

$$\widehat{R}_n(f) = -\frac{(b-a)^2}{12n^2} (f'(b) - f'(a)) = -\frac{h^2}{12} (f'(b) - f'(a)), \quad (4.2)$$

y que podemos obtener a partir de la expresión exacta para $R_n(x)$ que hemos calculado en la prueba del teorema anterior, como sigue:

$$R_n(x) = -\frac{h^2}{12} h \sum_{i=1}^n f^{(2)}(c_i) \approx -\frac{h^2}{12} \int_a^b f^{(2)}(x) dx = -\frac{h^2}{12} (f'(b) - f'(a)).$$

Se puede observar que en el caso en que $f'(a) = f'(b)$ la convergencia de la regla trapezoidal es más rápida en comparación con el caso $f'(a) \neq f'(b)$.

Una ventaja de la regla trapezoidal compuesta es que se puede calcular eficientemente de forma recursiva. Así, podemos añadir nodos al cálculo sin necesidad de volver a evaluar el integrando en los nodos previos.

Consideramos, como en anteriores casos, la partición del intervalo $[a, b]$ en los nodos $a = x_0, x_1, \dots, x_n = b$, esta vez con $n = 2m$, $m \in \mathbb{N}$. La regla trapezoidal con paso h ($h = x_i - x_{i-1}$), que denotaremos por $T(f, h)$, será

$$\int_a^b f(x) dx \approx T(f, h) = \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{n-1} (f_i + f_{i+1}).$$

Por otro lado,

$$T(f, 2h) = h \sum_{i=0}^{m-1} (f_{2i} + f_{2i+2}).$$

Por tanto, la regla trapezoidal compuesta se puede calcular de forma recursiva mediante la siguiente fórmula

$$T(f, h) = \frac{T(f, 2h)}{2} + h \sum_{i=1}^m f_{2i-1}.$$

Es decir, al reducir a la mitad el paso h , basta con calcular el valor de la función $f(x)$ en los puntos medios entre los nodos consecutivos de la regla trapezoidal anterior y sumarlos multiplicados por un factor h , lo que ahorra un importante número de evaluaciones de funciones.

Para finalizar, vamos a ver un resultado que explica por qué a veces la regla trapezoidal funciona mejor de lo que predice el teorema 4.1.2 para ciertas integrales.

Teorema 4.1.3 (Fórmula de Euler-Maclaurin). *Sea $f(x)$ una función con $2m+2$ derivadas continuas en $[a, b]$. Entonces, dada la regla trapezoidal compuesta para n subintervalos $T_n(f)$, tenemos que*

$$\int_a^b f(x) dx = T_n(f) + R_n(f),$$

donde el error de truncamiento admite la expansión

$$R_n(f) = \sum_{l=1}^m \frac{B_{2l}}{(2l)!} h^{2l} (f^{(2l-1)}(x_0) - f^{(2l-1)}(x_n)) - \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} (x_n - x_0) h^{2m+2} f^{(2m+2)}(\zeta),$$

para algún ζ en $[a, b]$. Los coeficientes B_k son los números de Bernouilli.

Observar que el primer término de la expansión del error de truncamiento en la fórmula de Euler-Maclaurin es la estimación asintótica del error (4.2). Ya habíamos mencionado que el caso $f'(a) = f'(b)$ conducía a una convergencia más rápida de la regla trapezoidal. Como podemos observar en la fórmula de Euler-Maclaurin, este caso conduce a un error de truncamiento $R_n(f) = \mathcal{O}(h^4)$ y la regla trapezoidal sería en este caso de orden 4.

Notar que si las derivadas sucesivas de f también coinciden en a y b , la regla trapezoidal aumenta su precisión para h suficientemente pequeño. Por este motivo, la aplicación de la regla trapezoidal en el caso de integrando periódico sobre un periodo completo converge con rapidez.

La regla trapezoidal también se puede aplicar al cálculo de integrales sobre todo \mathbb{R} extendiendo de forma natural la regla trapezoidal compuesta como sigue:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = h \sum_{j=-\infty}^{\infty} f(hj) + R(h),$$

con $h > 0$ y $R(h)$ el error cometido al aplicar la regla trapezoidal para el cálculo de la integral.

De hecho, sea $f(z)$ una función analítica en un dominio D que contiene la recta real y la singularidad más cercana a \mathbb{R} está a una distancia a , entonces el error $R(h)$ se puede estimar que es del orden de $\mathcal{O}(\exp(-2\pi a/h))$, como muestra el siguiente teorema, probado en [4].

Teorema 4.1.4. *Sea $f(z)$ una función analítica en un conjunto abierto que contiene la banda*

$$\{z = x + iy : x \in \mathbb{R}, -a \leq y \leq a\},$$

con

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x + iy)| dx$$

convergente. Entonces $R(h)$ cumple

$$R(h) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x + iy)}{1 - \exp[-2\pi i(x + iy)/h]} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x - iy)}{1 - \exp[2\pi i(x - iy)/h]} dx,$$

para todo y tal que $0 < y \leq a$. Además, si $f(x)$ es real para x real, entonces

$$|R(h)| \leq \frac{e^{-\pi a/h}}{\sinh(\pi a/h)} \int_{-\infty}^{\infty} |f(x \pm ia)| dx.$$

Este resultado explica la rápida convergencia del método de evaluación de $\gamma(a, z)$ que mas adelante desarrollaremos.

4.2. Cuadratura gaussiana

Dada una integral que aproximamos por una regla de cuadratura, como en (4.1), nos interesa maximizar el grado de exactitud de dicha cuadratura.

Tenemos $2n$ parámetros libres: x_i, w_i con $i = 0, \dots, n$. Como los polinomios de grado $2n-1$ tienen $2n$ coeficientes, parece razonable pensar que el mayor grado de exactitud alcanzable es $2n-1$.

Una situación muy general sería:

$$I(f) = \int_a^b f(x)w(x) dx \quad (4.3)$$

donde $w(x)$ es una función peso, que definimos como sigue:

Definición 4.2.1. Decimos que $w(x)$ es una *función peso* en $[a, b]$ si es no negativa en cualquier intervalo abierto contenido en $[a, b]$ (se acepta $a = -\infty$ y/o $b = \infty$) y

$$\int_a^b |x|^n w(x) dx < \infty, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Diremos que $Q(f)$ es una *regla de cuadratura gaussiana con grado de exactitud m* para aproximar (4.3) si es una regla de cuadratura de grado m y m es el mayor grado de exactitud posible (de entre todas las elecciones posibles de nodos de interpolación de $f(x)$).

Las fórmulas de cuadratura gaussiana son fórmulas interpolatorias. Esto quiere decir que para calcular la integral $I(f)$ en n nodos, vamos a aproximar el integrando por un polinomio $f_{n-1}(x)$ de grado a lo sumo $n-1$ que interpola a $f(x)$ en n nodos x_1, \dots, x_n . Usando interpolación de Lagrange, tendremos que

$$f(x) \approx f_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i)L_i(x),$$

donde los $L_i(x)$ están definidos por

$$L_i(x) = \prod_{k=1, k \neq i}^n \frac{x - x_k}{x_i - x_k}.$$

Tendremos entonces que

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

donde

$$w_i = \int_a^b L_i(x)w(x) dx.$$

Independientemente de como escojamos los nodos, esta cuadratura tendrá grado de exactitud al menos $n-1$ dado que la fórmula de interpolación de Lagrange garantiza que el polinomio f_{n-1} que interpola a $f(x)$ en n nodos es exactamente $f(x)$.

Sin embargo, como ya hemos mencionado al principio de esta sección, nos interesa construir una regla de cuadratura tal que eligiendo de forma adecuada los n nodos y los n pesos, obtengamos grado de exactitud $2n-1$.

Un primer método para construir esta regla de cuadratura sería calcular las integrales x^k , $k = 0, \dots, 2n - 1$ (llamadas *momentos*) e igualarlos a los valores correspondientes obtenidos mediante la regla de cuadratura (que será exacta puesto que exigimos que tenga grado de exactitud $2n-1$). Así, tenemos

$$\mu_k = \int_a^b x^k w(x) dx = Q(x^k) = \sum_{i=1}^n w_i x_i^k, \quad k = 0, \dots, 2n - 1,$$

y bastará con resolver el sistema de $2n$ ecuaciones con $2n$ incógnitas que forman estas ecuaciones. Sin embargo, la resolución numérica de este sistema es numéricamente inestable.

Sin entrar en mucho detalle, el siguiente resultado basado en la teoría de polinomios ortogonales, y cuya demostración se puede encontrar en [4], nos proporciona una representación de los nodos y los pesos adecuados para obtener el grado de exactitud que buscamos en nuestra cuadratura.

Teorema 4.2.2. *Sea $w(x)$ una función peso en el intervalo $[a, b]$ y sea p_n el polinomio mónico de grado n tal que*

$$\int_a^b x^k p_n(x) w(x) dx = 0, \quad k = 0, \dots, n - 1.$$

Sea x_1, \dots, x_n las raíces de p_n y sean w_i los pesos definidos por

$$w_i = \int_a^b L_i(x)w(x) dx, \quad L_i(x) = \prod_{k=1, k \neq i}^n \frac{x - x_k}{x_i - x_k},$$

con $i = 1, \dots, n$. Entonces, la regla de cuadratura

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

tiene grado de exactitud $2n-1$. Si f tiene derivada $f^{(2n)}$ continua en $[a, b]$, entonces existe $\lambda \in (a, b)$ tal que

$$\int_a^b f(x)w(x) dx = Q_n^G(f) + \gamma_n \frac{f^{(2n)}(\lambda)}{(2n)!},$$

donde

$$\gamma_n = \int_a^b p_n(x)^2 w(x) dx.$$

El cálculo de los polinomios ortogonales $p_n(x)$ resulta complicado de forma directa. Sin embargo, satisfacen una relación de recurrencia que permite que sean computados de forma eficiente. De los coeficientes de la recurrencia podremos sacar un método sencillo para calcular las raíces de dichos polinomios y los pesos de la cuadratura, llamado algoritmo de Golub-Welsch, que veremos tras citar el siguiente resultado sobre la relación de recurrencia que hemos mencionado y que está probado en el capítulo 5 de [4].

Teorema 4.2.3. *Los polinomios ortogonales mónicos $\{p_k\}$ asociados a una función peso $w(x)$ en $[a, b]$ satisfacen la siguiente relación de recurrencia:*

$$\begin{aligned} p_1(x) &= (x - B_0)p_0(x) \\ p_{k+1}(x) &= (x - B_k)p_k(x) - A_k p_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \dots, \end{aligned}$$

donde

$$A_k = \frac{\|p_k\|^2}{\|p_{k-1}\|^2}, \quad k \geq 1, \quad B_k = \frac{\langle xp_k, p_k \rangle}{\|p_k\|^2}, \quad k \geq 0.$$

En particular, para el caso de los polinomios ortonormales $\{\tilde{p}_i\}$ que cumplen $p_k(x) = \|p_k\| \tilde{p}_k$ podemos reescribir la relación de recurrencia de la forma

$$\begin{aligned} \alpha_1 \tilde{p}_1(x) + \beta_0 \tilde{p}_0(x) &= x \tilde{p}_0(x), \\ \alpha_{k+1} \tilde{p}_{k+1}(x) + \beta_k \tilde{p}_k(x) + \alpha_k \tilde{p}_{k-1}(x) &= x \tilde{p}_k(x), \quad n = 1, 2, \dots, \end{aligned} \tag{4.4}$$

con $\alpha_k = \|p_k\|/\|p_{k-1}\|$, $\beta_k = \langle x \tilde{p}_k, \tilde{p}_k \rangle$. Pero solo en ciertos casos particulares se conocen de forma exacta los coeficientes de la recurrencia, como por ejemplo, la cuadratura de Gauss-Hermite (con peso e^{-x^2} en el intervalo $(-\infty, \infty)$) o la cuadratura de Gauss-Laguerre (con peso $x^\alpha e^{-x}$ en el intervalo $[0, \infty)$ con $\alpha > -1$).

El *algoritmo de Golub-Welsch* es un método para calcular los nodos y pesos de una cuadratura gaussiana mediante la resolución de un problema de autovalores basado en el algoritmo QR. Vamos a estudiar el planteamiento del problema, pues su resolución es inmediata usando algoritmos más habituales en álgebra lineal para este tipo de problemas.

Partimos de las relaciones de recurrencia (4.4). Tomamos x_j tal que $\tilde{p}_n(x_j) = 0$, es decir, x_j es un nodo de la cuadratura gaussiana con n nodos. Así, podemos plantear

$$\begin{cases} \alpha_1 \tilde{p}_1(x_j) + \beta_0 \tilde{p}_0(x_j) = x_j \tilde{p}_0(x_j) \\ \alpha_2 \tilde{p}_2(x_j) + \beta_1 \tilde{p}_1(x_j) + \alpha_1 \tilde{p}_0(x_j) = x_j \tilde{p}_1(x_j) \\ \vdots \\ \beta_{n-1} \tilde{p}_{n-1}(x_j) + \alpha_{n-1} \tilde{p}_{n-2}(x_j) = x_j \tilde{p}_{n-1}(x_j) \end{cases},$$

que en términos de matrices quedará

$$\begin{pmatrix} \beta_0 & \alpha_1 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha_1 & \beta_1 & \alpha_2 & & \\ 0 & \alpha_2 & \beta_2 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \alpha_{n-1} \\ 0 & \dots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{p}_0(x_j) \\ \tilde{p}_1(x_j) \\ \vdots \\ \tilde{p}_{n-2}(x_j) \\ \tilde{p}_{n-1}(x_j) \end{pmatrix} = x_j \begin{pmatrix} \tilde{p}_0(x_j) \\ \tilde{p}_1(x_j) \\ \vdots \\ \tilde{p}_{n-2}(x_j) \\ \tilde{p}_{n-1}(x_j) \end{pmatrix}.$$

Esto es un problema de autovalores

$$J\tilde{P}(x_j) = x_j\tilde{P}(x_j)$$

con J la matriz de coeficientes de la recurrencia y $\tilde{P}(x_j) = (\tilde{p}_0(x_j), \tilde{p}_1(x_j), \dots, \tilde{p}_{n-1}(x_j))^T$.

Observamos que x_j es raíz de \tilde{p}_n si, y sólo si, x_j es autovalor de J . Es decir, que los n ceros de \tilde{p}_n (esto es, los nodos de la cuadratura gaussiana), son los autovalores de la matriz J .

Por otro lado, para obtener los pesos, partimos del hecho de que $\tilde{p}_i \tilde{p}_k$ para $i, k = 0, \dots, n-1$ son polinomios de grado a lo sumo $2n-2$. Además, tenemos que

$$\delta_{ik} = \langle \tilde{p}_i, \tilde{p}_k \rangle = \int_a^b \tilde{p}_i \tilde{p}_k w(x) dx = \sum_{j=1}^n w_j \tilde{p}_i(x_j) \tilde{p}_k(x_j).$$

Sean

$$W = \begin{pmatrix} w_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & w_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \dots & & w_n \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} \tilde{p}_0(x_1) & \dots & \tilde{p}_{n-1}(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \tilde{p}_0(x_n) & \dots & \tilde{p}_{n-1}(x_n) \end{pmatrix},$$

tenemos que

$$P^T W P = I.$$

Dado que P es inversible, entonces $W^{-1} = P P^T$, de donde obtenemos que

$$\frac{1}{w_j} = \sum_{k=0}^{n-1} (\tilde{p}_k(x_j))^2 = \|\tilde{P}(x_j)\|_E^2,$$

con $\|\cdot\|_E$ la norma euclídea. Si llamamos $\phi^{(j)}$ al vector propio obtenido numéricamente asociado al valor propio x_j , entonces $\phi^{(j)} = C \tilde{P}(x_j)$, para cierta constante $C \neq 0$. Para calcular C utilizaremos el valor

$$\mu_0 = \int_a^b w(x) dx.$$

Teniendo en cuenta que

$$1 = \langle \tilde{p}_0(x), \tilde{p}_0(x) \rangle = \tilde{p}_0^2 \int_a^b w(x) dx = \tilde{p}_0^2 \mu_0,$$

se tiene que $\tilde{p}_0 = 1/\sqrt{\mu_0}$ y

$$\phi^{(j)} = \begin{pmatrix} \phi_1^{(j)} \\ \phi_2^{(j)} \\ \vdots \\ \phi_{n-1}^{(j)} \\ \phi_n^{(j)} \end{pmatrix} = \phi_1^{(j)} \frac{1}{\tilde{p}_0} \begin{pmatrix} \tilde{p}_0(x_j) \\ \tilde{p}_1(x_j) \\ \vdots \\ \tilde{p}_{n-2}(x_j) \\ \tilde{p}_{n-1}(x_j) \end{pmatrix} = \sqrt{\mu_0} \phi_1^{(j)} \tilde{P}(x_j).$$

Por tanto,

$$w_j = \frac{1}{\|\tilde{P}(x_j)\|_E^2} = \mu_0 \frac{(\phi_1^{(j)})^2}{\|\phi^{(j)}\|^2}.$$

El cálculo de los nodos y los pesos no siempre es rápido y hay que notar que una vez se dispone de los coeficientes de la recurrencia que cumplen los polinomios

ortogonales, calculados de forma analítica o numérica, también hay que resolver un problema de autovalores, que puede llegar a ser complicado para un número de nodos elevado.

Sin embargo, no se debe descartar este tipo de métodos, sobre todo si la integral a calcular tiene alguna de las formas clásicas para las que se conocen de forma analítica los coeficientes de la relación de recurrencia de los polinomios ortogonales. Además, si se va a utilizar una misma cuadratura gaussiana para evaluar varias integrales, sólo hace falta calcular los nodos y pesos de la cuadratura una vez, con lo que se ahorran muchos cálculos en evaluaciones sucesivas. Precalculando los nodos y los pesos se puede entonces disponer de un método muy eficiente para el cálculo de ciertas intergrales.

4.3. Aplicación de las reglas de cuadratura

Como habíamos mencionado al principio de este capítulo, las funciones gamma incompletas podrían ser evaluadas mediante el uso de reglas de cuadratura conocidas tras obtener una representación adecuada mediante cambios de variable. Algún ejemplo de esta vía de investigación se puede encontrar en [11]. A continuación, vamos a dar los pasos necesarios para obtener dichas representaciones y comentaremos brevemente la efectividad de aplicar cuadratura en cada caso.

Todos los algoritmos han sido programados en MATLAB y en el apéndice se adjunta el código de dichos programas. Todos los cálculos incluidos en las tablas han sido realizados imponiendo una tolerancia de error relativo de 10^{-14} .

Para comprobar la efectividad de los algoritmos, se han comparado los resultados con los obtenidos mediante los algoritmos que Maple incluye para la evaluación de las funciones gamma incompletas, mostrando 15 dígitos de precisión.

- **Algoritmo 1** Partiendo de la definición de la función gamma incompleta superior, tomamos el cambio de variable $t = z + y$ y obtenemos

$$\Gamma(a, z) = e^{-z} \int_0^{\infty} (z + y)^{a-1} e^{-y} dy$$

que puede ser evaluada mediante la regla de cuadratura de Gauss-Laguerre. Este método se puede usar, en principio, para todo valor de z y de a salvo en el caso en que ambos sean negativos, puesto que la definición integral de $\Gamma(a, z)$ no tiene sentido.

Observamos que este algoritmo es bastante eficiente en cuanto a que el número de iteraciones no es excesivo. En cuanto a su exactitud, vemos que funciona bastante bien para z y a positivos.

Sin embargo, en los cuadrantes segundo y cuarto del plano (z, a) observamos que pierde precisión a medida que aumenta el valor absoluto de a . También hay que destacar que cuando $a \sim -z$ en el segundo cuadrante, se observa una importante pérdida de precisión, debido a la cancelación en el integrando.

Recordando la fórmula del error para las cuadraturas gaussianas vista en el teorema 4.2.2, vemos que este depende de las derivadas sucesivas del integrando (sin considerar la función peso de la cuadratura).

■ Algoritmo 2

Vamos a ver ahora un método para evaluar la función gamma incompleta inferior. Partiendo de su definición (asumimos a positivo para que tenga sentido usarla),

$$\gamma(a, z) = \int_0^z t^{a-1} e^{-t} dt$$

con z variable real negativa y sustituyendo z por $-z$ ($z > 0$), tenemos

$$\gamma(a, -z) = \int_0^{-z} t^{a-1} e^{-t} dt.$$

Hacemos el cambio de variable $u = -t$, que dará

$$\gamma(a, -z) = - \int_0^z (-u)^{a-1} e^u du.$$

Tomando ahora el cambio de variable $u = zy$, obtenemos

$$\gamma(a, -z) = (-z)^a \int_0^1 y^{a-1} e^{zy} dy.$$

Llegados a este punto, podemos tomar dos vías, que conducen a dos algoritmos distintos.

Si tomamos el cambio de variable $r = \log\left(\frac{1}{1-y}\right)$ quedando

$$\gamma(a, -z) = (-z)^a \int_0^\infty (1 - e^{-r})^{a-1} e^{z(1-e^{-r})} e^{-r} dr$$

que vuelve a ser computable mediante la cuadratura de Gauss-Laguerre.

z	a	$\Gamma(a, z)$	Número de nodos	Maple
1	1	3.67879441171442e-001	54	3.67879441171440e-001
1	10	3.62879959565922e+005	69	3.62879959565920e+005
1	20	1.21645100408832e+017	79	1.21645100408830e+017
1	100	9.33262154439451e+155	123	9.33262154439440e+155
10	1	4.53999297624848e-005	54	4.53999297624850e-005
20	1	2.06115362243856e-009	54	2.06115362243860e-009
100	1	3.72007597602083e-044	54	3.72007597602080e-044
-1	1	2.71828182845904e+000	54	2.71828182845900e+000
-1	10	3.62879750971969e+005	70	3.62879750971970e+005
-1	20	-1.29723899884863e-001	9	1.21645100408830e+017
-1	100	-2.68414168948591e-002	6	9.33262154439440e+155
-10	1	2.20264657948067e+004	54	2.20264657948070e+004
-20	1	4.85165195409790e+008	54	4.85165195409790e+008
-100	1	2.68811714181613e+043	54	2.68811714181610e+043
1	-1	1.48495506775922e-001	49	1.48495506775920e-001
1	-10	3.31485447140023e-002	29	3.31485447140030e-002
1	-20	1.74766734970953e-002	18	1.74766734982340e-002
1	-100	3.62700538450228e-003	7	3.64201018241050e-003
10	-1	3.83024046563161e-007	51	3.83024046563160e-007
20	-1	4.70242821542907e-012	52	4.70242821542910e-012
100	-1	3.64782143388037e-048	53	3.64782143388040e-048
-5	6	-2.19651475471813e+005	61	-2.19651475471810e+005
-8	12	-1.04490583064689e+013	25	-1.04490183896690e+013
-10	14	-9.33851935914154e+016	27	-9.33851873643950e+016
-20	25	3.65363942812955e+039	32	3.65363942812950e+039
-6	5	3.00151022358595e+005	59	3.00151022358590e+005
-12	8	-3.60833622863922e+012	31	-3.60833622359920e+012
-14	10	-1.48575428803235e+016	33	-1.48575428799610e+016
-25	20	-1.47352360088257e+037	37	-1.47352360088260e+037

Tabla 4.1: Resultados del algoritmo 1

Observamos que, pese a haber supuesto que z es negativo (donde el algoritmo parece funcionar eficientemente), también funciona bien para valores pequeños y positivos de z . Dado que el comportamiento dominante del integrando en los límites de integración es el mismo tanto para z positivo como para z negativo, no parece haber problema para que el algoritmo se pueda usar en z positivo, aunque la experimentación numérica muestra que el algoritmo pierde precisión para z positivo grande.

z	a	$\gamma(a, z)$	Número de nodos	Maple
1	1	6.32120558828557e-001	75	6.32120558828560e-001
1	10	4.04340775795550e-002	78	4.04340775795550e-002
1	20	1.93114954434349e-002	78	1.93114954434350e-002
1	100	3.71557871452810e-003	80	3.71557871452810e-003
10	1	9.99954600070235e-001	66	9.99954600070240e-001
20	1	9.99999997938854e-001	53	9.99999997938840e-001
100	1	9.99996368200589e-001	9	1.00000000000000e+000
-1	1	-1.71828182845904e+000	76	-1.71828182845900e+000
-1	10	2.49028031297260e-001	78	2.49028031297260e-001
-1	20	1.29723899884824e-001	79	1.29723899884820e-001
-1	100	2.69162946926726e-002	80	2.69162946926730e-002
-10	1	-2.20254657948067e+004	78	-2.20254657948070e+004
-20	1	-4.85165194409790e+008	78	-4.85165194409800e+008
-100	1	-2.68811714181614e+043	80	-2.68811714181610e+043

Tabla 4.2: Resultados del algoritmo 2

■ Algoritmo 3

Si en la elección que hicimos en el Algoritmo 2 hubiéramos tomado el cambio de variable $r = \log\left(\frac{y}{1-y}\right)$, entonces que

$$\gamma(a, -z) = (-z)^a \int_{-\infty}^{\infty} (1 + e^{-r})^{-(a+1)} e^{z(1+e^{-r})^{-1}} e^{-r} dr$$

donde podemos tomar el cambio de variable $r = \sinh(t)$ para obtener

$$\gamma(a, -z) = (-z)^a \int_{-\infty}^{\infty} \phi(t)^{a+1} e^{z\phi(z)} e^{-r(t)} \cosh(t) dt$$

con $\phi(t) = (1 + e^{-r(t)})^{-1}$ y $r(t) = \sinh(t)$. El comportamiento asintótico del integrando es doblemente exponencial cuando $t \rightarrow \pm\infty$. En [8] se prueba que la aplicación de la regla trapezoidal para calcular integrales con este tipo de integrandos produce resultados satisfactorios en cuanto a que se pueden obtener buenas aproximaciones con la elección de un número pequeño de nodos (tras truncar el intervalo de integración). Este tipo de cuadraturas se conocen como *fórmulas doblemente exponenciales*.

Dado que los algoritmos 2 y 3 sirven para evaluar la función $\gamma(a, z)$, podemos hacer una comparación entre ambos. La figura 4.1 muestra el número de nodos

z	a	$\gamma(a, z)$	Número de nodos	Maple
1	1	6.32120558828558e-001	65	6.32120558828560e-001
1	10	4.04340775795549e-002	65	4.04340775795550e-002
1	20	1.93114954434349e-002	129	1.93114954434350e-002
1	100	3.71557871452809e-003	129	3.71557871452810e-003
10	1	9.99954600070238e-001	65	9.99954600070240e-001
20	1	9.99999997938847e-001	129	9.99999997938840e-001
100	1	1.00000000000000e+000	129	1.00000000000000e+000
-1	1	-1.71828182845905e+000	65	-1.71828182845900e+000
-1	10	2.49028031297260e-001	65	2.49028031297260e-001
-1	20	1.29723899884824e-001	129	1.29723899884820e-001
-1	100	2.69162946926725e-002	129	2.69162946926730e-002
-10	1	-2.20254657948067e+004	65	-2.20254657948070e+004
-20	1	-4.85165194409790e+008	129	-4.85165194409800e+008
-100	1	-2.68811714181613e+043	129	-2.68811714181610e+043

Tabla 4.3: Resultados del algoritmo 3

necesarios para calcular el valor de $\gamma(a, z)$ usando estos dos algoritmos con $a \in [0, 50]$, $z \in [-50, 50]$ y ambas variables enteras.

La gráfica de la izquierda muestra los nodos calculados en el algoritmo 2, mientras que la de la derecha muestra los nodos calculados en el algoritmo 3. Para visualizar mejor la gráfica del algoritmo 3 se ha dado un color distinto a cada una de las diferentes posibilidades de cantidad de nodos calculados (pues siempre hay una cantidad de la forma $2^n + 1$ con n natural). En este caso, los puntos rojos representan 65 nodos calculados y los puntos verdes 129 nodos calculados.

Observamos que en el caso de z negativo el algoritmo 2 necesita calcular menos nodos para calcular $\gamma(a, z)$ si z es grande, mientras que el algoritmo 3 es más rápido para z negativo pequeño.

A pesar de que para z positivo parece que el algoritmo 2 es más rápido, recordamos que en realidad aumentaba el error a medida que aumentaba el valor de z , por lo que no hay nada que discutir en este caso. El algoritmo 3 calcula un número razonable de nodos en este caso con la ventaja de tener mejor precisión.

Antes de finalizar, señalar que estos algoritmos se pueden usar para argumentos a y z de tipo complejo con módulo moderado. De hecho, el algoritmo 3 funciona particularmente bien para valores de z con parte real negativa (el algoritmo 2 falla cuanto mayor es el módulo de z).

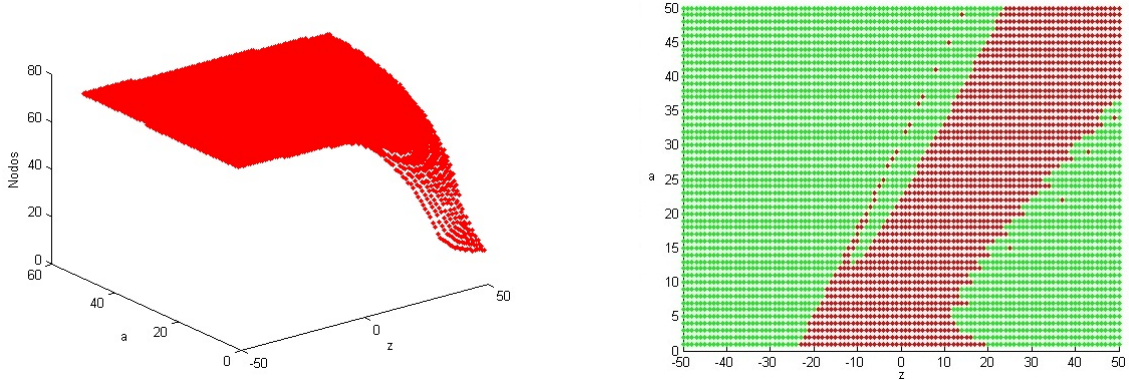


Figura 4.1: Nodos calculados en los algoritmos 2 y 3

En vista de los resultados obtenidos, puede ser de interés continuar estudiando la aplicación de métodos de cuadratura al cálculo de las funciones gamma incompleta con el fin de obtener un procedimiento eficiente para su evaluación, en el sentido de que a pesar de que existen procedimientos para evaluar las funciones gamma incompletas en algunas de las regiones cubiertas por los algoritmos trabajados en esta sección, podríamos lograr una mejora en la velocidad de cálculo manteniendo el mismo nivel de precisión.

También sería bueno comprobar el alcance de los algoritmos aquí trabajados con el fin de delimitar su alcance y, en caso de no ser eficaces para ciertos valores de a y z , intentar cubrir dichas carencias aplicando resultados relativos a la teoría usada en estos métodos o solapar con otros algoritmos más adecuados.

Apéndice

A continuación vamos a listar el código MATLAB de los algoritmos utilizados en el capítulo 4. Primero damos el código de los programas principales y terminaremos incluyendo los métodos auxiliares que se han usado en cada algoritmo.

Algoritmo 1

```
function [I0 , i]=gamxpos(a , x , epsi)
N=200;
mu0=1;
[xn ,w]=GW(mu0 , JLa(0 ,N) );
I0=0;
delta=1+epsi;
i=0;
while delta>epsi
    i=i+1;
    Ip=I0;
    I0=I0+fgp(xn(i) , x , a)*w(i);
    delta=abs(1-Ip/I0);
end
I0=exp(-x)*I0;
```

Algoritmo 2

```

function [I0 , i]=gamren2(a , x , epsi)
N=200;
mu0=1;
[xn ,w]=GW(mu0 , JLa(0 ,N) );
I0=0;
delta=1+epsi ;
i=0;
while delta>epsi
    i=i+1;
    Ip=I0 ;
    I0=I0+fgn(xn(i) , x , a)*w(i) ;
    delta=abs(1-Ip/I0) ;
end
if imag(x)==0
    I0=I0*(x)^(a)*exp(1i*pi*a) ;
else
    I0=I0*(x)^(a)*exp(-1i*pi*sign(imag(x))*a) ;
end

```

Algoritmo 3

```

function [I0 , i]=gamren(a , x , epsi)
[tiv , i]=trapE(a , x , epsi) ;
I0=(-x)^a*tiv(length(tiv)) ;
i=2^i+1;

```

A continuación listamos las funciones auxiliares que contienen los integrandos de cada uno de los algoritmos y los algoritmos de Golub-Welsch, la regla trapezoidal y la cuadratura de Gauss-Laguerre.

Auxiliar Algoritmo 1

```

function fgp=fgp(t , x , a)
fgp=(t+x)^(a-1);

```

Auxiliar Algoritmo 2

```
function fgn=fgn(t,x,a)
phi=(1-exp(-t));
fgn=phi^(a-1)*exp(x*phi);
```

Auxiliar Algoritmo 3

```
function f0=f(t,x,a)
z=sinh(t);
phi=1/(1+exp(-z));
f0=phi^(a+1)*exp(x*phi)*exp(-z)*cosh(t);
```

Algoritmo de Golub-Welsch

```
function [x,w]=GW(mu0,J)
N=size(J,1);
[V,D]=eig(J);
for i=1:N
    x(i)=D(i,i);
    w(i)=mu0*V(1,i)^2;
end
```

Cuadratura de Gauss-Laguerre

```
function J=JLa(alpha,N)
if N>1
for i=1:N-1
a(i)=sqrt(i*(i+alpha));
b(i)=2*i+alpha-1;
end
b(N)=2*N+alpha-1;
J=diag(a,-1)+diag(a,1)+diag(b,0);
end
```

Regla trapezoidal

```
function [tiv , con]=trapE(aa , x , eps )
a=-6;b=5;
h=(b-a);
ti=0.5*h*( f(a , x , aa)+f(b , x , aa) );
delta=1+eps;
n=1;con=0;
while delta>eps
    con=con+1;
    h=0.5*h;
    sum=0;
    for i=1:n
        xac=a+(2*i-1)*h;
        sum=sum+f(xac , x , aa);
    end
    tin=0.5*ti+h*sum;
    tiv(con)=ti;
    delta=abs(1-ti/tin);
    ti=tin;
    n=2*n;
end
```


Bibliografía

- [1] Nico M. Temme : *An Introduction to the Classical Functions of Mathematical Physics*, John Wiley & Sons, 1996.
- [2] Frank W.J. Olver, Daniel W. Lozier, Ronald F. Boisvert, Charles W. Clark : *NIST Handbook of Mathematical Functions*, Cambridge University Press, 2010.
- [3] Walter Gautschi : *A computational procedure for incomplete gamma functions*, ACM Trans. Math. Software, 5 (1979), pp. 466-481.
- [4] Amparo Gil, Javier Segura, Nico M. Temme : *Numerical Methods for Special Functions*, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2007.
- [5] Amparo Gil, Javier Segura, Nico M. Temme : *Efficient and accurate algorithms for the computation and inversion of the incomplete gamma function ratios*, SIAM J. Sci. Comput., 34 (2012), pp. 2965-2981.
- [6] Ian Thompson : *Algorithm 926: Incomplete gamma functions with negative arguments*, ACM Trans. Math. Software, 39 (Febrero 2013), art. 14.
- [7] Nico M. Temme : *Uniform asymptotics for the incomplete gamma functions starting from negative values of the parameters*, Methods Appl. Anal. 3 (1996), pp. 335-344.
- [8] H. Takahasi, M. Mori : *Double exponential formulas for numerical integration*, Publ. RIMS, Universidad de Kyoto, 9 (1974) 721-741.
- [9] A.M. Legendre : *Memoire sur les integrations par arcs d'ellipse*, Hist. Acad. Roy. Sci. avec Mém. Math. Phys. (1786), pp. 616-643.

- [10] A. Deaño, J. Segura : *Transitory minimal solutions of hypergeometric recursions and pseudoconvergence of associated continued fractions*, Math. Comp., 76 (2007), pp. 879-901.
- [11] G. Allasia, R. Besengui : *Numerical calculation of incomplete gamma functions by the trapezoidal rule*, Numer. Math. 50 (1987), pp. 419-428.
- [12] M.A. Chaudhry, S.M. Zubair : *On the decomposition of generalized incomplete gamma functions with applications to Fourier transforms*, J. Comput. Appl. Math. 59 (1995), pp. 253-284.