

Carlos Rodríguez Barreto

Fórmulas de Cuadratura. Aplicaciones

Quadratura formulas. Applications

Trabajo Fin de Grado
Grado en Matemáticas
La Laguna, Junio de 2022

DIRIGIDO POR

Carlos Javier Díaz Mendoza

Carlos Javier Díaz Mendoza
Análisis Matemático
Universidad de La Laguna
38200 La Laguna, Tenerife

Agradecimientos

En primer lugar, a mi tutor, Carlos Javier Díaz Mendoza, por su cercanía, trabajo, dedicación y esfuerzo durante la realización del proyecto, que ha sido fundamental para la finalización del mismo.

A mi familia, y en especial, a mis padres, por convertirme en la persona que soy ahora, por educarme, cuidarme y creer en mí en todo momento, desde mi infancia hasta ahora.

A mis amigos de la universidad, Eduardo, Indira y Paola, por compartir esta etapa de nuestra vida, ya que sin ustedes no hubiera sido igual, y al resto de compañeros de la promoción, con los que he compartido estos años.

A mis amigos de La Palma, que siempre han sido parte de mi vida y no me la imagino sin ustedes, gracias por todos los momentos vividos juntos. Y en general, a todas las personas y profesores que siempre han estado apoyándome en los distintos momentos de mi vida.

Carlos Rodríguez Barreto
La Laguna, 12 de junio de 2022

Resumen · Abstract

Resumen

El análisis numérico ha adquirido una especial relevancia como consecuencia del uso generalizado del ordenador como herramienta de trabajo. En esta memoria, abordaremos el uso de fórmulas de cuadratura interpolatorias como método numérico para aproximar integrales definidas. Analizamos la existencia, la estimación del error en función de la regularidad del integrando, la estabilidad, el cálculo eficiente, así como su convergencia. Partiendo desde las más básicas, las interpolatorias, hasta las de máxima precisión, usualmente denominadas Gaussianas. Además, analizamos el uso de uno de ellos para construir fórmulas de cuadraturas interpolatorias que heredan las cualidades más relevantes desde el punto de vista numérico cuando la correspondiente función peso es cercana a una perfectamente conocida en un sentido muy natural. Concluimos el trabajo analizando la convergencia e ilustrando una de las aplicaciones más relevantes, concretamente, la aproximación de Padé asociada a funciones de Markov, funciones de especial relevancia en la Física-Matemática.

Palabras clave: *Fórmula de cuadratura – Aproximación Padé – polinomios ortogonales.*

Abstract

Numerical analysis has acquired special relevance as a consequence of the widespread use of the computer as a work tool. In this report, we will deal with the use of interpolating quadrature formulas as a numerical method to approximate definite integrals. We analyse the existence, the estimation of the error depending on the regularity of the integrand, the stability, the efficient calculation, as well as its convergence. Starting from the most basic ones, the interpolatory ones, to those of maximum precision, usually called Gaussian. Furthermore, we analyse the use of one of them to construct interpolatory quadrature formulas that inherit the most numerically relevant qualities when the corresponding weight function is close to a perfectly known one in a very natural sense. We conclude the paper by analysing convergence and illustrating one of the most relevant applications, namely, the Padé approximation associated to Markov functions, functions of special relevance in Physics-Mathematics.

Keywords: *Quadrature formula – Padé Approximation – Orthogonal polynomials.*

Contenido

Agradecimientos	III
Resumen/Abstract	V
Introducción	IX
1. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Christoffel	1
1.1. Método de los coeficientes indeterminados.	2
1.2. Fórmulas de cuadratura interpolatorias.	3
1.3. Fórmulas de cuadratura de Gauss.	8
1.3.1. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Legendre	9
1.3.2. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Radau.	11
1.3.3. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Lobatto	15
2. Cálculo eficiente de las fórmulas de cuadratura gaussianas ...	21
2.1. Fórmula de cuadratura de Gauss-Christoffel	21
2.2. Fórmula de cuadratura de Gauss-Radau	23
2.3. Fórmula de cuadratura de Gauss-Lobatto	25
3. Convergencia de las fórmulas de cuadratura	35
4. Aproximación Padé	39
A. Apéndice	43
A.1. Polinomios ortogonales	44
Bibliografía	51
Poster	53

Introducción

La necesidad de evaluar integrales definidas es un problema matemático relevante desde la antigüedad. Como es bien conocido, hay que remontarse hasta los tiempos de Eudoxio con el método de exhaustión, desarrollado posteriormente por Arquímedes para el cálculo de áreas y volúmenes de algunas figuras geométricas y el cálculo de magnitudes físicas tales como el centro de gravedad. Su origen geométrico, el cálculo del área comprendida entre un trozo de curva y el eje de abscisas, influyó considerablemente, como es lógico, en las técnicas para aproximar dicha integral; ya que la reducción del área en cuestión a un mallado de figuras planas perfectamente conocidas determinó la aparición de las llamadas “reglas primitivas”, como pueden ser la regla rectangular, la trapezoidal, entre otras. Casos particulares del tópico que nos ocupa, las **fórmulas de cuadratura**.

En el capítulo 1 se hace una breve introducción de las fórmulas de cuadratura, para centrarnos posteriormente en las fórmulas de cuadratura Gaussianas. Concretamente, en la sección 1.3 y sus correspondientes subsecciones se obtienen las fórmulas de cuadratura de Gauss, Gauss-Radau, y Gauss-Lobatto mediante la interpolación de Hermite, obteniendo expresiones de sus pesos, además de la expresión del error cometido en dicha aproximación. Para finalizar el capítulo, se plantea el caso en el cual el integrando no resulta ser eficientemente aproximado por polinomios, surgiendo así una función auxiliar w que aglutina las singularidades, llamada función peso, pasando a denominarse fórmulas de cuadratura de Gauss-Christoffel.

En el capítulo 2, se aborda una forma más eficiente del cálculo de los nodos y los pesos de las fórmulas de cuadratura gaussianas, haciendo uso del álgebra lineal numérica, reduciendo el problema al cálculo de autovectores y autovalores de la matriz de Jacobi asociada. Ilustramos que para los pesos clásicos se conocen explícitamente todos los parámetros involucrados en dicho algoritmo. Finalizaremos el capítulo mostrando una de las estrategias más usadas cuando la función “peso” no es positiva, incluso oscilante.

Una vez obtenida la expresión de las fórmulas de cuadratura gaussianas, y una forma óptima de obtener sus correspondientes nodos y pesos, solo resta un análisis, con cierto detalle, de la convergencia de las fórmulas de cuadratura para clases de funciones lo más amplia posibles, teniendo siempre presente que los nodos y pesos sean de fácil computación, análisis realizado en el capítulo 3.

En el capítulo 4, y último de esta memoria, se ilustra una de las principales aplicaciones que presentan las fórmulas de cuadratura, que resulta ser una “rela-

ción simbiótica” con otro tópico de la teoría de la aproximación, la Aproximación Padé.

Para finalizar la memoria, disponemos de un Apéndice donde se recogen los resultados más relevantes en la construcción de fórmulas de cuadratura por parte de teoría de polinomios ortogonales.

Fórmulas de cuadratura de Gauss-Christoffel

La necesidad de evaluar integrales definidas de la forma:

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

es un problema matemático clásico.

Como problema matemático, en la mayoría de las ocasiones, nos encontramos con serios inconvenientes: la primitiva, en general, no es expresable en términos de funciones, e incluso, estando al alcance nuestro una primitiva, la expresión de la misma puede ser complicada y poco manejable computacionalmente. En otras ocasiones, el integrando está dado de forma implícita, satisfaciendo alguna ecuación diferencial o integral, o disponemos tan solo de algunos valores del integrando como sucede de manera experimental. En estas circunstancias, la única alternativa que nos queda es estimar numéricamente dicha integral.

La relevancia del problema ha motivado la existencia de una gran variedad de técnicas para aproximarla numéricamente, abordaremos una de ellas en esta memoria, las **fórmulas de cuadratura**.

Del propio concepto matemático, las **Sumas de Riemann** señalan un esquema de aproximación natural:

$$\int_a^b f(t) dt \approx \sum_{k=1}^n A_k f(x_k),$$

la expresión

$$I_n(f) = \sum_{k=1}^n A_k f(x_k) \tag{1.1}$$

recibe el nombre de “*fórmula de cuadratura de n nodos*”, f.c. de ahora en adelante. A los números $\{A_k\}_{k=1}^n$ y $\{x_k\}_{k=1}^n$ se les denominan pesos y nodos de la f.c., respectivamente. Los nodos deben ser distintos dos a dos y contenidos en $[a, b]$. Definimos el polinomio nodal $W(x) = \prod_{j=1}^n (x - x_j)$ como el polinomio que tiene por ceros a los nodos.

Por $E_n(f)$ denotamos al error cometido en dicha aproximación, concretamente:

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f).$$

Por lo tanto, el problema numérico que nos ocupa es cómo escoger los $2n$ parámetros, $\{A_k\}_{k=1}^n$ y $\{x_k\}_{k=1}^n$, con $x_i \neq x_j, \forall i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$, $\{x_i\}_{i=1}^n \subseteq [a, b]$, tal que $E_n(f)$ sea lo más pequeño posible para una clase amplia de funciones.

Armonizando el teorema de Weierstrass (toda función continua en un intervalo finito $[a, b]$ se puede aproximar uniformemente por polinomios) con la eficiente computación de los polinomios, resulta natural que un criterio para escoger los nodos y los pesos es que la f.c. integre exactamente a todo polinomio de grado lo más alto posible. Concretamente,

Definición 1.1. Diremos que la f.c. $I_n(f)$ es exacta en \mathbb{P}_d sí y solo sí $E_n(p) = 0, \forall p \in \mathbb{P}_d$.

Definición 1.2. El valor d tal que $E_n(p) = 0$ para todo $p \in \mathbb{P}_d$, y existe un $q \in \mathbb{P}_{d+1}$ tal que $E_n(q) \neq 0$ recibe el nombre de grado de **exactitud o precisión** de $I_n(f)$.

El siguiente resultado establece una limitación de dicho grado de exactitud.

Teorema 1.3. No existen fórmulas de cuadratura con n nodos exactas en \mathbb{P}_{2n} .

Demostración. Supongamos por reducción al absurdo que existe, es decir, $I(p) = I_n(p), \forall p \in \mathbb{P}_{2n}$. Definimos el polinomio $p = W^2 \in \mathbb{P}_{2n}$, siendo W el polinomio nodal. Se cumple que:

$$0 = \sum_{j=1}^n \lambda_j W^2(x_j) = \int_a^b W^2(x) dx > 0,$$

lo cual es absurdo, el absurdo proviene de haber supuesto que la f.c. es exacta en \mathbb{P}_{2n} . \square

Teniendo en cuenta las exigencias que demanda la construcción de las fórmulas de cuadratura, en un primer momento, aparentemente tenemos libertad para elegir los nodos, con la única restricción de que sean distintos dos a dos en $[a, b]$. Por tanto, cabe preguntarse. ¿Cómo debemos escoger $\{x_j\}_{j=1}^n$ distintos dos a dos en $[a, b]$, de tal forma que $I_n(f) = \sum_{j=1}^n A_j f(x_j)$ verifique que

$$I(p) = I_n(p), \forall p \in \mathbb{P}_s$$

siendo s lo más grande posible?

Dado que tenemos n parámetros libres $\{A_j\}_{j=1}^n$, parece natural obtener como mínimo $s = n - 1$, ya que \mathbb{P}_{n-1} tiene dimensión n .

1.1. Método de los coeficientes indeterminados.

El método de los coeficientes indeterminados, nos permite dar una respuesta positiva. Si imponemos que $I_n(f)$ sea exacta en \mathbb{P}_{n-1} , por la linealidad tanto de la integral como de las fórmulas de cuadratura, es equivalente a imponer que sea

exacta para los monomios $\{x^k\}_{k=0}^{n-1}$, dando lugar a un sistema de n ecuaciones con n incógnitas, los pesos $\{A_k\}_{k=1}^n$, que viene dado por:

$$\sum_{k=1}^n A_k x_k^j = I(x^j) = \frac{b^{j+1} - a^{j+1}}{j+1}, \quad j = 0, \dots, n-1,$$

cuya matriz de coeficientes es la traspuesta de la matriz de Vandermonde asociada a los nodos,

$$V^T = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{n-1} \\ 1 & x_3 & x_3^2 & \cdots & x_3^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^{n-1} \end{pmatrix}^T$$

que es regular, al ser los nodos distintos dos a dos. De esta forma podemos garantizar la existencia de una única f.c. exacta en \mathbb{P}_{n-1} , fijados los n nodos. Por tanto, podemos concluir que:

Proposición 1.4. *Para cualquier elección de n nodos distintos dos a dos, existe una única f.c. exacta en \mathbb{P}_{n-1} .*

Una vez resuelto matemáticamente el problema numérico, podemos abordarlo desde el punto de vista computacional. Este procedimiento nos ha permitido garantizar la existencia de una f.c. de una forma muy sencilla, sin embargo, presenta serios problemas desde el punto de vista numérico. Por un lado, sabemos que la matriz de Vandermonde puede presentar mal condicionamiento numérico, cuando los nodos se encuentren próximos entre sí (cabe recordar que el determinante de la matriz de Vandermonde es $\prod_{1 \leq i < j \leq n} (x_j - x_i)$). Por otra parte, no disponemos de una **expresión del error** de cuadratura $E_n(f)$. Por este motivo, se debe explorar otro procedimiento para su obtención.

1.2. Fórmulas de cuadratura interpolatorias.

Basándonos en la configuración de todo problema de aproximación de funciones debemos afinar aún más. Concretamente, debemos encontrar una función, g , que aproxime a f , para así integrar g , que debe ser una función fácilmente integrable, en lugar de f .

Un criterio de aproximación es la interpolación. Concretamente, si la función es lo suficientemente regular y consideramos el polinomio de interpolación $L_{n-1}(f; x)$ en la forma de Lagrange asociado a los nodos x_1, \dots, x_n , ver [8]:

$$f(x) = L_{n-1}(f; x) + \frac{f^{(n)}(\xi(x))}{n!} W(x), \quad \xi(x) \in (a, b), \quad (1.2)$$

donde

$$L_{n-1}(f; x) = \sum_{k=1}^n f(x_k) l_k(x), \quad (1.3)$$

siendo $\{l_k\}_{k=1}^n$ los polinomios fundamentales de Lagrange asociados a los nodos $\{x_k\}_{k=1}^n$, caracterizados por ser polinomios de grado $n-1$ tales que $l_k(x_j) = \delta_{k,j}$, cuya expresión es $l_k(x) = \prod_{i=1, i \neq k}^n \frac{x-x_i}{x_k-x_i}$, $k = 1, \dots, n$. Es inmediato verificar que $\{l_k\}_{k=1}^n$ es una base de \mathbb{P}_{n-1} . Si integramos (1.2), se sigue que:

$$I(f) = I(L_{n-1}(f; \cdot)) + \frac{1}{n!} \int_a^b f^{(n)}(\xi(x)) W(x) dx. \quad (1.4)$$

Integrando (1.3), se tiene

$$I(L_{n-1}(f; \cdot)) = \sum_{k=1}^n B_k f(x_k),$$

donde

$$B_k = I(l_k) = \int_a^b l_k(x) dx, \quad k = 1, \dots, n, \quad (1.5)$$

obteniéndose una fórmula de cuadratura

$$J_n(f) = \sum_{k=1}^n B_k f(x_k).$$

Dado que $p^{(n)}(x) = 0, \forall p \in \mathbb{P}_{n-1}$, se sigue de (1.4), que $J_n(p) = I(p), \forall p \in \mathbb{P}_{n-1}$. De esta forma, como consecuencia de la unicidad, coincide con la f.c. obtenida a través del método de los coeficientes indeterminados. De aquí surge la siguiente definición.

Definición 1.5. Una f.c. $I_n(f)$ recibe el nombre de **interpolatoria** si sus pesos $\{A_k\}_{k=1}^n$ vienen dados por (1.5).

Por tanto, se puede concluir que

Teorema 1.6. Una f.c. $I_n(f)$ tiene grado de precisión al menos $n-1$ si y sólo si es interpolatoria.

Se observa que al utilizar la vía interpolatoria, no solo se evita calcular los pesos mediante la matriz de Vandermonde, ver (1.5), sino que además, si el integrando es lo suficientemente regular, obtenemos el otro objetivo inicial, una expresión del error, y por tanto, su posible estimación.

Teorema 1.7. Sea $f \in C^n([a, b])$. Entonces,

$$|E_n(f)| \leq \frac{M_n}{n!} \int_a^b |W(x)| dx.$$

Demostración. De (1.4), y tomando valor absoluto,

$$|I(f) - I(L_n(f; x))| = |E_n(f)| \leq \frac{1}{n!} \left| \int_a^b |f^{(n)}(\xi(x))| |W(x)| dx \right|,$$

gracias a la continuidad de $f^{(n)}$ en $[a, b]$,

$$|E_n(f)| \leq \frac{M_n}{n!} \int_a^b |W(x)| dx,$$

siendo $M_n = \max_{x \in [a, b]} |f^{(n)}(x)|$. □

Se concluye, por tanto, que el error depende del tamaño de la función $f^{(n)}$ en el intervalo $[a, b]$. Observamos que se encuentra en nuestras manos hacer pequeño $\int_a^b |W(x)| dx$, ya que tenemos la libertad de escoger los nodos, con la única restricción de ser distintos dos a dos en $[a, b]$. Recapitulando, con el fin de obtener la precisión deseada, debemos buscar una elección de nodos tal que $\frac{1}{n!} \int_a^b |W(x)| dx$ “arrastre” la magnitud de M_n hacia cero a medida que n aumenta.

Otro aspecto muy relevante en todo método numérico es su **estabilidad**. Es decir, que tanto el problema matemático

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

como el método numérico propuesto

$$I_n(f) = \sum_{k=1}^n A_k f(x_k),$$

tengan la misma sensibilidad frente a los posibles errores en los datos de entrada. Por consiguiente, debemos plantearnos cómo afectan pequeñas perturbaciones del integrando en su cálculo. Supongamos que \tilde{f} es esa pequeña perturbación, en general ocasionada por una previa modelización, error de redondeo, etc, tal que

$$\max_{x \in [a, b]} |f(x) - \tilde{f}(x)| = \epsilon.$$

Veamos cómo afecta a la integral:

$$|I(f) - I(\tilde{f})| = \left| \int_a^b (f(x) - \tilde{f}(x)) dx \right| \leq \int_a^b |f(x) - \tilde{f}(x)| dx \leq \epsilon(b - a).$$

Por lo tanto, el número de condición absoluto es $K_{abs} = b - a$.

Ahora hacemos lo propio con el problema numérico. Para ello debemos estimar:

$$|I_n(f) - I_n(\tilde{f})| = |I_n(f - \tilde{f})| = \left| \sum_{k=1}^n A_k (f(x_k) - \tilde{f}(x_k)) \right| \leq \sum_{k=1}^n |A_k| |f(x_k) - \tilde{f}(x_k)|,$$

concluimos que

$$|I_n(f) - I_n(\tilde{f})| \leq \epsilon \sum_{k=1}^n |A_k|,$$

luego, su número de condición es $K_{abs}^n = \sum_{k=1}^n |A_k|$.

De esta forma, surge una nueva exigencia al elegir los nodos, ya que además debemos escogerlos de tal forma que

$$K_{abs}^n = \sum_{k=1}^n |A_k| \approx b - a,$$

o en su defecto, como veremos, que

$$K_{abs}^n = \sum_{k=1}^n |A_k| \leq M, \quad \forall n \in \mathbb{N},$$

las sumas de los valores absolutos de los pesos estén uniformemente acotadas.

Siendo nuestras máximas expectativas que $A_k > 0$, $k = 1, 2, \dots, n$. De ser así, al ser exacta para las constantes, la f.c. es estable

$$b - a = \int_a^b dx = \sum_{j=1}^n A_j, \quad K_{abs}^n = b - a$$

Resumiendo, está entre nuestras pretensiones escoger los nodos de tal forma que la f.c. sea exacta en \mathbb{P}_s , s lo más grande posible, de tal modo que sus respectivos pesos sean positivos, es decir, que emule a una suma de Riemann, o en su defecto, que las sumas de los valores absolutos de sus pesos estén uniformemente acotadas. Ventajosamente, ambas exigencias están íntimamente vinculadas, tal y como se desprende del siguiente resultado:

Proposición 1.8. *Sea $I_n(f)$ una f.c. exacta en \mathbb{P}_m , $m \geq n - 1$, entonces al menos $\lceil \frac{m}{2} \rceil + 1$ de sus pesos son positivos.*

Demostración. Supongamos, por reducción al absurdo, que solo hay l pesos positivos con $l \leq \lceil \frac{m}{2} \rceil$. Denotamos por A_1, A_2, \dots, A_l dichos pesos, y por x_1, x_2, \dots, x_l sus respectivos nodos asociados. Definimos $Q_l^2(x) = \prod_{j=1}^l (x - x_j)^2$, $Q_l^2 \in \mathbb{P}_m$.

Dado que la f.c. es exacta en \mathbb{P}_m :

$$0 < I(Q_l^2(x)) = I_n(Q_l^2(x)) = \sum_{j=l+1}^n Q_l^2(x_j) A_j < 0,$$

ya que $A_k < 0$, $k = l, l + 1, \dots, n$, lo cual es absurdo. Por lo tanto, $l > \lceil \frac{m}{2} \rceil$. \square

Es inmediato el siguiente resultado:

Corolario 1.9. *Todas las fórmulas de cuadratura exactas en $2n - 2$ tienen todos sus pesos positivos. En particular, son estables.*

Cabe preguntarse lo siguiente. Si restringimos nuestra libertad, y le damos más autonomía al problema numérico, ¿podremos conseguir que todos los pesos sean positivos?. Hemos visto que un primer paso para aspirar a obtener la estabilidad es el de aumentar el grado de precisión de las fórmulas de cuadratura interpolatorias, ya que garantizamos más pesos positivos. Sintiéndonos algo ambiciosos, nuestro objetivo es llegar a \mathbb{P}_{2n-1} .

Paralelamente, observamos que a medida que vamos mejorando las cualidades numéricas, vamos dejando a un lado ampliar las prestaciones como problema matemático. Nos referimos a ampliar la clase de funciones para las cuales disponemos de una expresión del error. Concretamente, buscamos una expresión del error que no exija tanta regularidad al integrando, sobre todo cuando el n deba ser lo suficientemente grande ($f \in C^n([a, b])$). Si revisamos la configuración de nuestro problema de aproximación, y gracias a un uso sutil de la aproximación polinómica, podemos conseguir una estimación para una clase de funciones lo suficientemente amplia, las funciones continuas en $[a, b]$.

Teorema 1.10. *Sean $f \in C([a, b])$ y $I_n(f)$ una f.c. exacta en \mathbb{P}_m ($m \geq n - 1$), entonces*

$$|E_n(f)| \leq \left[(b - a) + \sum_{k=1}^n |A_k| \right] \rho_m(f), \quad (1.6)$$

donde $\rho_k(f) = \min_{p \in \mathbb{P}_k} \|f - p\|_\infty$, $\|f - p\|_\infty = \max_{x \in [a, b]} |f(x) - p(x)|$.

Demostración. Sea $f \in C([a, b])$, entonces

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f) = I(f) - I(L_{n-1}(f; x)).$$

Sea p cualquier polinomio de \mathbb{P}_m , dado que $I_n(f)$ es exacta en \mathbb{P}_m , sumando y restando $I_n(p) = I(p)$:

$$\begin{aligned} I(f) - I_n(f) &= I(f) - I(p) + I_n(p) - I(L_{n-1}(f; x)) \\ &= \int_a^b (f(x) - p(x)) dx + I_n(p - L_{n-1}(f; x)). \end{aligned}$$

Tomando valores absolutos:

$$\begin{aligned} |E_n(f)| &= |I(f) - I_n(f)| \leq \int_a^b |f(x) - p(x)| dx + \sum_{j=1}^n |p(x_j) - f(x_j)| |A_j| \\ &\leq \|f - p\|_\infty \int_a^b dx + \|f - p\|_\infty \sum_{j=1}^n |A_j|, \end{aligned}$$

equivalentemente

$$|E_n(f)| \leq \|f - p\|_\infty \left[(b - a) + \sum_{j=1}^n |A_j| \right], \quad \forall p \in \mathbb{P}_m.$$

□

Observamos que en esta nueva estimación del error se pone de manifiesto la ventaja de que los pesos sean positivos, o en su defecto, que las sumas de sus respectivos valores absolutos estén uniformemente acotadas, dado que, de ser así, por el Teorema de Weierstrass, $\lim_{n \rightarrow \infty} E_n(f) = 0$, $\forall f \in C([a, b])$, ya que $m \geq n - 1$ y $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n(f) = 0$, $\forall f \in C([a, b])$. Es más, si la función es regular, recuperamos nuevamente velocidad, como se puede deducir del siguiente resultado, ver [2].

Teorema 1.11 (Teorema de Jackson). *Si $f \in C^k([a, b])$:*

$$|\rho_n(f)| \leq \left(\frac{\pi}{2}\right)^k \frac{\|f^{(k)}\|_\infty}{(n+1)n \cdots (n-k+2)},$$

y si f es solo continua en $[a, b]$:

$$|\rho_n(f)| \leq \omega\left(f; \frac{\pi}{n+1}\right)$$

siendo $\omega(f, \delta)$ el módulo de continuidad para $\delta > 0$

$$\omega(f, \delta) = \sup_{|x-x'| \leq \delta} |f(x) - f(x')|.$$

Por lo tanto, podemos estimar $|E_n(f)|$ en términos de la suavidad de la función, estimaciones que dependen del grado de exactitud de la fórmula de cuadratura. Se debe buscar el equilibrio entre la fácil computación de los nodos y pesos con un grado de exactitud alto y la acotación de la suma de los valores absolutos de los pesos, siendo mejor esto último cuando la acotación esté lo más próxima de $b - a$.

1.3. Fórmulas de cuadratura de Gauss.

Si disponemos de mecanismos que nos permitan evaluar el integrando donde se nos imponga, podemos permitir que el problema matemático-numérico manifieste sus propias bondades. Es decir, que los nodos también sean parámetros a determinar.

Se origina la siguiente pregunta, ¿existirán elecciones de nodos de tal forma que se logre aumentar el grado de exactitud de la f.c. interpolatoria? Como

hemos señalado, sería deseable llegar a $2n - 1$, al dejar los $2n$ parámetros libres $(\{A_k\}_{k=1}^n, \{x_k\}_{k=1}^n)$, es decir, ¿podremos aumentar en n el grado de exactitud de la f.c. interpolatoria?, uno por cada nodo que vaya restringiendo el propio problema.

Si nos planteamos el método de los coeficientes indeterminados con el fin de conseguir grado de precisión $2n - 1$, obtendríamos un sistema no lineal de $2n$ ecuaciones con $2n$ incógnitas, siendo ahora sus incógnitas no sólo los $\{A_k\}_{k=1}^n$, sino también los $\{x_k\}_{k=1}^n$. Es bien sabido que el análisis de los sistemas de ecuaciones no lineales es un problema matemático complicado. Si bien es verdad, éste en concreto se puede caracterizar de otra forma, la cual arroja una luz para otra vía de resolución, pero sin obtener una expresión del error, ver la sección 2.7.2 de [3].

1.3.1. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Legendre

Nos planteamos nuevamente si el esquema de la interpolación nos proporciona el vínculo para la construcción de la f.c. interpolatoria exacta en \mathbb{P}_{2n-1} . Lógicamente, debe venir por un tipo de interpolación más sofisticado que el de Lagrange que solo nos garantiza exactitud en \mathbb{P}_{n-1} . Estamos hablando de la interpolación de Hermite. Concretamente, **¿existirán n nodos**

$$a \leq \mathbf{x}_1 < \dots < \mathbf{x}_n \leq b$$

tales que

$$I(p) = I_n(p), \quad \forall p \in \mathbb{P}_{2n-1}?$$

Si procedemos de forma análoga a la interpolación de Lagrange. El polinomio de interpolación de Hermite de f asociado a los nodos $\{x_j\}_{j=1}^n$ viene dado por, ver [8],

$$H_{2n-1}(f; x) = \sum_{j=1}^n f(x_j) L_j^1(x) + \sum_{j=1}^n f'(x_j) L_j^2(x), \quad (1.7)$$

siendo $\{L_j^1, L_j^2\}_{j=1}^n$ los polinomios fundamentales de Lagrange de primera y segunda especie, respectivamente, que vienen dados por, para $j = 1, \dots, n$:

$$L_j^1(x) = [1 - 2(x - x_j)l_j'(x)] l_j^2(x),$$

$$L_j^2(x) = (x - x_j)l_j^2(x),$$

donde $\{l_j\}_{j=1}^n$ son los polinomios fundamentales de Lagrange asociados a $\{x_i\}_{i=1}^n$.

Además, si $f \in C^{2n}([a, b])$,

$$f(x) = H_{2n-1}(f; x) + \frac{f^{(2n)}(\theta(x))}{2n!} W^2(x), \quad \theta(x) \in [a, b], \quad (1.8)$$

donde se observa que el error en la interpolación de Hermite para todo polinomio p de \mathbb{P}_{2n-1} es cero, es decir

$$H_{2n-1}(p, x) = p(x), \forall p \in \mathbb{P}_{2n-1}.$$

Al integrar a ambos lados de la igualdad (1.7), por la linealidad de la integral:

$$\begin{aligned} \int_a^b H_{2n-1}(f, x) dx &= \int_a^b \left[\sum_{j=1}^n f(x_j) L_j^1(x) + \sum_{j=1}^n f'(x_j) L_j^2(x) \right] dx = \\ &= \sum_{j=1}^n f(x_j) \int_a^b L_j^1(x) dx + \sum_{j=1}^n f'(x_j) \int_a^b L_j^2(x) dx = \sum_{j=1}^n \lambda_{j,n} f(x_j) + \sum_{j=1}^n C_j f'(x_j), \end{aligned}$$

donde

$$\lambda_{j,n} = \int_a^b L_j^1(x) dx, \quad C_j = \int_a^b L_j^2(x) dx, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Dado que nuestro objetivo es construir una f.c., debemos imponer que $C_j = 0, j = 1, 2, \dots, n$, para que no comparezcan términos en derivadas y así, concluir

$$\int_a^b H_{2n-1}(f, x) dx = \sum_{j=1}^n \lambda_{j,n} f(x_j) = I_n(f) \quad (1.9)$$

Dado que $H_{2n-1}(p, x) = p(x), \forall p \in \mathbb{P}_{2n-1}$, se obtiene la exactitud en \mathbb{P}_{2n-1}

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{j=1}^n \lambda_{j,n} p(x_j), \quad \forall p \in \mathbb{P}_{2n-1}.$$

Observar que

$$\lambda_{j,n} = \int_a^b l_j^2(x) dx > 0,$$

dado que $l_j^2 \in \mathbb{P}_{2n-2}$, recuperando así tanto la positividad como una expresión computable de los pesos.

Obsérvese que aún no sabemos si es compatible que $C_j = 0, j = 1, \dots, n$ con que los nodos sean distintos y se encuentren en $[a, b]$. Analicemos que significa que $C_j = 0, j = 1, 2, \dots, n$.

$$0 = \int_a^b (x - x_j) l_j^2(x) dx = \alpha_j \int_a^b W(x) l_j(x) dx, \quad \alpha_j \neq 0, \quad j = 1, \dots, n,$$

donde $W(x) = \prod_{j=1}^n (x - x_j)$ es el polinomio nodal. Por lo tanto, tenemos que:

$$\int_a^b W(x) l_j(x) dx = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n,$$

dado que $\{l_1, l_2, \dots, l_n\}$ es una base de \mathbb{P}_{n-1} , concluimos que W es el n -ésimo polinomio ortogonal mónico p_n asociado a la medida de Lebesgue dx , es decir, función peso $w(x) = 1$. Si el polinomio ortogonal de grado n tiene sus ceros simples en (a, b) , queda resuelta la compatibilidad. Propiedad cierta tal y como aparece recogida en el teorema A.2 del Apéndice, anexo en el cual están recogidos algunas propiedades de los polinomios ortogonales de interés para las fórmulas de cuadratura.

Esta fórmula de cuadratura recibe el nombre de “fórmula de la cuadratura de Gauss-Legendre”, la cual dispone de una expresión del error en términos de la regularidad de la función, ya que si $f \in C^{(2n)}([a, b])$, integrando (1.8), obtenemos la f.c. con su correspondiente expresión del error:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{j=1}^n \lambda_j f(x_j) + E_n(f)$$

donde

$$E_n(f) = \int_a^b \frac{f^{(2n)}(\xi(x))}{2n!} p_n^2(x) dx = \frac{f^{(2n)}(\eta)}{2n!} \int_a^b p_n^2(x) dx, \quad \eta \in [a, b],$$

donde hemos aplicado el teorema del valor medio para integrales. Es importante destacar que la expresión del error depende del comportamiento integral del cuadrado del n -ésimo polinomio ortogonal p_n . También es posible obtener una expresión del error para funciones continuas, aplicando el teorema 1.10, se obtiene:

Corolario 1.12. Sean $f \in C([a, b])$ y $I_n(f)$ la fórmula de cuadratura de Gauss-Legendre

$$|E_n(f)| \leq 2(b-a)\rho_{2n-1}(f), \quad (1.10)$$

donde $\rho_{2n-1}(f) = \min_{p \in \mathbb{P}_{2n-1}} \|f - p\|_\infty$.

Obsérvese que, por el Teorema de Weierstrass, la sucesión $\{I_n(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$ de f.c. de Gauss-Legendre converge para toda función continua, ya que $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n(f) = 0, \forall f \in C([a, b])$.

1.3.2. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Radau

Una vez obtenida la fórmula de cuadratura exacta en \mathbb{P}_{2n-1} , nos podemos plantear si somos capaces de construir un f.c. con grado de exactitud inferior. La construcción de fórmulas de cuadratura positivas y exactas en subespacios de dimensiones inferiores a $2n - 1$ ha sido históricamente relacionada con el problema de fijar nodos de antemano, influenciado por varias aplicaciones (resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias, ecuaciones en derivadas parciales, etc.), ver [5]. Sabemos, por el corolario 1.9, que, de existir, pueden dejar de ser estables.

En un primer paso, nos planteamos obtener f.c. exactas en \mathbb{P}_{2n-2} . Disponemos de la libertad de fijar un nodo α , siempre y cuando haya armonía con los nodos que predetermina el problema matemático. En este caso, podemos considerar el polinomio de Hermite $H_{2n-2}(f; \cdot)$ que interpola a f en los nodos libres con multiplicidad 2 salvo en α que lo hace con multiplicidad 1, donde α puede ser $\alpha = a$, $\alpha = b$ o $\alpha \in (a, b)$. Consideramos el caso $\alpha = a$.

$$\begin{array}{cccccc} \mathbf{a} & \mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_3 & \cdots & \mathbf{x}_n & \\ f(a) & f(x_2) & f(x_3) & \cdots & f(x_n) & \\ & f'(x_2) & f'(x_3) & \cdots & f'(x_n) & \end{array}$$

para cualquier función derivable definida en $[a, b]$. El correspondiente polinomio de Hermite admite la expresión, ver [8]:

$$H_{2n-2}(f; x) = f(a)L_a^1(x) + \sum_{j=2}^n f(x_j)L_j^1(x) + \sum_{j=2}^n f'(x_j)L_j^2(x).$$

Con el fin de obtener expresiones “limpias” para los $L_a^1, L_k^i, k = 2, \dots, n; i = 1, 2$, aprovechamos los polinomios fundamentales de Lagrange $\{l_a, l_2, l_3, \dots, l_n\}$ asociados a a, x_1, x_2, \dots, x_n .

Hay que determinar los siguientes polinomios que pertenecen a \mathbb{P}_{2n-2} :

$$\{L_a^1, L_2^1, L_3^1, \dots, L_n^1, L_2^2, L_3^2, \dots, L_n^2\}$$

tal que

- $L_a^1(a) = 1$
 $L_a^1(x_j) = L_a^{1'}(x_j) = 0, \quad j = 2, 3, \dots, n.$
- $k = 2, 3, \dots, n$:
 $L_k^1(a) = L_k^2(a) = 0,$
 - $j = 2, 3, \dots, n,$
 $L_k^1(x_j) = \delta_{kj}, \quad L_k^{1'}(x_j) = 0,$
 $L_k^2(x_j) = 0, \quad L_k^{2'}(x_j) = \delta_{kj}.$

Comenzamos obteniendo la expresión de $L_a^1 \in \mathbb{P}_{2n-2}$. Observamos que tiene por ceros dobles a $x_k, k = 2, \dots, n$ y $L_a^1(a) = 1$. Por un lado:

$$L_a^1(x) = \beta l_a^2(x),$$

y por otro,

$$L_a^1(a) = 1 \Leftrightarrow \beta = 1.$$

Por lo tanto, se tiene:

$$L_a^1(x) = l_a^2(x).$$

Ahora debemos determinar los L_k^1 . Sabemos que tiene por cero simple a “ a ” y a x_2, x_3, \dots, x_n por ceros dobles, menos para x_k , para el que se verifica $L_k^1(x_k) = 1, L_k^1(x_k) = 0$, se sigue que:

$$L_k^1(x) = [\rho + \beta(x - x_k)] \frac{l_k^2(x)}{x - a},$$

$$L_k^1(x) = \beta \frac{l_k^2(x)}{x - a} + (\rho + \beta(x - x_k)) \left[\frac{2l_k(x)l_k'(x)}{x - a} - \frac{l_k^2(x)}{(x - a)^2} \right].$$

Imponiendo las condiciones $L_k^1(x_k) = 1, L_k^1(x_k) = 0$. Por un lado,

$$L_k^1(x_k) = 1 \Leftrightarrow 1 = \frac{\rho l_k^2(x_k)}{x_k - a}; \quad \rho = x_k - a,$$

y por otro

$$L_k^1(x_k) = 0 \Leftrightarrow \beta \frac{l_k^2(x_k)}{x_k - a} + \rho \left[\frac{2l_k(x_k)l_k'(x_k)}{x_k - a} - \frac{l_k^2(x_k)}{(x_k - a)^2} \right] = 0.$$

Como $\rho = x_k - a$,

$$\frac{\beta}{x_k - a} + 2l_k'(x_k) - \frac{1}{x_k - a} = 0 \Rightarrow \frac{\beta}{x_k - a} = \frac{1}{x_k - a} - 2l_k'(x_k),$$

se sigue que

$$\beta = 1 - 2l_k'(x_k)(x_k - a).$$

Por tanto:

$$L_k^1(x) = \{(x_k - a) + [1 - 2l_k'(x_k)(x_k - a)](x - x_k)\} \frac{l_k^2(x)}{x - a},$$

equivalentemente,

$$L_k^1(x) = [(x - a) - 2l_k'(x_k)(x_k - a)(x - x_k)] \frac{l_k^2(x)}{x - a}.$$

Consideramos ahora los L_k^2 , que tiene por ceros simples a “ a ” y a x_k , y por ceros dobles al resto de los x_j . Luego:

$$L_k^2(x) = \rho l_k^2(x) \frac{x - x_k}{x - a},$$

derivando

$$L_k^2(x) = \rho \left(2l_k(x)l_k'(x) \frac{x - x_k}{x - a} + \frac{l_k^2(x)}{x - a} - \frac{l_k^2(x)(x - x_k)}{(x - a)^2} \right).$$

Imponiendo que $L_k^2(x_k) = 1$, se verifica:

$$L_k^{2'}(x_k) = 1 \Leftrightarrow \rho = x_k - a.$$

Por lo tanto:

$$L_k^2(x) = l_k^2(x - x_k) \left(\frac{x_k - a}{x - a} \right).$$

Determinados los correspondientes polinomios fundamentales de Lagrange de primera y segunda especie, sabemos que si $f \in C^{2n-1}([a, b])$, ver [8],

$$f(x) = H_{2n-2}(f; x) + \frac{f^{(2n-1)}(\xi(x))}{(2n-1)!} W_{n-1}^2(x)(x-a), \quad \xi(x) \in [a, b],$$

siendo $W_{n-1}(x) = (x - x_2) \cdots (x - x_n)$. Luego, al integrar dicha igualdad:

$$\int_a^b f(x) dx = \lambda_{a,n} f(a) + \sum_{j=2}^n \lambda_{j,n}^a f(x_j) + \sum_{j=2}^n D_j f'(x_j) + E_n(f),$$

$$E_n(f) = \int_a^b \frac{f^{(2n-1)}(\xi(x))}{(2n-1)!} W_{n-1}^2(x)(x-a) dx.$$

Nuevamente, nuestro objetivo es construir una f.c., por el mismo motivo que en Gauss-Legendre, debemos imponer $D_j = 0$, $j = 2, \dots, n$. Concretamente, $k = 2, \dots, n$

$$0 = D_k = \int_a^b l_k^2(x - x_k) \left(\frac{x_k - a}{x - a} \right) dx = \beta_k \int_a^b W_{n-1}(x) \hat{l}_k(x) (x-a) dx, \quad \beta_k \neq 0,$$

donde $\{\hat{l}_2, \hat{l}_3, \dots, \hat{l}_n\}$ son los polinomios fundamentales de Lagrange asociados a los nodos x_2, x_3, \dots, x_n , y por tanto, base de \mathbb{P}_{n-2} . Concluimos que W_{n-1} es el $n-1$ -ésimo polinomio ortogonal mónico \hat{p}_{n-1} asociado a la medida $(x-a)dx$. Por el mismo argumento utilizado en la subsección anterior, al tratarse de un polinomio ortogonal asociado a una medida positiva, está garantizado que sus ceros se encuentran en (a, b) , por lo tanto, distintos a "a".

Así, queda garantizada la existencia de una f.c. exacta en \mathbb{P}_{2n-2} con un nodo prefijado en "a". Esta fórmula de cuadratura obtenida es conocida con el nombre de f.c. de Gauss-Radau asociada a "a" o Gauss-Radau izquierda, cuyos pesos pueden ser computados mediante:

$$\lambda_{a,n} = I(l_a^2) > 0, \quad \lambda_{j,n}^a = I(l_j^2) > 0$$

ya que $l_a^2, l_j^2 \in \mathbb{P}_{2n-2}$, y la f.c es exacta en \mathbb{P}_{2n-2} . Nuevamente, se obtiene una expresión del error similar a la obtenida para Gauss-Legendre:

$$E_n(f) = \frac{f^{(2n-1)}(\theta)}{(2n-1)!} \int_a^b \hat{p}_{n-1}^2(x)(x-a) dx, \quad \theta \in [a, b],$$

donde se observa que depende del comportamiento integral del cuadrado del $n - 1$ -ésimo polinomio ortogonal \hat{p}_{n-1} con respecto a la función peso $(x - a)$.

Análogamente al caso de Gauss-Legendre, si aplicamos el teorema 1.10, obtenemos:

Corolario 1.13. Sean $f \in C([a, b])$ y $I_n(f)$ la fórmula de cuadratura de Gauss-Radau asociado a “ a ”

$$|E_n(f)| \leq 2(b - a)\rho_{2n-2}(f), \quad (1.11)$$

donde $\rho_{2n-2}(f) = \min_{p \in \mathbb{P}_{2n-2}} \|f - p\|_\infty$.

De esta forma, se obtienen las mismas conclusiones que para la f.c. de Gauss-Legendre. Concretamente, la convergencia de $\{I_n(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$ a $I(f)$ para las funciones continuas en $[a, b]$.

Si fijamos $\alpha = b$, se procede de manera análoga, resultando la medida modificada $(b - x)dx$. Surge una pregunta, ¿qué sucede si prefijamos un nodo en el interior del intervalo (a, b) ? Algebraicamente, se procede igual, pero sin embargo, la medida modificada $(x - \alpha)dx$ no es positiva. Por lo tanto, no podemos garantizar que el polinomio $W_{n-1}(x)$.

$$\int_a^b W_{n-1}(x)p(x)(x - \alpha) dx = 0, \forall p \in \mathbb{P}_{n-2},$$

tenga todos sus ceros simples, y además, distintos a α , es decir, a priori, no podemos garantizar

$$a \leq \mathbf{x}_1 < \mathbf{x}_2 < \dots < \mathbf{x}_{i-1} < \alpha < \mathbf{x}_{i+1} < \dots < \mathbf{x}_{n-1} \leq b.$$

Sin embargo, existen elecciones de α que garantizan n nodos distintos, como se puede ver en [9].

1.3.3. Fórmulas de cuadratura de Gauss-Lobatto

Si tenemos la libertad de fijar dos nodos, α y β , nos podemos plantear si podemos construir f.c. exactas en \mathbb{P}_{2n-3} . En esta situación, somos conscientes que, por la proposición 1.9, solo garantizaríamos que $n - 1$ de sus pesos sean positivos, sin saber cuáles son. En este caso, consideramos el polinomio de Hermite $H_{2n-3}(f; \cdot)$ que interpola a f con multiplicidad 2, en los nodos pautados por el grado de exactitud, salvo en α y β que lo hacen con multiplicidad 1, donde, por la experiencia de la subsección anterior, consideramos $\alpha = a$ y $\beta = b$, con el fin de que la medida modificada sea positiva. También pueden resultar de interés que α sea uno de los puntos extremos del intervalo y β se encuentre en el interior, o ambos fijados en el interior, situación fuera de los objetivos de esta memoria, ver [1] para su análisis.

Planteamos el esquema de interpolación de Hermite

$$\begin{array}{cccccc} \mathbf{a} & \mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_3 & \cdots & \mathbf{x}_{n-1} & \mathbf{b} \\ f(a) & f(x_2) & f(x_3) & \cdots & f(x_{n-1}) & f(b) \\ & f'(x_2) & f'(x_3) & \cdots & f'(x_{n-1}) & \end{array}$$

si la función que pretendemos integrar es derivable en $[a, b]$. Ahora el polinomio de Hermite viene dado por, ver [8],

$$H_{2n-3}(f; x) = f(a)L_a^1(x) + \sum_{j=2}^{n-1} f(x_j)L_j^1(x) + f(b)L_b^1(x) + \sum_{j=2}^{n-1} f'(x_j)L_j^2(x).$$

Volvemos a considerar $\{l_a, l_2, l_3, \dots, l_b\}$ los polinomios fundamentales de Lagrange asociados a los nodos. Al igual que en el caso anterior, hay que determinar los correspondientes polinomios fundamentales de Lagrange de primera y segunda especie que pertenecen a \mathbb{P}_{2n-3} :

$$\{L_a^1, L_2^1, L_3^1, \dots, L_b^1, L_2^2, L_3^2, \dots, L_{n-1}^2\}$$

tal que

$$\begin{aligned} L_a^1(a) &= 1, & L_a^1(b) &= 0, \\ L_b^1(a) &= 0, & L_b^1(b) &= 1, \end{aligned}$$

- $j = 2, 3, \dots, n-1$:
 $L_a^1(x_j) = L_a^{1'}(x_j) = 0,$
 $L_b^1(x_j) = L_b^{1'}(x_j) = 0,$
- $k = 2, 3, \dots, n-1$:
 $L_k^1(a) = L_k^1(b) = 0, \quad L_k^2(a) = L_k^2(b) = 0$
 - $j = 2, 3, \dots, n-1$:
 $L_k^1(x_j) = \delta_{kj}, \quad L_k^{1'}(x_j) = 0,$
 $L_k^2(x_j) = 0, \quad L_k^{2'}(x_j) = \delta_{kj}.$

Por un proceso análogo al anterior se obtienen las siguientes expresiones:

$$L_a^1(x) = (b-a) \frac{l_a^2(x)}{b-x}, \quad L_b^1(x) = (b-a) \frac{l_b^2(x)}{x-a},$$

$$L_k^2(x) = l_k^2(x)(x-x_k) \frac{(x_k-a)(b-x_k)}{(x-a)(b-x)},$$

$$L_k^1(x) = \left[1 + \left[\frac{a+b-2x_k}{(x_k-a)(b-x_k)} - 2l_k' \right] (x-x_k) \right] \frac{l_k^2(x)(x_k-a)(b-x_k)}{(x-a)(b-x)}.$$

Es más, si $f \in C^{2n-2}([a, b])$, ver [8],

$$f(x) = H_{2n-3}(f; x) + \frac{f^{(2n-2)}(\xi(x))}{(2n-2)!} W_{n-2}^2(x)(x-a)(x-b), \quad \xi(x) \in [a, b],$$

siendo $W_{n-2}(x) = (x - x_2) \cdots (x - x_{n-1})$. Integrando, se sigue:

$$\int_a^b f(x) dx = \lambda_{a,n} f(a) + \sum_{j=2}^{n-1} \lambda_{j,n}^{a,b} f(x_j) + \lambda_{b,n} f(b) + \sum_{j=2}^{n-1} E_j f'(x_j) + E_n(f).$$

Con el fin de obtener una f.c., debemos imponer nuevamente que $E_k = 0$, $k = 2, \dots, n-1$, concretamente,

$$0 = \int_a^b l_k^2(x - x_k) \left(\frac{(x_k - a)(b - x_k)}{(x - a)(b - x)} \right) dx = \gamma_k \int_a^b W_{n-2}(x) \tilde{l}_k(x) (x - a)(b - x) dx,$$

$\gamma_k \neq 0$, donde $\{\tilde{l}_2, \tilde{l}_3, \dots, \tilde{l}_{n-1}\}$ es la base de Lagange asociados a los nodos x_2, x_3, \dots, x_{n-1} , y por tanto, base de \mathbb{P}_{n-3} .

De manera análoga a los casos anteriores, concluimos que W_{n-2} es el $n-2$ -ésimo polinomio ortogonal mónico \tilde{p}_{n-2} asociado a la medida positiva $(x - a)(b - x)dx$, garantizando así la existencia de una f.c. exacta en \mathbb{P}_{2n-3} con nodos prefijados en a y b , que recibe el nombre de “fórmula de cuadratura de Gauss-Lobatto”, cuyos pesos resultan ser positivos y se pueden computar mediante:

$$\lambda_{a,n} = \int_a^b (b - a) \frac{l_a^2(x)}{b - x} dx > 0, \quad \lambda_{b,n} = \int_a^b (b - a) \frac{l_b^2(x)}{x - a} dx > 0,$$

$$\lambda_{j,n}^{a,b} = \int_a^b l_k^2 \frac{(x_k - a)(b - x_k)}{(x - a)(b - x)} dx > 0,$$

dado que $l_k^2 \frac{(x_k - a)(b - x_k)}{(x - a)(b - x)} \in \mathbb{P}_{2n-4}$, proporcionando su estabilidad.

Además, se obtiene una expresión del error similar a las anteriores para funciones lo suficientemente regulares,

$$E_n(f) = -\frac{f^{(2n-2)}(\theta)}{(2n-2)!} \int_a^b W_{n-2}^2(x) (x - a)(b - x) dx,$$

y para funciones continuas, aplicando el teorema 1.10, nuevamente se obtiene:

Corolario 1.14. Sea $f \in C([a, b])$ y $I_n(f)$ la fórmula de cuadratura de Gauss-Lobatto

$$|E_n(f)| \leq 2(b - a) \rho_{2n-3}(f), \quad (1.12)$$

donde $\rho_{2n-3}(f) = \min_{p \in \mathbb{P}_{2n-3}} \|f - p\|_\infty$.

Similarmente a los dos casos anteriores, Gauss-Legendre y Gauss-Radau, se obtienen las mismas conclusiones, convergencia de $\{I_n(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$ a $I(f)$ para las funciones continuas en $[a, b]$.

Observamos que se ha abordado el problema tanto desde el punto de vista matemático como numérico. Sin embargo, queda una computación más eficiente, que será desarrollada en el siguiente capítulo. Del estudio realizado podemos concluir que la bondad de las fórmulas de cuadratura depende “muy y mucho” de lo bien que se pueda aproximar el integrando mediante polinomios.

Sin embargo, somos conscientes de que podemos encontrarnos con situaciones adversas, como muestra el siguiente ejemplo. Consideramos

$$\int_{-1}^1 \frac{\cos \frac{\pi}{2}x}{\sqrt{1-x}} dx, \quad n \in \mathbb{N}.$$

En este caso, se observa que, el integrando presenta problemas aparentes en $x = 1$ pero es integrable. Los polinomios detectan este problema y por lo tanto, les cuesta aproximar a dicha función. Por este motivo, no es recomendable lo analizado hasta ahora.

Por consiguiente, debemos reformular el problema matemático, siendo una estrategia factorizar el integrando de la siguiente forma:

$$Q(f) = \int_a^b f(x)w(x) dx,$$

donde w aglutine todas las singularidades del integrando pero con la restricción de que $w(x) > 0$ en casi todo punto en $[a, b]$ e integrable en el sentido Lebesgue, siendo f Riemman-Stieltjes integrable con respecto a $w(x)dx$, preferiblemente continua, siendo sus momentos, es decir, las integrales

$$c_k = \int_a^b x^k w(x) dx < \infty, \quad k \in \mathbb{N}.$$

de fácil computación.

Nota: Con el fin de simplificar, supondremos que $c_0 = 1$, es decir, que la medida $d\mu(x) = w(x)dx$ es de probabilidad.

Es inmediato comprobar que toda la teoría desarrollada hasta ahora es trasladable tras pequeños ajustes a esta nueva situación. Muestra de ello son los siguientes resultados.

Corolario 1.15. ■ *La fórmula de cuadratura de Gauss-Christoffel $Q_n(f) = \sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k)$ es exacta en \mathbb{P}_{2n-1} si y solo si es interpolatoria y además $\int_a^b W_n(t)p(t)w(t) dt = 0, \forall p \in \mathbb{P}_{n-1}$.*

■ *La fórmula de cuadratura de Gauss-Radau $Q_n^R(f) = \lambda_a^R f(a) + \sum_{k=2}^n \lambda_k^R f(x_k)$ es exacta en \mathbb{P}_{2n-2} si y solo si es interpolatoria y además $\int_a^b W_{n-1}(t)p(t)(t-a)w(t) dt = 0, \forall p \in \mathbb{P}_{n-2}$.*

- La fórmula de cuadratura de Gauss-Lobato $Q_n^L(f) = \lambda_a^L f(a) + \sum_{k=2}^{n-1} \lambda_k^L f(x_k) + \lambda_b^L f(b)$ es exacta en \mathbb{P}_{2n-3} si y solo si es interpolatoria y además $\int_a^b W_{n-2}(t)p(t)(b-t)(t-a)w(t) dt = 0, \forall p \in \mathbb{P}_{n-3}$.

Siendo W_d para $d = n, n-1, n-2$, respectivamente, el polinomio que se anula en los nodos fijados por el problema numérico.

En el siguiente resultado, queda recogida la “hoja de ruta” para construir el resto de de las f.c. de grados de exactitud intermedios.

Teorema 1.16 (Jacobi). La fórmula de cuadratura

$$Q_n(f) = \sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k),$$

es exacta en \mathbb{P}_{n-1+k} , con $1 \leq k \leq n$ si y solo si es interpolatoria y además

$$\langle W, p \rangle = \int_a^b W(t)p(t)w(t) dt = 0, \forall p \in \mathbb{P}_{k-1}, \quad (1.13)$$

donde $W(t) = \prod_{k=1}^n (t - x_k)$ es el polinomio nodal.

Demostración. Sea $Q \in \mathbb{P}_{n-1+k}$.

$$Q(t) - L_{n-1}(Q, t) = W(t)p(t), p \in \mathbb{P}_{k-1}.$$

Integrando,

$$\begin{aligned} \int_a^b Q(x)w(t) dt &= \int_a^b L_{n-1}(Q, t)w(t) dt = \sum_{j=1}^n \lambda_j Q(x_j), \quad Q \in \mathbb{P}_{n-1+k} \\ &\quad \Downarrow \\ \int_a^b W(t)p(t)w(t) dt &= 0, \quad \forall p \in \mathbb{P}_{k-1} \end{aligned}$$

□

Definición 1.17. Un polinomio mónico de grado n que verifica la propiedad (1.13) recibe el nombre de cuasiortogonal de orden $n - k$, y admite la siguiente expresión:

$$W(x) = p_n(x) + \alpha_{n-1}p_{n-1} + \cdots + \alpha_k p_k(x), \quad \alpha_i \in \mathbb{R}, \quad \alpha_k \neq 0. \quad (1.14)$$

siendo $\{p_i\}_{i=0}^n$ los polinomios ortogonales mónicos asociados a w .

Obsérvese que a todo polinomio cuasiortogonal de orden $n - k$ le falta, con respecto al enésimo polinomio ortogonal, $n - k$ condiciones de ortogonalidad, es decir, que solo tiene las k primeras. Con una demostración análoga desarrollada para el caso de los polinomios ortogonales, se tiene que

Corolario 1.18. *Todo polinomio de grado n cuasiortogonal de orden $n - k$ tiene k cambios de signos en (a, b) .*

Es importante destacar que las expresiones del error se mantienen intactas con solo introducir w en el integrando del término integral, obviamente sucede lo mismo en cuanto a las estimaciones del error para funciones continuas, se tiene el siguiente teorema.

Teorema 1.19. *Sea la fórmula de cuadratura $Q_n(f)$ asociada a $Q(f)$ con grado de exactitud $m \geq n - 1$. Si el integrando f es continuo en $[a, b]$, se tiene que*

$$|E_n(f)| \leq \left[\int_a^b w(x) dx + \sum_{k=1}^n |\lambda_{k,n}| \right] \rho_{m+k}(f).$$

Cálculo eficiente de las fórmulas de cuadratura gaussianas

En el capítulo anterior, se han caracterizado las f.c. con los mayores grados de precisión, llamadas gaussianas, constatando su estabilidad y, al mismo tiempo, se obtuvo la expresión del error así como la de sus pesos, que nos permite computarlos. Sin embargo, debemos calcular previamente los nodos, es decir, ceros de polinomios ortogonales. Polinomios que pueden ser calculados explícitamente mediante la relación de recurrencia a tres términos que satisfacen (teorema A.3), para luego obtener sus ceros por medio de algún método eficiente para la aproximación de los ceros de un polinomio, como puede ser, por ejemplo, Newton-Raphson. Estrategia clara, pero no exenta de tener inmersos varios procesos numéricos que pueden entorpecer la obtención de la precisión deseada. Surge por tanto una pregunta, ¿existe otro procedimiento más eficiente que nos permita calcular los nodos y pesos?

La respuesta es afirmativa. Encapsada en la relación de recurrencia, existe una propiedad muy útil sobre los ceros de p_n con la enorme ventaja añadida que también nos permite obtener los correspondientes pesos mediante el álgebra lineal numérica, ya que se reduce a un problema de cálculo de autovalores y autovectores de una matriz (matriz de Jacobi), cuyas entradas solo dependen de los coeficientes a_k, b_k de la relación de recurrencia a tres términos, siendo este cálculo un problema numérico profundamente estudiado y con un continuo enriquecimiento.

2.1. Fórmula de cuadratura de Gauss-Christoffel

Como se ha indicado, vamos a obtener los nodos y pesos de la fórmula de cuadratura de Gauss-Christoffel

$$\int_a^b p(x)w(x) dx = \sum_{j=1}^n \lambda_{j,n} p(x_j) + \frac{f^{(2n)}(\eta)}{2n!} \int_a^b p_n^2(x)w(x) dx, \quad \eta \in [a, b],$$

mediante el cálculo de autovalores y autovectores. Partiendo de la relación de recurrencia a tres términos de los polinomios ortonormales, ver teorema A.3, obtenemos:

$$\begin{cases} xp_0(x) &= b_0p_0(x) + a_1p_1(x) \\ xp_1(x) &= a_1p_0(x) + b_1p_1(x) + a_2p_2(x), \\ \vdots & \ddots \quad \ddots \quad \ddots \quad \ddots \\ xp_{n-2}(x) &= a_{n-2}p_{n-3}(x) + b_{n-2}p_{n-2}(x) + a_{n-1}p_{n-1}(x), \\ xp_{n-1}(x) &= a_{n-1}p_{n-2}(x) + b_{n-1}p_{n-1}(x) + a_np_n(x). \end{cases}$$

Matricialmente:

$$x \begin{pmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ p_2(x) \\ \vdots \\ p_{n-1}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 & a_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ a_1 & b_1 & a_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & a_{n-2} & b_{n-2} & a_{n-1} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{n-1} & b_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ p_2(x) \\ \vdots \\ p_{n-1}(x) \end{pmatrix} + a_np_n(x) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Equivalentemente:

$$x \vec{P}_{n-1}(x) = J_n \vec{P}_{n-1}(x) + a_np_n(x) \vec{e}_n,$$

donde \vec{P}_{n-1} es el vector cuyas componentes son los primeros n polinomios ortonormales y J_n recibe el nombre de matriz de Jacobi. Sean $\{x_i\}_{i=1}^n$ los n ceros de p_n , al sustituir x_i en (2.1), se tiene:

$$x_i \vec{P}_{n-1}(x_i) = J_n \vec{P}_{n-1}(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

$\vec{P}_{n-1}(x_i) = (1, \dots, p_{n-1}(x_i))^T$. Es decir, x_i es un autovalor de J_n y $\vec{P}_{n-1}(x_i)$ es el correspondiente autovector. De esta forma, queda demostrado que el cálculo de los nodos se reduce al cálculo de los autovalores la matriz de Jacobi, problema matemático profundamente estudiado desde el punto de vista numérico.

Es más, si escogemos el autovector normalizado v_i obtenemos $\vec{P}_{n-1}(x_i) = \frac{1}{\sqrt{\sum_{k=0}^{n-1} p_k^2(x_i)}} (1, p_1(x_i), \dots, p_{n-1}(x_i))^T$, concluimos que la primera componente del autovector normalizado es

$$v_{i1} = \frac{1}{\sqrt{\sum_{k=0}^{n-1} p_k^2(x_i)}},$$

que por el teorema A.7, su cuadrado coincide con el peso $\lambda_{i,n}$, ya que

$$\lambda_{i,n} = \frac{1}{\sum_{k=1}^{n-1} p_k^2(x_i)}.$$

Llegado a este punto, podemos enunciar el siguiente resultado, ver [4]:

Teorema 2.1 (Golub-Welsh). *Sea*

$$J_n = \begin{pmatrix} b_0 & a_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ a_1 & b_1 & a_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & a_{n-2} & b_{n-2} & a_{n-1} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{n-1} & b_{n-1} \end{pmatrix}$$

la matriz de Jacobi (de orden n , tridiagonal y simétrica) construida a partir de los coeficientes a_k y b_k de la relación de recurrencia:

$$xp_n(x) = a_n p_{n-1}(x) + b_n p_n(x) + a_{n+1} p_{n+1}(x) \quad n \geq 1, \quad p_{-1} = 0, \quad p_0(x) = 1.$$

Entonces, los nodos de la fórmula de cuadratura de Gauss-Christoffel son los valores propios de J_n , y los pesos $\lambda_{i,n}$ vienen dados por

$$\lambda_{i,n} = v_{i1}^2, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

donde v_{i1} es la primera componente del vector propio v_i normalizado asociado al valor propio x_i .

2.2. Fórmula de cuadratura de Gauss-Radau

Como sabemos, la f.c de Gauss-Radau:

$$\int f(x) d\mu(x) = \lambda_{a,n}^R f(a) + \sum_{j=1}^{n-1} \lambda_{j,n}^R f(x_j) + \frac{f^{(2n-1)}(\theta)}{(2n-1)!} \int_a^b \hat{p}_{n-1}^2(x)(x-a)w(x) dx,$$

también está caracterizada por la ortogonalidad, por lo que se pueden recuperar sus nodos y pesos por un procedimiento similar al anterior. Para ello, debemos realizar una pequeña modificación en la matriz de Jacobi. Como vimos en la definición 1.17, el polinomio nodal de la f.c. de Gauss-Radau se puede expresar mediante:

$$\tilde{p}_n(x) = W_n(x) = p_n(x) - \frac{p_n(a)}{p_{n-1}(a)} p_{n-1}(x),$$

por tanto:

$$p_n(x) = \tilde{p}_n(x) + \frac{p_n(a)}{p_{n-1}(a)} p_{n-1}(x).$$

Con el fin de eliminar a p_n de la relación de recurrencia, sustituimos p_n por su nueva expresión:

$$xp_{n-1}(x) = a_{n-1} p_{n-2}(x) + b_{n-1} p_{n-1}(x) + a_n \left(\tilde{p}_n(x) + \frac{p_n(a)}{p_{n-1}(a)} p_{n-1}(x) \right),$$

reagrupando,

$$xp_{n-1}(x) = a_{n-1}p_{n-2}(x) + \left(b_{n-1} + a_n \frac{p_n(a)}{p_{n-1}(a)} \right) p_{n-1}(x) + a_n \tilde{p}_n(x)$$

Ahora, debemos hacer desaparecer $p_n(a)$, sustituimos $x = a$ en la relación de recurrencia

$$ap_{n-1}(a) = a_{n-1}p_{n-2}(a) + b_{n-1}p_{n-1}(a) + a_np_n(a),$$

dado que $p_{n-1}(a) \neq 0$, se sigue que

$$b_{n-1} + a_n \frac{p_n(a)}{p_{n-1}(a)} = a - a_{n-1} \frac{p_{n-2}(a)}{p_{n-1}(a)}.$$

Concluimos que la última ecuación de nuestro algoritmo es:

$$xp_{n-1}(x) = a_{n-1}p_{n-2}(x) + \left(a - a_{n-1} \frac{p_{n-2}(a)}{p_{n-1}(a)} \right) p_{n-1}(x) + a_n \tilde{p}_n(x),$$

equivalentemente,

$$xp_{n-1}(x) = a_{n-1}p_{n-2}(x) + b_n^R p_{n-1}(x) + a_n \tilde{p}_n(x).$$

Dado que las primeras $n - 1$ ecuaciones permanecen intactas, podemos concluir que \vec{P}_{n-1} es el mismo, y solo cambia el último elemento de la diagonal principal de la matriz de Jacobi. De esta forma, se obtiene matricialmente:

$$J_n^R \vec{P}_{n-1}(x) = x \vec{P}_{n-1}(x) + a_n \tilde{p}_n(x) e_n$$

$$J_n^R = \left[\begin{array}{c|c} J_{n-1} & a_{n-1} e_{n-1} \\ \hline a_n e_{n-1}^T & b_n^R \end{array} \right].$$

Esta matriz se denomina “matriz de Jacobi-Radau”, la cual es una matriz de orden n , donde J_{n-1} es la matriz de Jacobi de orden $n - 1$ asociada a la $J_{n-1}(f)$ de Gauss-Christoffel con $n - 1$ nodos, $e_{n-1}^T = [0, 0, \dots, 1]$ y:

$$b_n^R = a - a_{n-1} \frac{p_{n-2}(a)}{p_{n-1}(a)}.$$

Estamos en condiciones de enunciar un teorema análogo al anterior, ver [4].

Teorema 2.2 (Golub). *Los nodos de la f.c. de Gauss-Radau son los autovalores de la matriz J_n^R , y sus pesos $\{\lambda_{i,n}^R\}_{i=1}^n$ son los cuadrados de las primeras componentes de los correspondientes vectores propios normalizados.*

Si en lugar de fijar como nodo a “ a ”, fijamos b o $\alpha \in (a, b)$ convenientemente escogido, el teorema se sigue cumpliendo con los ajustes oportunos.

2.3. Fórmula de cuadratura de Gauss-Lobatto

Para el caso de las f.c de Gauss-Lobatto:

$$\int f(x) d\mu(x) = \lambda_{a,n}^L f(a) + \sum_{j=2}^{n-2} \lambda_{j,n}^L f(x_j) + \lambda_{b,n}^L f(b) + E_n(f),$$

$$E_n(f) = -\frac{f^{(2n-2)}(\theta)}{(2n-2)!} \int_a^b W_{n-2}^2(x)(x-a)(b-x)w(x) dx, \quad \theta \in [a, b].$$

Si reflexionamos sobre el caso anterior, debemos adaptar nuevamente la relación de recurrencia, pero esta vez debemos modificar las últimas dos entradas de la matriz J_n . Si denotamos al polinomio nodal por \hat{p}_n , sabemos que, por ser cuasiortogonal de orden 2, admite la expresión:

$$\hat{p}_n(x) = p_n(x) + \mu_n p_{n-1}(x) + \xi_n p_{n-2}(x),$$

para ciertos $\mu_n, \xi_n \in \mathbb{R}$. Como a y b son nodos, es decir, $\hat{p}_n(a) = \hat{p}_n(b) = 0$, obtenemos un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas, μ_n y ξ_n .

$$\begin{cases} p_n(a) + \mu_n p_{n-1}(a) + \xi_n p_{n-2}(a) = 0 \\ p_n(b) + \mu_n p_{n-1}(b) + \xi_n p_{n-2}(b) = 0, \end{cases}$$

equivalentemente:

$$\begin{cases} \mu_n p_{n-1}(a) + \xi_n p_{n-2}(a) = -p_n(a) \\ \mu_n p_{n-1}(b) + \xi_n p_{n-2}(b) = -p_n(b). \end{cases} \quad (2.2)$$

Con el fin de eliminar $p_n(a)$ y $p_n(b)$ de nuestras ecuaciones, obtenemos de la relación de recurrencia que

$$\begin{aligned} p_n(a) &= ap_{n-1}(a) - b_{n-1}p_{n-1}(a) - a_{n-1}p_{n-2}(a), \\ p_n(b) &= bp_{n-1}(b) - b_{n-1}p_{n-1}(b) - a_{n-1}p_{n-2}(b). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Luego, de (2.2) y (2.3), se sigue que:

$$\begin{cases} (b_{n-1} - \mu_n) p_{n-1}(a) + (a_{n-1} - \xi_n) p_{n-2}(a) = ap_{n-1}(a), \\ (b_{n-1} - \mu_n) p_{n-1}(b) + (a_{n-1} - \xi_n) p_{n-2}(b) = ap_{n-1}(b), \end{cases}$$

donde, si denotamos por $\tilde{b}_{n-1} = b_{n-1} - \mu_n$ y $\tilde{a}_{n-1} = a_{n-1} - \xi_n$, se obtiene el siguiente sistema

$$\begin{bmatrix} p_{n-1}(a) & p_{n-2}(a) \\ p_{n-1}(b) & p_{n-2}(b) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{b}_{n-1} \\ \tilde{a}_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ap_{n-1}(a) \\ bp_{n-1}(b) \end{bmatrix}, \quad (2.4)$$

cuyo determinante de la matriz de coeficientes

$$\begin{vmatrix} p_{n-1}(a) & p_{n-2}(a) \\ p_{n-1}(b) & p_{n-2}(b) \end{vmatrix}$$

es no nulo, ya que $p_{n-1}(a)p_{n-2}(b) - p_{n-2}(a)p_{n-1}(b) = p_{n-2}(a)p_{n-2}(b) \left(\frac{p_{n-1}(a)}{p_{n-2}(a)} - \frac{p_{n-1}(b)}{p_{n-2}(b)} \right)$.

Como $p_{n-2}(a)p_{n-2}(b) \neq 0$ y $\frac{p_{n-1}(a)}{p_{n-2}(a)} - \frac{p_{n-1}(b)}{p_{n-2}(b)} < 0$, dado que tanto p_{n-1} como p_{n-2} tienen todos sus ceros en (a, b) , $p_{n-1}(b)$ y $p_{n-2}(b)$ son positivos, y $p_{n-1}(a)$ y $p_{n-2}(a)$ tienen signos opuestos.

Además, el coeficiente \tilde{a}_{n-1} debe ser positivo:

$$\tilde{a}_{n-1} = \frac{(b-a)p_{n-1}(a)p_{n-1}(b)}{p_{n-1}(a)p_{n-2}(b) - p_{n-1}(b)p_{n-2}(a)} = \frac{b-a}{\frac{p_{n-2}(b)}{p_{n-2}(a)} - \frac{p_{n-2}(a)}{p_{n-1}(a)}} > 0,$$

que lo es. De esta forma, concluimos que la correspondiente matriz de Jacobi asociada a la f.c de Gauss-Lobatto, llamada “matriz de Jacobi-Lobatto”, es de la forma:

$$J_n^L = \left[\begin{array}{c|cc} J_{n-2} & a_{n-2}e_{n-1} & 0 \\ \hline a_{n-2}e_{n-1}^T & \tilde{b}_{n-2} & \tilde{a}_{n-1} \\ 0^T & \tilde{a}_{n-1} & \tilde{b}_{n-1} \end{array} \right],$$

J_{n-2} es la matriz de orden $n-2$ de Jacobi asociada a la f.c. de Gauss-Christoffel de $n-2$ nodos, los coeficientes $\tilde{b}_{n-1}, \tilde{a}_{n-1}$ se obtienen de la solución del sistema lineal (2.4). De esta forma, podemos enunciar, ver [4]:

Teorema 2.3 (Golub). *Los nodos de la f.c. de Gauss-Lobatto son los autovalores de la matriz J_n^L , y sus pesos $\{\lambda_{i,n}^L\}_{i=1}^n$ son los cuadrados de las primeras componentes de los correspondientes vectores propios normalizados.*

Señalar que las correspondientes entradas de la matriz de Jacobi son conocidas explícitamente para las funciones peso clásicas de Jacobi, cuyo uso es generalizado en las aplicaciones. Por completitud, las recogemos en la siguiente tabla. Están dadas para el intervalo $[-1, 1]$ por sencillez, pero se puede obtener para cualquier intervalo realizando un cambio de variable lineal.

$w(t)$	P. ortogonal	Notación	b_k	a_k
1	Legendre	P_n	0	$\frac{1}{2n+1}$
$(1-t^2)^{-1/2}$	Chebyshev 1ª especie	T_n	0	$\frac{n-\frac{1}{2}}{2n}$
$(1-t^2)^{1/2}$	Chebyshev 2ª especie	U_n	0	$\frac{n+\frac{1}{2}}{4(n+1)}$
$(1-t)^\alpha(1+t)^\beta$ $\alpha, \beta > -1$	Jacobi	$P_n^{(\alpha, \beta)}$	(1)	(2)

donde

$$(1) = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{(2n + \alpha + \beta + 2)(2n + \alpha + \beta)} \quad (2) = \frac{2(n + \alpha)(n + \beta)}{(2n + \alpha + \beta)(2n + \alpha + \beta + 1)}.$$

Observación 1 *Los polinomios obtenidos mediante los coeficientes recogidos en la tabla anterior son polinomios ortogonales cuya norma es*

$$\|p_n\|^2 = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{n!(2n + \alpha + \beta + 1)} \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)\Gamma(n + \beta + 1)}{\Gamma(2n + \alpha + \beta + 1)},$$

y su coeficiente principal o director es

$$k_n^{(\alpha+\beta)} = \frac{1}{2^n} \binom{2n + \alpha + \beta}{n}.$$

Cuando la función peso no es clásica, existen diferentes estrategias para aproximar estos coeficientes con la calidad deseada, como pueden ser el procedimiento de discretización de Stieljes, algoritmo de Lanczos, modificación de los momentos, por citar los más importantes, para más información ver [4] y las referencias incluidas en él.

En el caso de que la factorización del integrando, con el fin de que f sea regular, $I(f) = \int_a^b f(t)w(t) dt$ no conduzca a una función peso w positiva, esto es, que cambie de signo, o incluso, sea oscilante, nos encontramos con un serio problema.

Si denotamos por $k(t)$ la función “peso” no positiva para evitar confusión, nuestro objetivo es estimar integrales del tipo:

$$J(f) = \int_a^b f(t)k(t) dt,$$

donde f es Riemann integrable y k es una función Lebesgue integrable en general no positiva que aglutina todas las singularidades, tal que

$$c_k = \int_a^b t^n k(t) dt, \quad n \in \mathbb{N},$$

sean fácilmente computables.

Teniendo en cuenta que no podemos aplicar fórmulas de cuadraturas gaussianas, debemos intentarlo mediante fórmulas de cuadratura interpolatorias, escogiendo los nodos de forma apropiada, el siguiente resultado proporciona una elección de nodos con resultados realmente sorprendentes, ver [7].

Teorema 2.4. *Sea k una función “peso” integrable Lebesgue no necesariamente positiva y w una función peso, tal que*

$$\int_a^b \frac{|k(t)|^2}{w(t)} dt < \infty. \quad (2.5)$$

Denotamos por $J_n(f) = \sum_{j=1}^n A_{j,n} f(x_{j,n})$ la f.c interpolatoria asociada $J(f)$, siendo sus nodos $\{x_{j,n}\}_{j=1}^n$ los ceros del enésimo polinomio ortogonal con respecto a la función peso w , entonces:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n A_{j,n} f(x_{j,n}) = \int_a^b f(x) k(x) dx \quad (2.6)$$

y además,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n |A_{j,n}| f(x_{j,n}) = \int_a^b f(x) |k(x)| dx, \quad (2.7)$$

para toda función f Riemann integrables.

Demostración. Es destacable señalar que el criterio integral (2.5) que nos restringe a k tiene una consecuencia relevante en los pesos de la fórmula de la fórmula de cuadratura interpolatoria. Veámoslo.

De (2.5), deducimos que $\mathcal{K}(x) \in L_w^2$, donde $\mathcal{K}(x) = \frac{k(x)}{w(x)}$, y

$$L_w^2([a, b]) = \left\{ f : [a, b] \hookrightarrow \mathbb{C} / \int_a^b |f(x)|^2 w(x) dx < \infty \right\}.$$

Escogiendo $\{p_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ la sucesión de polinomios ortonormales asociados a w , por ser una base ortogonal, obsérvese que los polinomios son densos en $L_w^2([a, b])$, por serlo para las funciones continuas en $[a, b]$. Sabemos que

$$\mathcal{K}(x) = \sum_{j=0}^{\infty} k_j p_j(x) \quad \text{tal que} \quad \sum_{j=0}^{\infty} |k_j|^2 < \infty, \quad (2.8)$$

siendo $k_j = \int_a^b \mathcal{K}(x) p_j(x) w(x) dx$ los coeficientes de Fourier de \mathcal{K} . Pues bien, sabemos que

$$\begin{aligned} A_{j,n} &= \int_a^b L_{n-1}^j(x) k(x) dx = \int_a^b L_{n-1}^j(x) \frac{k(x)}{w(x)} w(x) dx = \\ &= \int_a^b L_{n-1}^j(x) \sum_{l=0}^{\infty} k_l p_l(x) w(x) dx = \sum_{l=0}^{\infty} k_l \int_a^b L_{n-1}^j(x) p_l(x) w(x) dx, \end{aligned}$$

ya que $L_{n-1}^j \in \mathbb{P}_{n-1}$, $\int_{-1}^1 L_{n-1}^j p_l(x) w(x) dx = 0$, $l = n, n+1, \dots$, por las condiciones de ortogonalidad obtenemos que

$$A_{j,n} = \sum_{l=0}^{n-1} k_l \int_{-1}^1 L_{n-1}^j p_l(x) w(x) dx,$$

equivalentemente

$$A_{j,n} = \int_a^b L_{n-1}^j(x) S_{n-1}^{\frac{k}{w}}(x) w(x) dx,$$

donde hemos denotado por $S_{n-1}^{\frac{k}{w}}$ a la n -ésima suma parcial del desarrollo de Fourier de (2.8).

Dado que $L_{n-1}^j S_{n-1}^{\frac{k}{w}} \in \mathbb{P}_{2n-2}$, y que sabemos que las f.c. de Gauss-Christoffel son exactas en \mathbb{P}_{2n-1} , concluimos

$$A_{j,n} = \lambda_{j,n} S_{n-1}^{\frac{k}{w}}(x_{j,n}), \quad j = 1, \dots, n. \quad (2.9)$$

De esta forma, observamos que los pesos son proporcionales a los pesos de las f.c de Gauss-Christoffel, dependiendo el signo de $A_{j,n}$ del signo de $S_{n-1}^{\frac{k}{w}}(x_{j,n})$.

Denotamos por $A_{j,n}(k)$ la dependencia de los $A_{j,n}$ de k , ya que nos permite visualizar una propiedad fundamental no explotada hasta ahora. Estamos hablando de la linealidad, es decir, si k_1 y k_2 son funciones pesos, entonces $A_{j,n}(k_1 + k_2) = A_{j,n}(k_1) + A_{j,n}(k_2)$.

Procedemos a demostrar el teorema. Demostraremos (2.7) ya que (2.6) es similar pero sin la utilización del valor absoluto. Tenemos que demostrar que

$$\forall \epsilon > 0 \quad \exists n_0 = n_0(\epsilon) : \forall n \geq n_0 \quad \left| \sum_{j=1}^n |A_{j,n}(k)| f(x_{j,n}) - \int_{-1}^1 f(x) |k(x)| dx \right| < \epsilon$$

Escogemos, por el momento, una función arbitraria, k' integrable según Lebesgue. Si a la expresión anterior sumamos y restamos $\sum_{j=1}^n |A_{j,n}(k')| f(x_{j,n})$ y

$\int_{-1}^1 f(x) |k'(x)| dx$ de forma apropiada, y aplicamos la desigualdad triangular, se obtiene lo siguiente

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{j=1}^n |A_{j,n}(k)| f(x_{j,n}) - \int_{-1}^1 f(x) |k(x)| dx \right| \leq \int_{-1}^1 |f(x)| \left| |k'(x)| - |k(x)| \right| dx + \\ & \sum_{j=1}^n |f(x_{j,n})| \left| |A_{j,n}(k)| - |A_{j,n}(k')| \right| + \left| \sum_{j=1}^n |A_{j,n}(k')| f(x_{j,n}) - \int_{-1}^1 f(x) |k'(x)| dx \right|. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Si aplicamos que $\| |a| - |b| \| \leq |a - b|$ en los dos primeros sumandos y además, la linealidad de $A_{j,n}(k)$ en k , obtenemos que

$$\left| \sum_{j=1}^n |A_{j,n}(k)| f(x_{j,n}) - \int_{-1}^1 f(x) |k(x)| dx \right| \leq \int_{-1}^1 |f(x)| |k'(x) - k(x)| dx + \sum_{j=1}^n |f(x_{j,n})| |A_{j,n}(k - k')| + \left| \sum_{j=1}^n |A_{j,n}(k')| f(x_{j,n}) - \int_{-1}^1 f(x) |k'(x)| dx \right|. \quad (2.11)$$

Obsérvar que, si escogemos k' de forma apropiada de tal forma que los dos primeros sumandos los hacemos pequeños, estamos implícitamente reduciendo nuestro resultado a que se verifique para k' .

Sea k' tal que $\mathcal{K}' = \frac{k'}{w}$ sea un polinomio arbitrario, supongamos que su grado es d . Por tanto,

$$\mathcal{K}'(x) = S_{n-1}^{\mathcal{K}'}(x), \quad n > d.$$

Si sustituimos $k'(x) = \mathcal{K}'(x)w(x)$ en (2.11), y de (2.9), obtenemos

$$\left| \sum_{j=1}^n f(x_{j,n}) |A_{j,n}(k)| - \int_{-1}^1 f(x) |k(x)| dx \right| \leq \|f\|_{\infty} \int_{-1}^1 |\mathcal{K}'(x) - \mathcal{K}(x)| w(x) dx + \|f\|_{\infty} \sum_{j=1}^n \lambda_{j,n} \left| S_{n-1}^{\mathcal{K}-\mathcal{K}'}(x_{j,n}) \right| + \left| \sum_{j=1}^n \lambda_{j,n} |\mathcal{K}'(x_{j,n})| f(x_{j,n}) - \int_{-1}^1 f(x) |\mathcal{K}'(x)| w(x) dx \right|.$$

Aplicando la desigualdad de Cauchy-Schwarz tanto a la integral del primer sumando como a la suma del segundo sumando, tenemos que la expresión anterior se reduce a

$$\leq \|f\|_{\infty} \sqrt{c_0} \left(\|\mathcal{K} - \mathcal{K}'\|_2 + \left[\sum_{j=1}^n \lambda_{j,n} \left| S_{n-1}^{\mathcal{K}-\mathcal{K}'}(x_{j,n}) \right|^2 \right]^{1/2} \right) + \left| \sum_{j=1}^n \lambda_{j,n} |\mathcal{K}'(x_{j,n})| f(x_{j,n}) - \int_{-1}^1 f(x) |\mathcal{K}'(x)| w(x) dx \right|.$$

Dado que $\left| S_{n-1}^{\mathcal{K}-\mathcal{K}'}(x_{j,n}) \right|^2 \in \mathbb{P}_{2n-2}$, y la f.c es exacta en \mathbb{P}_{2n-2} , se tiene

$$\sum_{j=1}^n \lambda_{j,n} \left| S_{n-1}^{\mathcal{K}-\mathcal{K}'}(x_{j,n}) \right|^2 = \int_{-1}^1 \left| S_{n-1}^{\mathcal{K}-\mathcal{K}'}(x) \right|^2 w(x) dx \leq \|\mathcal{K} - \mathcal{K}'\|_2^2,$$

concluyéndose de esta forma que

$$\left| \sum_{j=1}^n f(x_{j,n}) |A_{j,n}(k)| - \int_{-1}^1 f(x) |k(x)| dx \right| \leq 2 \|f\|_{\infty} \sqrt{c_0} \|\mathcal{K} - \mathcal{K}'\|_2 + |E_n(f|\mathcal{K}')|,$$

siendo $E_n(f|\mathcal{K}')$ el error de la fórmula de cuadratura de Gauss-Christoffel de $f|\mathcal{K}'$. Como consecuencia de la densidad de los polinomios en L_w^2 , $\forall \epsilon' > 0$, $\exists p_{\epsilon'} : \|k - p_{\epsilon'}\|_2 < \epsilon'$, escogemos ϵ'

$$\epsilon' = \frac{\epsilon}{4 \|f\|_{\infty} \sqrt{c_0}}, \quad \text{y } \mathcal{K}' = \mathbf{p}_{\epsilon'}.$$

Por otro lado, $\{|E_n(g)|\}_{n \in \mathbb{N}}$ converge a cero para toda función Riemann-Stieltjes integrable con respecto a w , como veremos en el siguiente capítulo. Solo resta demostrar que f es Riemann-Stieltjes integrable con respecto a w , ya que $p_{\epsilon'}$, por ser continua, lo es, y sabemos que el producto de funciones Riemann-Stieltjes integrables es Riemann-Stieltjes integrable.

Sabemos que f es Riemann integrable, entonces está acotada, y el conjunto de puntos de discontinuidad $D(f)$ es de medida cero, y como $w(x)$ es integrable de Lebesgue

$$\int_{D(f)} w(x) dx = 0.$$

Por lo tanto, el conjunto de puntos de discontinuidad de $f|p_{\epsilon'}$ con respecto a w tiene medida cero, por lo tanto, es Riemann-Stieltjes integrable con respecto a w . Podemos concluir que $\forall \epsilon'' > 0$, $\exists n_0 \in \mathbb{N} : n_0 = n_0(\epsilon'') : \forall n \geq n_0$.

$$\left| \sum_{j=1}^n |\lambda_{j,n}(k) f(x_{j,n})| p_{\epsilon'}(x_{j,n}) - \int_{-1}^1 f(x) |p_{\epsilon'}(x)| w(x) dx \right| < \epsilon''$$

Si escogemos $\epsilon'' = \frac{\epsilon}{2}$, $\exists n_0 = n_0(\epsilon'') : \forall n \geq n_0$

$$\left| \sum_{j=1}^n |A_{j,n}(k)| f(x_{j,n}) - \int_{-1}^1 f(x) |k(x)| dx \right| < \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{2} = \epsilon,$$

concluyendo de esta forma la demostración. \square

Incluso, para integrandos continuos podemos obtener una estimación del error, como queda recogido en el siguiente resultado.

Corolario 2.5.

$$|I(f) - J_n(f)| \leq \left[2 \int_a^b |k(t)| dt + \epsilon_n \right] \rho_{n-1}(f), \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \epsilon_n = 0.$$

Es importante destacar que la expresión (2.7) no está destinada a la computación numérica de integrales. Su importancia radica principalmente en la información que proporciona sobre el comportamiento de los signos de los pesos cuando n es grande. Si suponemos por ejemplo que $k(x) > 0$ en un intervalo

$[c, d] \subset [a, b]$. Luego, tomando f como la función característica en $[c, d]$ en las expresiones (2.6) y (2.7), concluimos

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{x_i \in [c, d]} |A_{i,n}| = \int_c^d k(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{x_i \in [c, d]} A_{i,n} > 0.$$

De esta forma, se observa que los correspondientes pesos son “*asintóticamente positivos*” cuando $k(x) > 0$, es decir, los pesos negativos cuyos respectivos nodos se encuentran en $[c, d]$ no aportan valor alguno. De manera similar, los pesos correspondientes a nodos pertenecientes a cualquier intervalo tal que $k(x) < 0$ son “*asintóticamente negativos*”.

Señalar que todo lo que hemos desarrollado es válido cuando el intervalo es no acotado con solo introducir dos conceptos muy importantes: por un lado, que el problema de momentos esté determinado, es decir, los momentos deben determinar a la función peso, y por otro lado, la aproximación polinómica pesada. Su formalización se escapa de los objetivos de esta memoria, pero se puede ver en las secciones 3.6 y 3.7 de [3]. Para finalizar el capítulo, realizaremos algunos experimentos numéricos con el fin de ilustrar los resultados expuestos.

Ejemplo 1 Queremos estimar la integral $\int_{-1}^1 g_i(x) dx$. Para ello, realizaremos una factorización del integrando de la forma $\int_{-1}^1 f_i(x)k(x) dx$, donde k podrá ser una función peso oscilante, en cuyo caso debe cumplir el criterio integral

$$\int_{-1}^1 \frac{|k(x)|^2}{w(x)} dx < \infty,$$

con respecto a una función peso w que conozcamos perfectamente para así poder usar fórmulas de cuadratura interpolatorias cuyos nodos sean los ceros de sus respectivos polinomios ortogonales. Planteamos la integral de las funciones:

A	B
$g_{1,A}(x) = \cosh(x) \sin(2\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$	$g_{1,B}(x) = \cosh(x) \sin(4\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$
$g_{2,A}(x) = \sqrt{ x } \sin(2\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$	$g_{2,B}(x) = \sqrt{ x } \sin(4\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$
$g_{3,A}(x) = \frac{1}{\sqrt[8]{(2-x)^3}} \sin(2\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$	$g_{3,B}(x) = \frac{1}{\sqrt[8]{(2-x)^3}} \sin(4\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$
$g_{4,A}(x) = \frac{1}{\sqrt[8]{(1.25-x)^3}} \sin(2\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$	$g_{4,B}(x) = \frac{1}{\sqrt[8]{(1.25-x)^3}} \sin(4\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$

Consideremos la siguiente factorización $f(x)k_j(x)$, $k_j(x) = \sin(2j\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$, $j = 1, 2$, siendo $w(x) = \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$ la función peso, de la cual conocemos explícitamente los nodos y pesos de la fórmula de cuadratura. Es inmediato que

$$\int_{-1}^1 \frac{|k_j(x)|^2}{w(x)} dx < \infty, \quad i = 1, 2.$$

En las siguientes tablas recogemos los errores relativos cometidos en la aproximación para los integrandos $f_i = \cosh(x)$, $\sqrt{|x|}$, $\frac{1}{\sqrt[8]{(2-x)^3}}$, $\frac{1}{\sqrt[8]{(1.25-x)^3}}$ con distintos valores de n para las funciones peso k_j planteadas.

	$k_1(x) = \sin(2\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$			
	$\cosh(x)$	$\sqrt{ x }$	$\frac{1}{\sqrt[8]{(2-x)^3}}$	$\frac{1}{\sqrt[8]{(1.25-x)^3}}$
$n = 7$	$9.3995e - 08$	$4.6617e - 02$	$9.4470e - 06$	$7.3789e - 04$
$n = 9$	$4.9886e - 11$	$2.6127e - 02$	$9.1164e - 08$	$2.4564e - 05$
$n = 11$	$1.0224e - 14$	$1.5457e - 02$	$5.1822e - 10$	$2.0597e - 07$
$n = 13$	$4.3480e - 15$	$9.9887e - 03$	$1.9918e - 12$	$1.4066e - 08$

Tabla 2.1. Errores relativos en valor absoluto para la función peso $k_1(x) = \sin(2\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$

	$k_2(x) = \sin(4\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$			
	$\cosh(x)$	$\sqrt{ x }$	$\frac{1}{\sqrt[8]{(2-x)^3}}$	$\frac{1}{\sqrt[8]{(1.25-x)^3}}$
$n = 7$	$2.6183e - 07$	$4.6195e - 02$	$2.6554e - 05$	$4.0625e - 03$
$n = 9$	$6.0745e - 13$	$5.2196e - 03$	$5.5619e - 07$	$2.4314e - 04$
$n = 11$	$9.7659e - 13$	$2.6981e - 02$	$9.6064e - 08$	$1.2582e - 04$
$n = 13$	$4.2864e - 13$	$2.9208e - 02$	$3.3187e - 09$	$1.3076e - 05$

Tabla 2.2. Errores relativos en valor absoluto para la función peso $k_2(x) = \sin(4\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$

Para contrastar, realizamos una comparación con los errores realizando directamente el cálculo aplicando cuadratura gaussiana para la función

$$g_1(x) = \cosh(x) \sin(4\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$$

	Error	Error gaussiana
$n = 7$	$2.6183e - 07$	$3.4395e - 01$
$n = 9$	$6.0745e - 13$	$5.6606e - 03$
$n = 11$	$9.7659e - 13$	$3.9243e - 06$
$n = 13$	$4.2864e - 13$	$2.4324e - 07$

Tabla 2.3. Errores relativos cometidos para $g_1(x) = \cosh(x) \sin(4\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$

Convergencia de las fórmulas de cuadratura

Hasta ahora hemos abordado la estimación de integrales del tipo

$$\int_a^b f(x)w(x) dx,$$

donde w aglutina todas las singularidades del integrando, bien dando lugar a una función peso positiva, o bien, siendo no positiva e incluso, oscilante, pero con un comportamiento similar en un determinado sentido a una función peso positiva.

Resta, por nuestra parte, hacer un análisis con cierto detalle de la convergencia de las fórmulas de cuadratura en general.

Es decir, estamos hablando del estudio de la convergencia de sucesiones de fórmulas de cuadratura para clases de funciones lo más amplias posibles, teniendo en mente, en todo momento, que los nodos y pesos sean de fácil computación. Es decir, ¿cómo se deben elegir la tabla triangular infinita de nodos \mathbb{X} y la de los pesos \mathbb{A}

$$\begin{array}{ccccccccc} x_{1,1} & & & & & & & & & & A_{1,1} \\ x_{1,2} & x_{2,2} & & & & & & & & & A_{1,2} & A_{2,2} \\ x_{1,3} & x_{2,3} & x_{3,3} & & & & & & & & A_{1,3} & A_{2,3} & A_{3,3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & & & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ x_{1,n} & x_{2,n} & x_{3,n} & \cdots & x_{n,n} & & & & & & A_{1,n} & A_{2,n} & A_{3,n} & \cdots & A_{n,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array}$$

tales que $a \leq x_{1,n} < x_{2,n} < \cdots < x_{n,n} \leq b$, $n \in \mathbb{N}$, para que la sucesión

$\{I_n(f)\}_{n \geq 1}$, dada por $I_n(f) = \sum_{k=1}^n A_{k,n} f(x_{k,n})$, converja, esto es:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} I_n(f) = I(f), \quad f \in \mathcal{F},$$

siendo \mathcal{F} una clase de funciones lo más amplia posible?, por ejemplo, $\mathcal{F} = \mathcal{RS}_w([a, b])^1$, $\mathcal{F} = \mathcal{C}([a, b])$, etc, ... Aunque también, y no siendo menos interesante, nos podemos plantear el siguiente problema: fijada una clase de funciones \mathcal{F} por algún contexto, ¿cómo se deben escoger \mathbb{X} y \mathbb{A} para garantizar la convergencia de las f.c. para todos los elementos de \mathcal{F} ?. Esta última cuestión es un

¹ $\mathcal{RS}_w([a, b]) = \{f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R} : f \text{ Riemman-Stieltjes integrable respecto a } w\}$

problema matemático bastante complejo, el cual se escapa de los objetivos de esta memoria.

Observar que, ya hemos dado ciertas respuestas a la primera cuestión planteada. Si consideramos cualesquiera de las sucesiones de fórmulas de cuadratura gaussianas, Gauss-Christoffel, Gauss-Radau y Gauss-Lobatto, ya hemos demostrado convergencia para todas las funciones continuas en $[a, b]$, e incluso, con velocidad en función de la regularidad de la función, resultado que recogemos en el siguiente teorema.

Teorema 3.1. *Sea $\{I_n(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$ la sucesión de cualesquiera de las fórmulas gaussianas,*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} I_n(f) = I(f), \quad \forall f \in C[a, b].$$

Con el fin de aumentar la clase de funciones hasta los límites del problema matemático, hasta $\mathcal{RS}_w([a, b])$, enunciamos el siguiente teorema.

Teorema 3.2 (Steklov). *Si los pesos $\{A_{k,n}\}_{k=1}^n$, $n \geq 1$, de las fórmulas de cuadratura $\{I_n(f)\}_{n \geq 1}$ son positivos, y la sucesión de fórmulas de cuadratura converge para los polinomios, entonces la sucesión de fórmulas de cuadratura $\{I_n(f)\}_{n \geq 1}$ converge para las funciones de $\mathcal{RS}_w([a, b])$.*

Demostración. Sea $f \in \mathcal{RS}_w[a, b]$. Tenemos que demostrar que

$$\forall \epsilon > 0, \exists n_0 = n_0(\epsilon) \text{ tal que } \forall n \geq n_0, |I_n(f) - I(f)| < \epsilon,$$

o equivalentemente,

$$I(f) - \epsilon \leq I_n(f) \leq I(f) + \epsilon.$$

Sea $\epsilon > 0$, en primer lugar necesitamos un “sandwich” de polinomios, ver el teorema 1.5.4 de [9]. Concretamente, existen dos polinomios, $p(x)$ y $P(x)$ tales que $p(x) \leq f(x) \leq P(x)$, $\forall x \in [a, b]$, verificando

$$\int_a^b [P(x) - p(x)] w(x) dx < \frac{\epsilon}{2}.$$

Por hipótesis, $\lim_{n \rightarrow \infty} I_n(p) = I(p)$. Por tanto, dado $\epsilon' > 0$, existe $n_1(\epsilon') = n_1 \in \mathbb{N}$ tal que, $\forall n > n_1$ se cumple que $|I(p) - I_n(p)| < \epsilon'$, o lo que es lo mismo,

$$I_n(p) - \epsilon' < I(p) < I_n(p) + \epsilon'.$$

Repitiendo el proceso para P , dado $\epsilon'' > 0$, existe $n_2(\epsilon'') = n_2 \in \mathbb{N}$ tal que, $\forall n > n_2$ se cumple que

$$I(P) - \epsilon'' < I_n(P) < I(P) + \epsilon''.$$

Por otra parte,

$$I(P - f) = \int_a^b [P(x) - f(x)] w(x) dx \leq \int_a^b [P(x) - p(x)] w(x) dx < \frac{\epsilon}{2}$$

$$I(f - p) = \int_a^b [f(x) - p(x)] w(x) dx \leq \int_a^b [P(x) - p(x)] w(x) dx < \frac{\epsilon}{2}$$

Así, tomando $n > \max\{n_1, n_2\} = n_3$, resultará la siguiente cadena de desigualdades, dado que $p(x) \leq f(x) \leq P(x)$, $x \in [a, b]$ y la positividad de los pesos,

$$\begin{aligned} I(f) - \frac{\epsilon}{2} &< I(f) - I(f - p) = I(p) < I_n(p) + \epsilon' \leq \\ &\mathbf{I}_n(\mathbf{f}) + \epsilon' \leq I_n(P) + \epsilon' < I(P) + \epsilon' + \epsilon'' = \\ I(f) + I(P - f) + \epsilon' + \epsilon'' &< I(f) + \frac{\epsilon}{2} + \epsilon' + \epsilon'' \end{aligned}$$

De esta forma, fijado $\epsilon > 0$, existe $n_3 \in \mathbb{N}$ tal que $\forall n > n_3$:

$$\begin{aligned} I(f) - \frac{\epsilon}{2} &\leq \mathbf{I}_n(\mathbf{f}) + \epsilon' < I(f) + \frac{\epsilon}{2} + \epsilon' + \epsilon'' \\ &\Downarrow \\ -\frac{\epsilon}{2} - \epsilon' + I(f) &\leq \mathbf{I}_n(\mathbf{f}) < I(f) + \frac{\epsilon}{2} + \epsilon'' \end{aligned}$$

Dado que ϵ' y ϵ'' son arbitrarios, si hacemos $\epsilon' = \epsilon'' = \frac{\epsilon}{2}$, se concluye la demostración. \square

Debemos señalar que, en general, una sucesión de fórmulas de cuadratura interpolatorias $\{I_n(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$ solo garantiza una de las hipótesis del Teorema de Steklov, la convergencia para polinomios. Sin embargo, si que tenemos garantizadas ambas hipótesis para las gaussianas, dado que sus pesos son positivos. Por tanto, se concluye que cualesquiera de las fórmulas Gaussianas (Christoffel, Radau y Lobatto) converge para las funciones Riemann Stieltjes integrable con respecto a w , $\mathcal{RS}_w([a, b])$.

Corolario 3.3. Sea $\{I_n(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$ la sucesión de fórmulas Gaussianas, entonces:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} I_n(f) = I(f), \quad \forall f \in \mathcal{RS}_w([a, b]).$$

Nuevamente, el teorema de Steklov nos pone de manifiesto la importancia de la positividad de los pesos para garantizar la convergencia de las fórmulas de cuadratura interpolatorias para las funciones $\mathcal{RS}_w([a, b])$.

Para terminar el capítulo, atendiendo a los resultados del primer capítulo, podemos enunciar

Corolario 3.4. Sea $\{I_n(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$, $I_n(f) = \sum_{j=1}^n A_{j,n} f(x_{j,n})$, una sucesión de f.c. interpolatoria. Si

$$\sum_{j=1}^n |A_{j,n}| \leq M, \quad \forall n \in \mathbb{N},$$

la sucesión de fórmulas de cuadratura converge para las funciones continuas.

Demostración. Por el teorema 1.10, tenemos que

$$|E_n(f)| \leq \left[1 + \sum_{k=1}^n |A_k| \right] \rho_{n-1}(f), \leq [1 + M] \rho_{n-1}(f).$$

Por el teorema de Weierstrass, $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho_{n-1}(f) = 0$, $f \in C([a, b])$, por tanto, $\lim_{n \rightarrow \infty} |E_n(f)| = 0$, concluyéndose que la sucesión de fórmulas de cuadratura converge para las funciones continuas. \square

Corolario 3.5. Sea $\{I_n(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$, $I_n(f) = \sum_{j=1}^n A_{j,n} f(x_{j,n})$, una sucesión de f.c. interpolatoria. Si

$$\sum_{k=1}^n |A_{k,n}| \leq Mn^d, \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad d \in \mathbb{N}$$

la sucesión de fórmulas de cuadratura converge para funciones derivables con continuidad hasta el orden $d + 1$.

Demostración. Observar que del teorema 1.11 (Teorema de Jackson), se tiene que, si $f \in C^{d+1}([a, b])$,

$$|\rho_{n-1}(f)| \leq \left(\frac{\pi}{2}\right)^{d+1} \frac{\|f^{(d+1)}\|_{\infty}}{n(n-1) \cdots (n-d)} \leq M \frac{1}{n^{d+1}}$$

\square

Aproximación Padé

Vamos a analizar sucintamente una de las aplicaciones más relevantes que tienen las fórmulas de cuadratura, aunque en realidad es una “convivencia bondadosa” con otro tópico de la teoría de aproximación, la Aproximación Padé.

Si consideramos la función $g_z(x) = \frac{1}{z-x}$, $z \notin [a, b]$, que es, en realidad, una familia uniparamétrica de funciones. Es evidente que $g_z \in C([a, b])$, $\forall z \notin [a, b]$.

La correspondiente integral da lugar a

$$I(g_z) = \int_a^b \frac{w(x)}{z-x} dx = \hat{w}(z), \quad z \in \mathbb{R} \setminus [a, b].$$

Observamos que \hat{w} es la transformada de Cauchy de la función peso w , clásicamente denominada función de Markov. Se caracteriza por ser analítica en $\hat{\mathbb{C}} \setminus [a, b]$, en particular, en $z = \infty$ admite el siguiente desarrollo

$$\hat{w}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \frac{1}{z^{k+1}}, \quad z \rightarrow \infty, \quad (4.1)$$

donde $c_k = \int_a^b x^k w(x) dx$. Efectivamente, ya que para todo los z tales que $|x| < |z|$, $\forall x \in [a, b]$, ($|z| > \max(|a|, |b|)$), se cumple que

$$\frac{1}{z-x} = \frac{1}{z} \frac{1}{1-\frac{x}{z}} = \frac{1}{z} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{x}{z}\right)^k, \quad \left|\frac{x}{z}\right| < 1, \quad \forall x \in [a, b].$$

Al integrar, gracias a la convergencia uniforme y absoluta de la serie, la serie permuta con la integral, y se recupera (4.1). Si hacemos lo propio con la f.c. de Gauss-Christoffel, $I_n(g_z)$, obtenemos una función racional R_n ,

$$I_n(g_z) = \sum_{j=1}^n \frac{\lambda_{j,n}}{z-x_{j,n}} = \frac{q_{n-1}(z)}{p_n(z)} = R_n(z), \quad \lambda_{j,n} > 0, \quad j = 1, \dots, n.$$

siendo su denominador p_n el enésimo polinomio ortogonal. Es fácil deducir que los ceros de los polinomios p_n y q_{n-1} se entrelazan, como consecuencia de la positividad de los coeficientes de la descomposición en fracciones simples de los pesos de la f.c. de Gauss-Christoffel $\{\lambda_{j,n}\}_{j=1}^n$.

Por el mismo argumento utilizado con anterioridad para la función de Markov, se tiene que $R_n \in \mathcal{H}(\hat{\mathbb{C}} \setminus [a, b])$, cuyo desarrollo en $z = \infty$ vienen dado por

$$R_n(z) = \sum_{j=0}^{\infty} I_n(x^j) \frac{1}{z^{j+1}}, \quad z \rightarrow \infty, \quad (|z| > \max(|a|, |b|)).$$

En efecto, $\frac{1}{z-x_{j,n}} = \frac{1}{z(1-\frac{x_{j,n}}{z})} = \frac{1}{z} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{x_{j,n}}{z}\right)^j$, entonces si $|x_{j,n}| < |z|$, $j = 1, 2, \dots, n$, logramos expresar $R_n(z)$ de la siguiente forma:

$$R_n(z) = \sum_{k=1}^n \lambda_{k,n} \left(\frac{1}{z} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{x_{k,n}}{z}\right)^j \right) = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^n \lambda_{k,n} x_{k,n}^j \right) \frac{1}{z^{j+1}} = \sum_{j=0}^{\infty} I_n(x^j) \frac{1}{z^{j+1}}.$$

Por otro lado, dado que la f.c. de Gauss-Christoffel es exacta en \mathbb{P}_{2n-1} , se tiene $I_n(x^j) = c_j$, $j = 0, 1, \dots, 2n-1$, concluimos que

$$\hat{w}(z) - R_n(z) = O\left(\frac{1}{z^{2n+1}}\right), \quad z \rightarrow \infty.$$

La función racional R_n interpola a \hat{w} en el sentido de Taylor en el infinito con multiplicidad $2n+1$. R_n es comúnmente denominado **Aproximante de Padé** de orden n asociado a \hat{w} . Dado que $g_z(x) = \frac{1}{z-x} \in C([a, b])$, $\forall z \notin [a, b]$, como consecuencia de la convergencia de las fórmulas de cuadratura de Gauss-Christoffel para las funciones continuas, se tiene que

$$R_n(z) = I_n(g_z) \rightarrow I(g_z) = \hat{w}(z) \quad z \in \mathbb{R} \setminus [a, b],$$

puntualmente. Surge una pregunta natural, propia en el contexto de las funciones holomorfas, ¿es la convergencia más rica?, es decir, ¿podemos conseguir convergencia uniforme en compactos de $\mathbb{C} \setminus [a, b]$? La respuesta es afirmativa, pues sabemos que, la convergencia puntual en un conjunto con puntos de acumulación, aplicando el Teorema de Vitali, ver el teorema 12.8 de [6], hay convergencia uniforme en compactos de $\mathbb{C} \setminus [a, b]$ si la sucesión de funciones holomorfas $\{R_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ está uniformemente acotada en compactos de $\mathbb{C} \setminus [a, b]$.

Efectivamente, $\{R_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ está uniformemente acotada, esto es, $\exists M_k$ tal que $|R_n(z)| \leq M_k$, $\forall n \in \mathbb{N}$ y $z \in K$, siendo K es un compacto arbitrario de $\mathbb{C} \setminus [a, b]$. Veámoslo, si $d(K, [a, b])$ es la distancia entre K y $[a, b]$, se tiene que:

$$\frac{1}{|z-x|} < \frac{1}{d(K, [a, b])}, \quad \forall z \in K, \forall x \in [a, b].$$

Dado que $R_n(z) = \sum_{j=1}^n \frac{\lambda_{j,n}}{z-x_{j,n}}$, con $\lambda_{j,n} > 0$ y $\sum_{j=1}^n \lambda_{j,n} = 1$, haciendo uso de la desigualdad anterior, se sigue que:

$$|R_n(z)| \leq \sum_{j=1}^n \frac{\lambda_{j,n}}{d(K, [a, b])} = \frac{1}{d(K, [a, b])} \sum_{j=1}^n \lambda_{j,n}$$

$$|R_n(z)| \leq \frac{1}{d(K, [a, b])}, \quad \forall z \in K, \forall n \in \mathbb{N},$$

luego $M_k = \frac{1}{d(K, [a, b])}$. De esta forma, podemos enunciar

Teorema 4.1. *Sea w una función peso en $[a, b]$. Entonces, la sucesión de Aproximantes de Padé de orden n converge uniformemente en compactos de $\mathbb{C} \setminus [a, b]$ a la función de Markov asociada a w .*

Corolario 4.2. *Sea w una función peso en $[a, b]$. Entonces la sucesión $\left\{\frac{1}{R_n}\right\}_{n \in \mathbb{N}}$, siendo $\{R_n\}$ la sucesión de aproximantes de Padé de orden n asociada a la función de Markov asociada a w , converge a $\frac{1}{\hat{w}(z)}$.*

Demostración. Se tiene que

$$\hat{w}(z) - R_n(z) = R_n(z)\hat{w}(z) \left(\frac{1}{R_n(z)} - \frac{1}{\hat{w}(z)} \right).$$

Sabemos que R_n tiene todos sus ceros en $[a, b]$, si $\hat{w}(z)$ los tiene también deben estar en $[a, b]$, ya que

$$\hat{w}(z_0) = 0 \Leftrightarrow \int_a^b \frac{w(x)}{z_0 - x} dx = \int_a^b \frac{\bar{z}_0 - x}{|z_0 - x|^2} w(x) dx = 0,$$

equivalentemente

$$\bar{z}_0 \int_a^b \frac{w(x)}{|z_0 - x|^2} dx = \int_a^b x \frac{w(x)}{|z_0 - x|^2} dx,$$

y aplicando el teorema del valor medio para integrales, se tiene que $\bar{z}_0 = x_0 \in (a, b)$. Dado que $\left\{\frac{1}{R_n \hat{w}}\right\}_{n \in \mathbb{N}}$ está uniformemente acotado en compactos de $\mathbb{C} \setminus [a, b]$, por estar $\{R_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ acotado uniformemente inferiormente con solo escoger $d(K, [a, b])$ diámetro de K y $[a, b]$, el resultado es consecuencia del teorema anterior. \square

Para finalizar el capítulo, ilustraremos los resultados con algunos ejemplos numéricos.

Ejemplo 2 *Sabemos que*

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{z - x} \sqrt{\frac{1+x}{1-x}} \frac{dx}{\pi} = \sqrt{\frac{z+1}{z-1}} - 1.$$

Vamos a estimar la función de Markov $\hat{w}(z) = \sqrt{\frac{z+1}{z-1}} - 1$ mediante las fórmulas de Gauss-Christoffel asociadas a $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$.

En la siguiente tabla, ilustraremos los errores relativos cometidos al aproximar a la función de Markov en distintos puntos cercanos al conjunto de singularidades $[-1, 1]$.

	$z = n = 5$	$n = 7$	$n = 9$	$n = 11$
$z = 1, 5$	$9.1355e - 05$	$1.9447e - 06$	$4.1394e - 08$	$8.8113e - 10$
$z = 1, 25$	$1.4641e - 03$	$9.1550e - 05$	$5.7220e - 06$	$3.5763e - 07$
$z = -1, 10$	$4.2768e - 03$	$7.2079e - 04$	$1.2212e - 04$	$2.0708e - 05$
$z = -1, 20$	$9.1931e - 04$	$7.6187e - 05$	$6.3197e - 06$	$5.2425e - 07$

Tabla 4.1. Errores de aproximación para $z \in \mathbb{R} \setminus [a, b]$.

	$n = 5$	$n = 7$	$n = 9$	$n = 11$
$z = -1, 5 + 0, 5i$	$1.5816e - 05$	$2.1954e - 07$	$3.0474e - 09$	$4.2301e - 11$
$z = 1, 1 - 0, 25i$	$3.3932e - 03$	$2.9532e - 04$	$2.5719e - 05$	$2.2396e - 06$
$z = i$	$1.6093e - 04$	$4.7372e - 06$	$1.3945e - 07$	$4.1051e - 09$
$z = -0, 5i$	$9.5580e - 03$	$1.3945e - 03$	$2.0346e - 04$	$2.9684e - 05$

Tabla 4.2. Errores de aproximación para $z \in \hat{\mathbb{C}} \setminus [a, b]$.

A

Apéndice

Consideramos w una función positiva casi por toda e integrable Lebesgue en $[a, b]$. Definimos el conjunto:

$$L_w^2([a, b]) = \left\{ f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R} / \int_a^b |f(x)|^2 w(x) dx < \infty \right\}.$$

Sabemos que $(L_w^2([a, b]), +, \cdot, \mathbb{R})$, con la identificación estándar de las funciones, es un espacio pre-Hilbert cuyo producto interior asociado es

$$\langle f, g \rangle := \int_a^b f(x)g(x)w(x) dx, \quad (\text{A.1})$$

que posee una propiedad de simetría que permite obtener propiedades relevantes, concretamente

$$\langle xf, g \rangle = \langle f, xg \rangle.$$

Si $\langle f, g \rangle = 0$, diremos que dichas funciones son ortogonales. Si f es ortogonal a todas las funciones de un conjunto A , diremos que f es ortogonal a A , y lo denotamos por $f \perp A$. Como $\mathbb{P} \subset L_w^2([a, b])$ y es denso en $L_w^2([a, b])$ por serlo para $C([a, b])$, por el teorema de Weierstrass, $L_w^2([a, b])$ es un espacio de Hilbert. Además, todo producto interior define una norma, $\|f\|^2 = \langle f, f \rangle$.

Obsérvese que, $\forall f \in L_w^2([a, b])$

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j p_j(x) : \sum_{j=0}^{\infty} |f_j|^2 < \infty,$$

donde f_j recibe el nombre de coeficiente de Fourier, y vienen dados por

$$f_j = \int_a^b f(x)p_j(x)w(x) dx.$$

En particular, si $p \in \mathbb{P}_n$

$$p(x) = \sum_{j=1}^n p_j p_j(x), \text{ con } p_j = \int_a^b p(t)p_j(t)w(t) dt,$$

es más,

$$p(x) = \sum_{j=1}^n p_j p_j(x) = \sum_{j=1}^n \left(\int_a^b p(t) p_j(t) w(t) dt \right) p_j(x) = \int_a^b p(t) \sum_{j=1}^n p_j(t) p_j(x) w(t) dt,$$

equivalentemente

$$p(x) = \int_a^b p(t) K_n(t, x) w(t) dt,$$

donde la función $K_n(t, x)$ recibe el nombre de núcleo reproductor asociado a \mathbb{P}_n , función que jugará un papel esencial en la obtención de los pesos de las fórmulas de cuadratura de Gauss-Christoffel.

A.1. Polinomios ortogonales

Como hemos visto, la construcción de fórmulas de cuadratura de máxima precisión se apoya sustancialmente en la teoría de polinomios ortogonales asociadas a funciones pesos. Analizamos algunos de los resultados que más reportan al estudio de las fórmulas de cuadratura.

Definición A.1. Una sucesión de polinomios $\{p_j\}_{j=0}^\infty$, con p_n de grado n , se llamará sucesión de polinomios ortogonales sí y solo sí

$$\langle p_n, p_m \rangle := \int_a^b p_n(x) p_m(x) w(x) dx = \delta_{nm} \Delta_n$$

siendo δ_{nm} la delta de Kronecker y $\Delta_n > 0$.

La existencia de $\{p_n\}_{n \geq 0}$ está garantizada tras realizar el proceso de ortogonalización de Gramm-Schmidt en \mathbb{P}_n , para cada $n \in \mathbb{N}$. Por lo tanto, p_n es único salvo constante multiplicativa.

Si denotamos por $P_n(x)$ al mónico, entonces $p_n(x) = \frac{P_n(x)}{\|P_n\|}$ es el ortonormal.

El teorema siguiente establece una propiedad clave de los polinomios ortogonales de cara a la construcción de una fórmula de cuadratura.

Teorema A.2. Sea P_n el n -ésimo polinomio ortogonal mónico. Entonces, sus ceros son simples y están contenidos en (a, b) .

Demostración. Sabemos que P_n tiene coeficientes reales, y que $P_n \perp \mathbb{P}_{n-1}$, en particular, a $p \equiv 1$, por lo tanto, $\int_a^b P_n(x) w(x) dx = 0$, y como $w(x) > 0$ en casi todo punto, necesariamente $P_n(x)$ tiene como mínimo un cambio de signo en $[a, b]$. Queremos demostrar que en realidad tiene n cambios de signo. Procedemos, por reducción al absurdo. Suponemos que solo tiene $k < n$ cambios de signo. Llamamos x_1, \dots, x_k a dichos cambios de signo, y definimos por $Q(x) =: \prod_{i=1}^k (x - x_i)$ al polinomio que se anula en ellos. Se observan dos cosas. Por un lado, $P_n(x)Q(x)$ conserva el signo en (a, b) , por lo tanto:

$$\int_a^b P_n(x)Q(x)w(x) dx \neq 0. \tag{A.2}$$

Por otra parte, como P_n es ortogonal a \mathbb{P}_{n-1} , en particular a $Q \in \mathbb{P}_k \subset \mathbb{P}_{n-1}$

$$\int_a^b P_n(x)Q(x)w(x) dx = 0$$

lo cual es una contradicción con (A.2). Por tanto, tiene n cambios de signo. \square

Otra propiedad fundamental de la teoría de polinomios ortogonales para el cómputo eficiente de los nodos de la f.c. gaussiana, y a la postre para el cálculo eficiente de los pesos, es la existencia de una relación de recurrencia a tres términos para $\{p_n\}_{n \in \mathbb{N}}$.

Teorema A.3 (Relación de recurrencia a tres términos). *Sea la sucesión de polinomios ortonormales $\{p_n\}_{n=0}^\infty$, entonces existen dos sucesiones $\{a_n\}_{n=0}^\infty$ y $\{b_n\}_{n=0}^\infty$ de números reales, con $a_n > 0$, $n \in \mathbb{N}$, tales que:*

$$xp_n(x) = a_{n+1}p_{n+1}(x) + b_np_n(x) + a_np_{n-1}(x) \quad n \geq 1 \tag{A.3}$$

$$p_{-1} \equiv 0, \quad p_0 \equiv 1$$

Demostración. Como $\{p_k\}_{k=0}^{n+1}$ es una base en \mathbb{P}_{n+1} . Consideramos $xp_n(x) \in \mathbb{P}_{n+1} \setminus \mathbb{P}_n$, dado que p_n tiene grado n , se sigue que:

$$xp_n(x) = \sum_{k=0}^{n+1} c_{k,n}p_k(x), \tag{A.4}$$

donde $c_{k,n} = \langle xp_n, p_k \rangle$ son los coeficientes de Fourier.

Como consecuencia de la ortonormalidad y de la simetría del producto interior, $c_{k,n} = \langle xp_n, p_k \rangle = \langle p_n, xp_k \rangle = 0$, $k = 0, 1, \dots, n-2$. Así, la expresión (A.4) se reduce a:

$$xp_n(x) = c_{n-1,n}p_{n-1}(x) + c_{n,n}p_n(x) + c_{n+1,n}p_{n+1}(x).$$

Por un lado, $b_n := c_{n,n} = \langle p_n, xp_n \rangle$, y, por otro, como consecuencia de la simetría del producto interior:

$$c_{n-1,n} = \langle xp_n, p_{n-1} \rangle = \langle p_n, xp_{n-1} \rangle = \frac{\|P_n\|}{\|P_{n-1}\|} > 0,$$

$$c_{n+1,n} = \langle xp_n, p_{n+1} \rangle = \langle p_{n+1}, xp_n \rangle = \frac{\|P_{n+1}\|}{\|P_n\|} > 0,$$

observamos que si definimos $a_n := c_{n-1,n}$, entonces $c_{n+1,n} := a_{n+1}$, obteniéndose A.3. \square

Observación 2 *Obsérvese la importancia de la simetría $\langle xf, g \rangle = \langle f, xg \rangle$, imprescindible para obtener la relación de recurrencia.*

También es importante destacar la que se conoce como la propiedad de entrelazamiento de ceros, propiedad que abre el camino para que los ceros puedan terminar llenando $[a, b]$.

Teorema A.4 (Entralamiento de ceros). *Si $\{p_n\}_{n=0}^\infty$ es una familia de polinomios ortogonales, entonces entre dos ceros de p_{n+1} siempre existe un cero de p_n .*

Demostración. Sin pérdida de generalidad, supongamos que $\{P_n\}_{n=0}^\infty$ son mónicos. Observar que, tenemos entrelazamiento de ceros si

$$P'_n(x_{i,n})P_{n-1}(x_{i,n}) > 0, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

siendo $P_n(x_{i,n}) = 0, i = 1, 2, \dots, n$. Definimos el polinomio $S_i(x) = \frac{P_n(x)}{(x-x_i)}P_{n-1}(x)$, $S_i \in \mathbb{P}_{2n-2}$. Denotamos por $I_n(f)$ a la f.c. de Gauss-Christoffel, sabemos que

$$I(p) = I_n(p), \quad \forall p \in \mathbb{P}_{2n-1}.$$

En particular, para S_i se tiene

$$\int_a^b \frac{P_n(x)}{x-x_i} p_{n-1}(x) w(x) dx = I(S_i) = I_n(S_i) = \lambda_i P'_n(x_i) P_{n-1}(x_i)$$

y como consecuencia de que $P_{n-1} \perp \mathbb{P}_{n-2}$

$$\int_a^b \frac{P_n(x)}{x-x_i} p_{n-1}(x) w(x) dx = \int_a^b x^{n-1} P_{n-1}(x) w(x) dx = \|P_{n-1}\|_2^2.$$

De esta forma, se concluye que

$$\|P_{n-1}\|_2^2 = \lambda_i P'_n(x_i) P_{n-1}(x_i) > 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

□

Teorema A.5. *Sea $\{l_1, l_2, \dots, l_n\}$ los polinomios fundamentales de Lagrange asociados a los ceros del n -ésimo polinomio ortogonal. Entonces, $\{l_1, l_2, \dots, l_n\}$ es una base ortogonal de \mathbb{P}_{n-1} .*

Demostración. Sabemos que es base como consecuencia de la interpolación. Resta comprobar que es ortogonal,

$$\langle l_i, l_j \rangle = \int_a^b l_i(x) l_j(x) w(x) dx = I_n(l_i l_j) = \lambda_{i,n} \delta_{ij}, \quad l_i \cdot l_j \in \mathbb{P}_{2n-2}.$$

dado que $l_j, l_i \in \mathbb{P}_{n-1}$, y las f.c. de Gauss-Christoffel son exactas en \mathbb{P}_{2n-1} . □

En todo espacio de Hilbert juega un papel destacado la función denominada núcleo reproductor, en particular para los polinomios, como hemos visto en la introducción para $L_w^2([a, b])$. No obstante, obtendremos otra expresión para beneficio de nuestros intereses.

Teorema A.6. *El núcleo reproductor asociado a \mathbb{P}_{n-1} admite la expresión*

$$K_{n-1}(t, x) = \sum_{k=1}^n \frac{1}{\lambda_{k,n}} l_k(t) l_k(x),$$

donde $\{l_1, l_2, \dots, l_n\}$ son los polinomios fundamentales de Lagrange asociado a los ceros del n -ésimo polinomio ortogonal y $\{\lambda_{k,n}\}_{k=1}^n$ son los pesos de la f.c. de Gauss-Christoffel.

Demostración. Sabemos que el núcleo reproductor asociado a \mathbb{P}_n se caracteriza por

$$\int p(x) K_{n-1}(x_0, x) w(x) dx = p(x_0), \quad \forall p \in \mathbb{P}_{n-1}, \quad \forall x_0 \in \mathbb{R}$$

Dado que $\{l_1, \dots, l_n\}$ es una base de \mathbb{P}_{n-1} , se sigue que, $p(x) = \sum_{j=1}^n p(x_j) l_j(x)$, $\forall p \in \mathbb{P}_{n-1}$, entonces,

$$\begin{aligned} p(x) &= \sum_{j=1}^n p(x_j) l_j(x) = \sum_{j=1}^n \left(\frac{1}{\lambda_{j,n}} \int p(t) l_j(t) w(t) dt \right) l_j(x) \\ &= \int p(t) \sum_{j=1}^n \frac{l_j(t) l_j(x)}{\lambda_{j,n}} w(t) dt, \end{aligned}$$

donde en la segunda igualdad hemos usado que $p(t) l_j(x) \in \mathbb{P}_{2n-2}$ y la exactitud la fórmula de cuadratura. Luego, se concluye que

$$K_{n-1}(t, x) = \sum_{k=1}^n \frac{1}{\lambda_{k,n}} l_k(t) l_k(x).$$

□

Como consecuencia inmediata del teorema A.6, se obtiene una relación muy útil para las fórmulas de cuadratura.

Teorema A.7. *Sea $\{p_k\}$ la sucesión de polinomios ortonormales con respecto a la función peso w en (a, b) y sea $I_n(f) = \sum_{j=1}^n \lambda_{j,n} f(x_j)$ la n -ésima fórmula de Gauss-Christoffel. Entonces,*

$$\lambda_{j,n} = \frac{1}{\sum_{k=0}^{n-1} (p_k(x_j))^2}, \quad j = 1, \dots, n.$$

Bibliografia

- [1] BULTHEEL, A., CRUZ-BARROSO, R., VAN-BAREL, M.. *On Gauss-type quadrature formulas with prescribed nodes anywhere on an interval of the real line*. *Calcolo* 47 (1) (2010) 21-48.
- [2] CHENEY, E. W.. *Introduction to Approximation Theory*, McGraw-Hill, New York, 1966.
- [3] DAVIS, P.J., RABINOWITZ, P. *Methods of Numerical Integration (2nd ed.)*. Computer Science and Applied Mathematics, Academic Press, Orlando. 1984.
- [4] GAUTSCHI, W. *Orthogonal Polynomials: Computation and Approximation*, 2004.
- [5] HAIRER, E. and WANNER, G.. *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and differential-algebraic problems*, second ed., Springer-Verlag, 1996.
- [6] HENRICI, P. *Applied and Computational Complex Analysis, volumen II*. John Wiley and Sons, New York (1974)
- [7] SLOAN, I. H. and SMITH, W. E.. *Properties of interpolatory product integration rules*, *SIAM J. Numer. Anal.*, v. 19, 1982, pp. 427-442.
- [8] STOER, J., BURLISH, R.. *Introduction to Numerical Analysis*, Springer-Verlag, second ed., 1992.
- [9] SZEGO, G.. *Orthogonal Polynomials*, *Amer. Math. Soc. Coll. Publ.* Vol 23, Amer. Math. Soc. Providence, R.I. 1975

Quadratura formulas. Aplications

Abstract

We consider the approximation of integrals with respect to positive weight functions on finite intervals by means positive quadrature formulas with maximal domain of exactness and up to two preassigned nodes. We deal the estimation of error in approximation depending on the regularity of the function, the efficient calculation and the convergence. Furthermore, we consider interpolatory quadrature formula to approximate integrals when the weight function is not positive. Next, we study the convergence of positive quadrature formulas for Riemann-Stieltjes integrable. We conclude the memory with one of the most relevant applications, the Padé approximation of Markov functions.

1. Gauss-Christoffel quadrature formulas

The need to evaluate definite integrals is a classical mathematical problem. As a mathematical problem, on most occasions, we encounter serious drawbacks. In these circumstances, the only alternative left is to estimate the integral numerically. The relevance of the problem has led to the existence of a great variety of techniques to approximate it numerically, and we will deal with one of them in this report, the quadrature formulae of maximum precision, also called gaussians, from the interpolation and their analysis led us to the orthogonal polynomials. Jacobi's Theorem shows the way to construct the formulas with the highest degree of accuracy.

Theorem 1 (Jacobi) The quadrature formula $Q_n(f) = \sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k)$ is exact in \mathbb{P}_{n-1+k} , with $1 \leq k \leq n$ if and only if it is interpolatory and

$$\langle W, p \rangle = \int_a^b W(t)p(t)w(t) dt = 0, \forall p \in \mathbb{P}_{k-1},$$

where $W(t)$ is the nodal polynomial, with the error expression

$$|E_n(f)| \leq \left[\int_a^b w(x) dx + \sum_{k=1}^n |\lambda_{k,n}| \right] \rho_{n+k-1}(f).$$

- $\sum_{k=1}^n |\lambda_k|$ is closely related to stability and convergence.
- By Weierstrass theorem, $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n(f) = 0$, when f is continuous.
- This nodal polynomial are called quasiorthogonal polynomial and it has at least k change signs in the interval.

2. Efficient computation of Gaussian quadrature formulas

In the efficient calculation of positive quadrature formulas, the three terms recurrence satisfy by orthogonal polynomials play a fundamental role. The calculation of their nodes and weight is reduced to a problem of eigenvalues and eigenvectors.

Theorem 2 (Golub-Welsh) Let J_n be the Jacobi matrix constructed from the coefficients a_k and b_k of the recurrence relation:

$$xp_n(x) = a_n p_{n-1}(x) + b_n p_n(x) + a_{n+1} p_{n+1}(x) \quad n \geq 1.$$

Then, the nodes of the Gauss-Christoffel quadrature formula are the eigenvalues of J_n , and the weights $\lambda_{i,n}$ are given by

$$\lambda_{i,n} = v_{i1}^2, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

where v_{i1} is the first component of the normalised eigenvector v_i associated to the eigenvalue x_i .

The nodes of an appropriate weight function allow the construction of interpolating quadrature formulas for weight functions that are not necessarily positive, with good performance.

Theorem 3 Let k be a Lebesgue integrable function not necessarily positive and w be a positive weight function, such that

$$\int_a^b \frac{|k(t)|^2}{w(t)} dt < \infty.$$

Denote by $J_n(f) = \sum_{j=1}^n A_{j,n} f(x_{j,n})$ the associated interpolating q.f. $J(f)$, its nodes being $\{x_{j,n}\}_{j=1}^n$ being the zeros of the n th polynomial orthogonal with respect to w , then:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n A_{j,n} f(x_{j,n}) = \int_a^b f(x)k(x) dt,$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n |A_{j,n}| f(x_{j,n}) = \int_a^b f(x)|k(x)| dx.$$

Note 1 The corresponding weights are "asymptotically positive" when $k(x) > 0$, $x \in [c, d]$, i.e. the negative weights whose respective nodes are in $[c, d]$ do not contribute any value.

	$k(x) = \sin(4\pi x) \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$			
	$\cosh(x)$	$\sqrt{ x }$	$\frac{1}{\sqrt[3]{2-x}}$	$\frac{1}{\sqrt[3]{1.25-x}}$
$n = 7$	1.8907e - 07	2.2089e - 02	1.2764e - 05	1.9527e - 03
$n = 9$	4.3865e - 13	2.4958e - 03	2.6735e - 07	1.1687e - 04
$n = 11$	7.0521e - 13	1.2901e - 02	4.6176e - 08	6.0479e - 05
$n = 13$	3.0953e - 13	1.3966e - 02	1.5952e - 09	6.2851e - 06

3. Convergence of quadrature formulas

Let $\{I_n(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$, $I_n(f) = \sum_{j=1}^n \lambda_{k,n} f(x_{k,n})$, a sequence of interpolatory quadrature formulas with respect to weight function w

Theorem 4 (Steklov) If the weights $\lambda_{k,n} > 0$, $k = 1, \dots, n$, $n \in \mathbb{N}$, then $\{I_n(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$ converges for the functions of $\mathcal{RS}_w([a, b])$.

Corollary 1 (Bounded-Weierstrass) If $\sum_{j=1}^n |\lambda_{k,n}| \leq M$, $\forall n \in \mathbb{N}$. Then, $\{I_n(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$ converges for continuous functions.

Corollary 2 (Jackson-Weierstrass) If $\sum_{j=1}^n |\lambda_{k,n}| \leq Mn^d$, $\forall n \in \mathbb{N}$. Then, $\{I_n(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$ converges for differentiable functions with continuity up to order $d + 1$.

4. Padé approximation

If we denote by $\{I_n^G(f)\}_{n \in \mathbb{N}}$ the sequence of Gauss-Christoffel q.f. and we consider $\{I_n^G(g_z)\}_{n \in \mathbb{N}}$ with $g_z(x) = \frac{1}{z-x}$, we obtain a sequence of rational function $\{R_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ that interpolates Markov function $I(g_z) = \int_a^b \frac{w(x)}{z-x} dx = \hat{w}(z)$ at infinity in the Taylor sense, by Steklov theorem

Theorem 5 The sequence $\{R_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ of Padé Approximants of order n converges to $\hat{w}(z)$ uniformly to compacts subsets of $\mathbb{C} \setminus [a, b]$.

	$n = 5$	$n = 7$	$n = 9$	$n = 11$
$z = -1, 5 + 0, 5i$	1.5816e - 05	2.1954e - 07	3.0474e - 09	4.2301e - 11
$z = 1, 1 - 0, 25i$	3.3932e - 03	2.9532e - 04	2.5719e - 05	2.2396e - 06
$z = i$	1.6093e - 04	4.7372e - 06	1.3945e - 07	4.1051e - 09
$z = -0, 5i$	9.5580e - 03	1.3945e - 03	2.0346e - 04	2.9684e - 05

Table 2: Numerical experiment for $w(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$

References

- [1] G. SZEGO. *Orthogonal Polynomials*, Amer. Math. Soc. Coll. Publ. Vol 23, Amer. Math. Soc. Providence, R.I. 1975
- [2] I. H. SLOAN and W. E. SMITH. *Properties of interpolatory product integration rules*, SIAM J. Numer. Anal., v. 19, 1982, pp.
- [3] W. GAUTSCHI *Orthogonal Polynomials: Computation and Approximation*.