

Ángel Álvarez Paredes

Fórmulas de Cuadratura Generalizadas

Generalized Quadrature Formulas

Trabajo Fin de Grado Grado en Matemáticas La Laguna, Mayo de 2023

> Dirigido por Ruymán Cruz Barroso

Ruymán Cruz Barroso

Departamento de Análisis Matemático Universidad de La Laguna 38200 La Laguna, Tenerife

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a mi familia por su apoyo incondicional durante toda mi vida. Desde el día en que nací, siempre han estado a mi lado, apoyándome en todo lo que he necesitado, incluso en los momentos más difíciles. No podría haber llegado hasta aquí sin su amor y dedicación.

También quiero agradecer a mi pareja, Julia, por su amor, su paciencia y su apoyo constante. Gracias por estar a mi lado en los momentos más estresantes de este último curso, por hacerme sentir que todo es posible y por ser mi mayor motivación.

Un agradecimiento especial a mi profesor Ruymán, por su cercanía y dedicación desde que cursé la asignatura *Métodos Numéricos II*. Gracias por su orientación, su motivación, sus consejos, y por hacerme creer en mis capacidades. Sin duda, no habría podido alcanzar este logro sin su ayuda.

Agradezco también a mi profesora de Bachillerato, Bárbara, por inculcarme su pasión hacia las matemáticas y por su dedicación en enseñarme lo bonito que hay en ellas. Gracias por animarme a escoger este camino y por ser un modelo a seguir.

Por último, quiero agradecer a todos mis amigos, en especial a Alejandro, por su amistad y su compañía durante todos estos años. Gracias por hacer de ellos una experiencia inolvidable.

Sin duda, todos vosotros habéis sido una pieza clave en este camino, y por eso, quiero transmitiros mi más sincero agradecimiento, ya que de una forma u otra habéis contribuido de manera indirecta en la realización de este trabajo de fin de grado.

> Ángel Álvarez Paredes La Laguna, 22 de mayo de 2023

Resumen \cdot Abstract

Resumen

Las Fórmulas de Cuadratura (f.c.) son métodos de Integración Numérica que se emplean para aproximar el valor de una integral dada con respecto a una medida positiva de Borel definida en la región de integración, que en nuestro caso será un intervalo de la recta real. El objetivo fundamental de esta Memoria es abordar una introducción a la Teoría de Fórmulas de Cuadratura Generalizadas (f.c.g.) de Tipo-Gauss, las cuales fueron introducidas por Gautschi en el año 2004, y a diferencia de las clásicas f.c., permiten la aparición de nodos con multiplicidades arbitrarias. Aquí, por f.c. de Tipo-Gauss estamos incluyendo la posibilidad de que ciertos nodos queden fijados de antemano en el interior del intervalo de integración.

Dado que las f.c.g. y f.c. de Tipo-Gauss están íntimamente relacionadas, la Memoria contiene un primer capítulo en el que se abordan la construcción de f.c. de tipo interpolatorio, propiedades de polinomios ortogonales, y caracterización de f.c. de Tipo-Gauss, haciendo un especial énfasis en la computación eficiente de las mismas a partir de las correspondientes matrices de Jacobi.

En el segundo capítulo se aborda la caracterización de f.c.g. de Tipo-Gauss con multiplicidades arbitrarias en los extremos del intervalo de integración. Se lleva a cabo un análisis especial sobre la positividad de los pesos, el estudio de la convergencia y la obtención de estimaciones del error. También se estudia la posibilidad de incluir nodos fijos de antemano en la f.c.g. situados en el interior del intervalo de integración y con multiplicidades arbitrarias pares, algo que hasta donde sabemos, no ha sido estudiado aún en la literatura. Se ha incluido finalmente un ejemplo numérico ilustrativo para la función peso de Chebyshev de primera especie, así como una colección de problemas abiertos relacionados.

Palabras clave: Fórmulas de Cuadratura de Tipo-Gauss – Polinomios Ortogonales – Fórmulas de Cuadratura Generalizadas de Tipo-Gauss – Convergencia y Estimaciones del Error.

Abstract

Quadrature Formulas (q.f.) are methods of Numerical Integration that are used to approximate the numerical value of a given integral with respect to a positive Borel measure defined on the region of integration, that in our case will be an interval of the real line. The main aim of this work is to address an introduction to the Theory of Gauss-Type Generalized Quadrature Formulas (g.q.f.), that were introduced by Gautschi in 2004, and that unlike the classical q.f., they allow the appearance of nodes with arbitrary multiplicities. Here, by Gauss-Type q.f. we include the possibility that certain nodes could be fixed in advance in the interior on the interval of integration.

Since Gauss-Type g.q.f. and q.f. are closely related, this work contains a first chapter where the construction of interpolatory-type q.f., orthogonal polynomials and characterization of Gauss-Type q.f. are addressed, making a special emphasis to the efficient computation of them from the corresponding Jacobi matrices.

The characterization of Gauss-Type g.q.f. with arbitrary multiplicities at the endpoints of the interval of integration is considered in the second chapter. A special analysis of the positivity of the weights, the study of convergence and the obtention of error estimates is carried out. Also, the possibility to include nodes fixed in advance in the g.q.f. located in the interior of the interval of integration with arbitrary even multiplicities is also analyzed, something that, as far as we know, it has not been considered yet in the literature. An illustrative numerical example concerning the Chebyshev weight function of the first kind along with some related open problems are also included.

Keywords: Gauss-Type quadrature formulas – Orthogonal Polynomials – Generalized Gauss-Type quadrature formulas – Convergence and error estimates.

Contenido

Agradecimientos	III
Resumen/Abstract	V
Introducción	IX
 Fórmulas de Cuadratura en el Eje Real 1.1. Fórmulas de Cuadratura de Tipo Interpolatorio 1.2. Polinomios ortogonales 1.3. Fórmulas de Cuadratura de Tipo-Gauss 1.3.1. Polinomios cuasi-ortogonales 1.3.2. Fórmulas de Cuadratura Gaussianas 1.3.3. Fórmulas de Cuadratura de Gauss-Radau 1.3.4. Fórmulas de Cuadratura de Gauss-Lobatto 	$ \begin{array}{c} 1 \\ 8 \\ 11 \\ 13 \\ 15 \\ 18 \\ 23 \end{array} $
 2. Fórmulas de Cuadratura Generalizadas	27 27 34 37 39
A. Anexo A.1. Teorema de Banach-Steinhaus A.2. Problemas abiertos	45 45 46
Bibliografía	49
Poster	51

Introducción

Las Fórmulas de Cuadratura¹ (f.c.) son procedimientos dentro de la Integración Numérica para la obtención del valor aproximado de una integral definida con respecto a una medida positiva de Borel, que para nosotros estará soportada en un intervalo de la recta real. Estas reglas, que consisten en combinaciones lineales apropiadas de valores del integrando, han sido ampliamente estudiadas en la literatura en las últimas décadas. Esta Memoria tiene por finalidad ofrecer una introducción a la Teoría de Fórmulas de Cuadratura Generalizadas (f.c.g.) de Tipo-Gauss, que fueron introducidas por Gautschi en [7] en el año 2004, y a diferencia de las anteriores, han sido muy poco estudiadas a día de hoy, siendo un importante campo de investigación actual dentro de la Teoría de Aproximación.

Dada la íntima relación entre f.c.g. y f.c. de Tipo-Gauss, entendiendo por estas al conjunto de f.c. Gaussianas, de Gauss-Radau y de Gauss-Lobatto, incluyendo la posibilidad de que ciertos nodos queden fijados de antemano en el interior del intervalo de integración, hemos incluido un amplio primer capítulo en el que se abordan los aspectos más trascendentales de estas.

Sin pérdida de generalidad, partimos de una función peso ω definida en un intervalo [a, b] de la recta real. El primer paso es caracterizar las f.c. de tipo interpolatorio, las cuales, sin imponer condición alguna sobre sus nodos salvo que estos sean distintos entre sí y estén localizados en el intervalo de integración, se determinan reemplazando el integrando por el polinomio interpolador a este en los nodos en su forma de Lagrange. Es bien sabido que las f.c. de n puntos de tipo interpolatorio tienen grado de precisión n - 1 (basados en el *Teorema de Aproximación de Weierstrass*, es usual imponer que sean exactas en subespacios de polinomios de dimensión lo más grande posible). Por esta razón, con el objetivo de aumentar el grado de precisión, se hace necesario imponer condiciones a los nodos, es decir, que estos no sean ahora libres, y es aquí donde aparece la íntima relación entre el dominio de exactitud de una f.c. y ciertas condiciones de ortogonalidad que debe cumplir el polinomio nodal (Teorema de

¹ Código 1206.14 dentro de la Nomenclatura Internacional de UNESCO para los campos de Ciencia y Tecnología.

x Introducción

Jacobi). Tras llevar a cabo un estudio de las propiedades más relevantes sobre la *Teoría de Polinomios Ortogonales* en la recta real, concluimos el análisis considerando las f.c. de Tipo-Gauss, que son aquellas que poseen máximo grado de precisión alcanzable. Teniendo siempre en mente los aspectos computacionales, centramos especial atención a la computación eficiente de este tipo de reglas mediante un problema de cálculo de autovalores y autovectores asociado a las correspondientes matrices de Jacobi. Para los casos de Gauss-Radau y Gauss-Lobatto, se explica de manera detallada cómo las matrices de Jacobi asociadas a la función peso ω deben ser adecuadamente perturbadas. Del mismo modo, centramos también especial atención a resultados de convergencia y estimaciones del error, cuestiones siempre fundamentales dentro del Análisis Numérico.

El segundo capítulo de esta Memoria contiene el eje central de la misma: el análisis de las *Fórmulas de Cuadratura Generalizadas*. A diferencia de las f.c. de Tipo-Gauss, estas permiten ahora que los extremos del intervalo de integración sean nodos con multiplicidades arbitrarias. Las posibles aplicaciones de este tipo de fórmulas dentro de la resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias con condiciones de frontera que no solo involucran valores de una función, sino también posiblemente de sus derivadas, o la computación de funciones spline aproximantes en un compacto de la recta real que preserven una sucesión de momentos prefijados, motivaron su estudio desde el año 2004. Se ha constatado, además, que las f.c.g. son especialmente útiles cuando la función a integrar tiene singularidades o comportamientos oscilatorios, permitiendo obtener mejores aproximaciones del valor de la integral en cuestión. Por otro lado, hemos de decir que son muy pocas las contribuciones existentes en la literatura sobre este interesante campo dentro de la *Integración Numérica*.

Nuestro punto de partida son las referencias [7, 8] y [10]. De este modo, caracterizamos las f.c.g. con posibles multiplicidades arbitrarias en los extremos del intervalo de integración, así como la positividad de los pesos, presentando en todos los resultados demostraciones detalladas de los mismos, y ofreciendo también un estudio de la convergencia y estimaciones del error. Además, hemos considerado por primera vez en la literatura, por lo que sabemos, la posibilidad de incluir nodos arbitrarios en el interior del intervalo de integración, con multiplicidades arbitrarias pares. En todos los casos, las f.c.g. que se obtienen se relacionan con f.c. de Tipo-Gauss asociadas a funciones pesos modificadas. Con el fin de ilustrar numéricamente estos resultados, hemos considerado también un ejemplo numérico detallado para la función peso de Chebyshev de primera especie, y cuyos resultados fueron obtenidos haciendo uso del software Matlab.

La Memoria finaliza con un apéndice con dos partes. En el primero se enuncia y se referencia el Teorema de Banach-Steinhaus, el cual fue empleado en la demostración de uno de los resultados de convergencia. En la segunda parte se considera una colección de problemas abiertos relacionados que confiamos que atraigan el interés del lector.

El objetivo principal de esta Memoria es el estudio de las *Fórmulas de Cuadratura Generalizadas*, que consisten en métodos de aproximación de la integral definida de una función dada en las que aparecen ciertos nodos con multiplicidades arbitrarias, a diferencia de las fórmulas de cuadratura clásicas, en las que la multiplicidad de todos los nodos siempre es uno. Sin embargo, antes de afrontar nuestro objetivo, debemos considerar un primer capítulo en el que se aborden aquellas cuestiones sobre fórmulas de cuadratura indispensables para un desarrollo completo y autocontenido del tema en cuestión.

Para ello, comenzaremos este capítulo abordando las *Fórmulas de Cuadratura de Tipo Interpolatorio*. Posteriormente, introduciremos el concepto de *Familias de Polinomios Ortogonales* con respecto a una función peso¹, y daremos a conocer algunas de sus propiedades más importantes. Por último, trataremos las denominadas *Fórmulas de Cuadratura de Tipo-Gauss*, entendiendo por esta terminología a las clásicas fórmulas de cuadratura Gaussianas, de Gauss-Radau y de Gauss-Lobatto.

1.1. Fórmulas de Cuadratura de Tipo Interpolatorio

Una *Fórmula de Cuadratura*² en el eje real consiste en un método de integración numérica para el cálculo aproximado de integrales respecto a una función peso definida en la recta real. El proceso, de gran sencillez conceptual e inspirado en la propia definición de integral de Riemann, consiste en considerar una combinación lineal de valores del integrando.

A priori, podemos pensar que para obtener el valor numérico de $\int_a^b f(x)dx$, basta con obtener una primitiva de f y aplicar el *Teorema Fundamental del*

¹ A pesar de que el desarrollo de esta Memoria podría llevarse a cabo de manera más general considerando una medida positiva de Borel definida en [a, b], nos centraremos por simplicidad en el caso de que esta sea absolutamente continua, restringiéndonos, por tanto, a una función peso.

² De ahora en adelante nos referiremos a *Fórmulas de Cuadratura* como "f.c.", tanto para el singular como para el plural.

Cálculo Integral, o la Regla de Barrow. Sin embargo, a lo largo de este proceso, podemos encontrar múltiples complicaciones que provocan que no podamos conocer el valor exacto de la integral mencionada. Un ejemplo de esto es la función $f(x) = \sin(x^2)$, que no admite una primitiva que podamos expresar como combinación de funciones elementales. Por otro lado, puede darse la situación de que hayamos podido obtener una primitiva, pero que el propio hecho de emplear la Regla de Barrow conlleve errores en la propia evaluación de esta que haga que sea preferible aplicar una f.c., puesto que esta requiere de evaluaciones de la función del integrando. Un ejemplo de esto es $f(x) = \frac{1}{1-4x^4}$, cuya primitiva es

$$F(x) = \int_0^x \frac{1}{1 - 4s^4} ds = \frac{1}{4\sqrt{2}} \ln \left| \frac{2x + \sqrt{2}}{2x - \sqrt{2}} \right| + \frac{1}{2\sqrt{2}} \arctan(\sqrt{2}x)$$

Por un lado, cabe mencionar que desarrollaremos los diversos temas de estudio de esta Memoria sobre un intervalo de integración [a, b], aunque toda esta teoría se puede desarrollar sobre semirrectas e, incluso, en toda la recta real, como podemos observar en la literatura. Por otra parte, apreciamos que podemos factorizar un integrando g como el producto de dos funciones: una que sea suave o regular, denotada como f, y otra que sea no negativa e integrable, que contiene las posibles singularidades próximas al intervalo de integración (conocida como función peso, y denotada por ω en lo que sigue). De este modo,

$$\int_{a}^{b} g(x)dx = \int_{a}^{b} f(x)\omega(x)dx, \ -\infty \le a < b \le \infty.$$

Entonces, motivados por la propia definición de integral de Riemann, entendemos por una f.c. de n nodos a una expresión de la forma:

$$I_w(f) = \int_a^b f(x)\omega(x)dx \approx I_n(f) = \sum_{k=1}^n A_k f(x_k),$$
 (1.1)

donde $\{x_k\}_{k=1}^n$ son los n nodos distintos entre sí, verificando que $a \leq x_1 < x_2 < \ldots < x_n \leq b$, y $\{A_k\}_{k=1}^n$ son los n pesos de la f.c. Nótese que la función $g = f\omega$ debe ser integrable en [a, b]. Además, la función peso ω debe tener soporte en el intervalo de integración [a, b], y debe verificar que $\omega(x) \geq 0$, $\forall x \in [a, b]$, y $\omega > 0$ en $A \subseteq [a, b]$ con $\mu(A) > 0$, siendo μ la medida de Lebesgue.

Una vez que se haya fijado el valor de n en (1.1), la fórmula $I_n(f)$ contiene 2n parámetros: los nodos $\{x_k\}_{k=1}^n$ y los pesos o coeficientes $\{A_k\}_{k=1}^n$. La cuestión ahora es elegir de forma adecuada estas variables, de tal manera que $I_n(f)$ aproxime lo mejor posible a $I_{\omega}(f)$. Dicho de otra manera, debemos minimizar el error

$$E_n(f) = \int_a^b f(x)\omega(x)dx - \sum_{k=1}^n A_k f(x_k) = I_w(f) - I_n(f).$$
(1.2)

En este momento conviene recordar uno de los resultados más importantes en la *Teoría de Aproximación*³:

Teorema 1 (Teorema de Aproximación de Weierstrass) Sean f una función continua en el compacto $[a,b] \subset \mathbb{R}$ y $\epsilon > 0$ dados. Entonces, existe un polinomio p_n (de grado n suficientemente grande) tal que:

$$\| f - p_n \|_{\infty} = \max_{a \le x \le b} |f(x) - p_n(x)| \le \epsilon.$$

Dicho de otra manera, este teorema afirma que toda función que sea continua en un compacto de la recta real puede ser aproximada uniformemente por polinomios. Es decir, los polinomios son densos en el espacio de las funciones continuas definidas en un intervalo compacto [a, b]. Por ende, parece adecuado construir estas fórmulas mediante interpolación polinómica, reemplazando la función fdel integrando en (1.1) por el polinomio interpolador a esta en los n nodos, e integrar a continuación dicho polinomio con respecto al peso ω .

En lo que sigue, denotaremos por $\mathbb{P} = span \{1, x, x^2, x^3, ...\}$ al espacio vectorial de polinomios en una variable con coeficientes en \mathbb{R} . Igualmente, usaremos la siguiente notación para sus subespacios: $\mathbb{P}_k = \{p \in \mathbb{P} / deg(p) \leq k\} =$ $span \{1, x, x^2, ..., x^k\}$, con $k \geq 0$. Nótese que $\mathbb{P}_0 = \mathbb{R}$, es decir, \mathbb{P}_0 está formado por los polinomios constantes.

Supongamos que hemos fijado de manera arbitraria los n nodos en el intervalo [a, b], con la única condición de que sean distintos entre sí, y que calculamos el polinomio de interpolación de f en su forma de Lagrange:

$$f(x) = p(x) + r(x),$$
 (1.3)

siendo r el resto de la interpolación. Si denotamos al polinomio nodal por $\pi_n(x) = \prod_{k=1}^n (x - x_k) \in \mathbb{P}_n$ y por $l_{k,n}(x)$ a los polinomios fundamentales de Lagrange, para todo $k = 1, \ldots, n$, que satisfacen

$$l_{k,n}(x_j) = \delta_{k,j} = \begin{cases} 0, \ si \ k \neq j, \\ 1, \ si \ k = j, \end{cases}$$
(1.4)

donde $\delta_{k,i}$ denota el símbolo delta de Kronecker, entonces

$$p(x) = \sum_{k=1}^{n} l_{k,n}(x) f(x_k) \in \mathbb{P}_{n-1}, \text{ con } l_{k,n}(x) = \frac{\pi_n(x)}{(x - x_k)\pi'_n(x_k)} \in \mathbb{P}_{n-1}.$$
 (1.5)

Luego, integrando en (1.3) con respecto a la función peso ω , se sigue de (1.5) que

 $^{^3}$ Véase una demostración de este resultado, empleando los polinomios de Bernstein, en [5, Capítulo VI].

$$\int_{a}^{b} f(x)\omega(x)dx = \int_{a}^{b} p(x)\omega(x) \, dx + \int_{a}^{b} r(x)\omega(x)dx$$
$$= \sum_{k=1}^{n} f(x_{k}) \underbrace{\int_{a}^{b} \frac{\pi_{n}(x)}{(x-x_{k})\pi_{n}'(x_{k})}\omega(x)dx}_{=A_{k}} + \underbrace{\int_{a}^{b} r(x)\omega(x)dx}_{=E_{n}(f)}.$$
(1.6)

Así, de (1.1), (1.2) y (1.6), obtenemos que los pesos de la f.c. de n puntos deben venir dados por

$$A_{k} = \int_{a}^{b} \frac{\pi_{n}(x)}{(x - x_{k})\pi_{n}'(x_{k})} \omega(x) dx.$$
(1.7)

Podríamos haber decidido elegir los pesos $\{A_k\}_{k=1}^n$ de tal forma que el funcional $E_n(f)$ definido en (1.2) anule a los monomios $1, x, x^2, \ldots, x^{n-1}$. Entonces, es fácil comprobar que estas dos técnicas diferentes son realmente equivalentes (por ejemplo, véase [6, pp. 74-75]).

Proposición 1 Sean $\{x_i\}_{i=1}^n$ n nodos distintos entre sí contenidos en [a, b], fijados de antemano, y ténganse en cuenta las siguientes formas de obtener los pesos A_1, A_2, \ldots, A_n en la f.c. $I_n(f)$ descrita en (1.1):

- Interpolar la función f en los nodos x₁, x₂,..., x_n por un polinomio de grado a lo sumo n - 1 e integrar este polinomio interpolador en [a, b] con respecto a ω.
- Escoger A_1, A_2, \ldots, A_n de forma que el funcional $E_n(f)$ definido en (1.2) se anule, $\forall f \in \mathbb{P}_{n-1}$.

Entonces, estos dos procedimientos para hallar A_1, A_2, \ldots, A_n otorgan la misma solución.

Definición 1 Diremos que una f.c. de n puntos es de Tipo Interpolatorio cuando se obtiene a partir del polinomio interpolador a la función f en los nodos x_1, x_2, \ldots, x_n , elegidos de manera arbitraria, con la única restricción de que sean distintos entre sí y estén situados en el intervalo [a, b]. Además, sus pesos $\{A_k\}_{k=1}^n$ vienen dados por (1.7), y son exactas en \mathbb{P}_{n-1} , un subespacio vectorial de \mathbb{P} de dimensión n (precisamente, el mismo número de parámetros a determinar en la f.c. $I_n(f)$, como cabría esperar).

Asimismo, al hacer uso del polinomio interpolador en su forma de Lagrange podemos encontrar una acotación del error cometido, teniendo en cuenta que es sencillo ver, como aplicación directa del *Teorema del Valor Medio* (véase, por ejemplo, [1]), que el resto de la interpolación polinómica viene dado por

$$r(x) = \frac{f^{(n)}(\xi(x))}{n!} \pi_n(x), \quad \xi(x) \in (a, b).$$
(1.8)

Proposición 2 En las condiciones anteriores, si $f \in C^{(n)}([a, b])$, entonces

$$|E_n(f)| \le \frac{M_n}{n!} \int_a^b |\pi_n(x)| \,\omega(x) dx, \ donde \ M_n = \| f^{(n)} \|_{\infty} = \max_{a \le x \le b} \left| f^{(n)}(x) \right|.$$

Demostración:

De (1.6) se tiene que $E_n(f) = I_{\omega}(f) - I_n(f) = \int_a^b r(x)\omega(x)dx$. Ahora bien, tomando valor absoluto (nótese que la función peso es no negativa en [a, b]) y sustituyendo la expresión de r en (1.8): $|E_n(f)| \leq \frac{1}{n!} \int_a^b |f^{(n)}(\xi(x))| |\pi_n(x)| \omega(x)dx$, con $\xi(x) \in (a, b)$. Luego, teniendo en cuenta la continuidad de $f^{(n)}$ en [a, b]: $|E_n(f)| \leq \frac{M_n}{n!} \int_a^b |\pi_n(x)| \omega(x)dx$, donde $M_n = || f^{(n)} ||_{\infty} = \max_{a < x < b} |f^{(n)}(x)|$.

Definición 2 Una f.c. $I_n(f)$ se dice que tiene grado de precisión j si integra exactamente a cualquier polinomio cuyo grado sea menor o igual que j, y existe un polinomio de grado j + 1 que no es integrado de forma exacta.

Un resultado que se extrae de todo lo mencionado hasta el momento es el siguiente:

Teorema 2 Las f.c. de Tipo Interpolatorio tienen grado de precisión al menos n-1.

Ahora, parece lógico preguntarnos si este grado de precisión puede aumentar si le imponemos alguna condición a los nodos x_1, \ldots, x_n (por el momento, solo hemos impuesto que sean distintos entre sí y localizados en [a, b], intervalo donde está definida la función del integrando). Por ejemplo, supongamos que el grado de precisión de una f.c. de Tipo Interpolatorio fuera igual a n. Observamos en este caso que considerando $f = \pi_n$ (recordamos que π_n denota al polinomio nodal, cuyo grado exacto es n), se tiene que $I_n(\pi_n) = \sum_{k=1}^n A_k \pi_n(x_k) = 0$. Entonces, se verificaría que

$$\int_{a}^{b} \pi_n(x)\omega(x)dx = 0, \qquad (1.9)$$

que no tiene por qué ser cierto en general.

Dado que para el correcto desarrollo de todo lo anterior tan solo hemos impuesto la condición de que los n nodos sean distintos entre sí, podemos cuestionarnos si podríamos obtener una f.c. $I_n(f) = \sum_{j=1}^n A_{j,n} f(x_{j,n})$ que tenga grado de precisión superior a n-1 tomando los n nodos de alguna manera determinada. Además, como una f.c. es, en esencia, un método numérico, la elección de los nodos debe tener en cuenta dos aspectos muy importantes, que no han sido mencionados hasta el momento:

 <u>Estabilidad</u>: Los posibles errores que pudieran aparecer al evaluar cualquier función f deben permanecer acotados.

Sean $\{x_k\}_{k=1}^n$ los *n* nodos de la f.c. $I_n(f)$, y sea $\tilde{f}(x) \approx f(x)$, con $x \in [a, b]$. Supongamos que el error cometido viene dado por $\max_{a \le x \le b} |f(x) - \tilde{f}(x)| = \delta$, con $\delta > 0$. Entonces,

$$\left|I_{\omega}(f) - I_{\omega}(\tilde{f})\right| = \left|\int_{a}^{b} \left[f(x) - \tilde{f}(x)\right]\omega(x)dx\right| \le \int_{a}^{b} \left|f(x) - \tilde{f}(x)\right|\omega(x)dx \le \delta \cdot c_{0},$$

siendo $c_0 = \int_a^b \omega(x) dx > 0$ (véase la Definición 4 más adelante). Análogamente, para la f.c., se tiene que

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

Por tanto, comparando ambas acotaciones, concluimos que debe existir una constante M > 0 que verifique $\sum_{k=1}^{n} |A_k| \leq M$.

• Convergencia: La f.c. $I_n(f)$ debe converger a $I_{\omega}(f)$ para cualquier función f, preferiblemente de la mayor clase de funciones posible. Esto es:

$$\lim_{n \to \infty} I_n(f) = \lim_{n \to \infty} \sum_{k=1}^n A_{k,n} f(x_{k,n}) = \int_a^b f(x) \omega(x) dx = I_\omega(f).$$

El siguiente resultado, cuya demostración podemos ver en [11, pp. 264-265], muestra que estos dos conceptos mencionados son equivalentes en el espacio de las funciones continuas definidas en el intervalo [a, b]:

Teorema 3 Sea ω una función peso definida en [a, b] e $I_n(f) = \sum_{j=1}^n A_{j,n} f(x_{j,n})$ una sucesión de f.c. de Tipo Interpolatorio para $I_{\omega}(f) = \int_a^b f(x)\omega(x)dx$. Entonces, $\lim_{n\to\infty} I_n(f) = I_{\omega}(f), \forall f \in \mathcal{C}([a, b]), si y solo si \exists M > 0$ verificando que $\sum_{j=1}^n |A_{j,n}| \leq M, \forall n \geq 1$.

Ahora bien, retomando la cota del error que manejamos en la Proposición 2, podemos observar que exige gran regularidad en la función f tomada, puesto que una de las hipótesis es que $f \in C^{(n)}([a, b])$ (nótese que para valores n muy grandes esto puede suponer un problema). Por tanto, en el siguiente resultado veremos otra cota del error en el que solo se requiere que la función sea continua en el intervalo [a, b]:

Teorema 4 Dadas una función $f \in C([a,b])$ y una f.c. $I_n(f)$ de n puntos con grado de precisión $m \ge n-1$ y de la forma (1.1), entonces

$$|E_n(f)| \le \left[\int_a^b \omega(x)dx + \sum_{k=1}^n |A_k|\right]\rho_m(f),\tag{1.10}$$

donde $\rho_m(f) = \min_{q \in \mathbb{P}_m} \| f - q \|_{\infty} = \min_{q \in \mathbb{P}_m} \max_{a \le x \le b} |f(x) - q(x)|.$

Demostración:

Sean $f \in C([a, b])$ y p su polinomio interpolador escrito en la forma de Lagrange (véase (1.5)), cuyo grado será a lo sumo n-1, dado que hemos supuesto que la f.c. tiene n nodos distintos entre sí fijados de antemano. Sea también $q \in \mathbb{P}_m$ arbitrario. Entonces, podemos escribir $E_n(f) = I_{\omega}(f) - I_n(f) = I_{\omega}(f) - I_n(q) + I_n(q) - I_n(p)$. Como la f.c. tiene grado de precisión $m \ge n-1$, se tiene que

$$E_n(f) = I_{\omega}(f) - I_{\omega}(q) + I_n(q) - I_n(p) = I_{\omega}(f-q) + I_n(q-p)$$

= $\int_a^b [f(x) - q(x)] \,\omega(x) dx + \sum_{k=1}^n A_k [q(x_k) - f(x_k)].$

Tomando valor absoluto y aplicando la desigualdad triangular:

$$|E_n(f)| = |I_{\omega}(f) - I_n(f)| \le \int_a^b |f(x) - q(x)| \,\omega(x) dx + \sum_{k=1}^n |q(x_k) - f(x_k)| \,|A_k|$$
$$\le ||f - q||_{\infty} \cdot \int_a^b \omega(x) dx + ||f - q||_{\infty} \cdot \sum_{k=1}^n |A_k|.$$

Se sigue que $|E_n(f)| \leq \left[\int_a^b \omega(x) dx + \sum_{k=1}^n |A_k|\right] || f - q ||_{\infty}, \forall q \in \mathbb{P}_m$, deduciendo (1.10).

En general, los pesos $\{A_k\}_{k=1}^n$ de una f.c. no tienen por qué ser valores positivos. Esto último sucede, por ejemplo, con las clásicas f.c. de Newton-Cotes (véase [11, Sección 6.2]). Sin embargo, en el resultado anterior se muestra la importancia de que los pesos de la f.c. sean positivos o, alternativamente, que exista M > 0 independiente de n tal que $\sum_{k=1}^n |A_k| \leq M$. En efecto, como se tiene que $m \geq n-1$ y lím_{$k\to\infty$} $\rho_k(f) = 0$, $\forall f \in C([a, b])$ (por el *Teorema de Aproximación de Weierstrass*), podemos concluir que lím_{$n\to\infty$} $E_n(f) = 0$, $\forall f \in C([a, b])$. Es decir, hemos visto que este tipo de f.c. son convergentes para funciones continuas en el intervalo [a, b]. Asimismo, observamos que si $A_k > 0$, $k = 1, 2, \ldots, n$, la estabilidad (y también la convergencia debido al Teorema 3) está asegurada, dado que, como la f.c. $I_n(f)$ coincide con $I_{\omega}(f)$ para funciones f constantes, se tiene que $\sum_{k=1}^n |A_k| = \sum_{k=1}^n A_k = \int_a^b \omega(x) dx < \infty$. A la vista de estos argumentos, pretendemos construir f.c. con el mayor gra-

A la vista de estos argumentos, pretendemos construir f.c. con el mayor grado de precisión y con pesos positivos. Recordamos que, a lo largo de este capítulo, hemos visto que las f.c. de Tipo Interpolatorio se construyen eligiendo n nodos arbitrarios, distintos entre sí, en el intervalo [a, b], mientras que contamos con npesos a determinar, y que se calculan integrando los polinomios fundamentales de Lagrange en [a, b] con respecto a la función peso ω . Por tanto, de los 2nparámetros libres con los que cuenta una f.c., hemos fijado n de ellos (los nodos), tratando de establecer los otros n (los pesos). Ahora bien, si consideramos

 $f(x) = l_{j,n}^2(x) \in \mathbb{P}_{2n-2}$, siendo $l_{j,n}$ los polinomios fundamentales de Lagrange para todo $j = 1, \ldots, n$, que verifican por construcción la propiedad (1.4), se tiene que $0 < \int_a^b l_{j,n}^2(x)\omega(x)dx = \sum_{k=1}^n l_{j,n}^2(x_k)A_k = A_j$, para $j = 1, 2, \ldots, n$. Como consecuencia directa de lo mencionado, obtenemos el siguiente resultado:

Proposición 3 Una f.c. con grado de precisión mayor o igual a 2n-2 siempre será positiva, es decir, tendrá pesos positivos.

A raíz de esta última proposición, cabe destacar la importancia de considerar f.c. con pesos positivos: el espacio de funciones para las que son convergentes se extiende al espacio de las funciones Riemann-Stieltjes integrables con respecto a ω en [a, b]. El resultado mencionado se conoce en la literatura como *Teorema de Steklov* y su demostración puede verse, por ejemplo, en [11, Sección 12.3].

A continuación, nos cuestionamos la posibilidad de construir f.c. de Tipo Interpolatorio en la que la elección de los nodos no sea arbitraria. Es decir, han de ser tomados de forma que la f.c. tenga el mayor grado de precisión posible. Entonces, en este caso, tendremos un total de 2n parámetros a determinar. Por tanto, a priori, podríamos pensar que el mayor grado de precisión que puede poseer una f.c. es 2n - 1. Dicho de otro modo, esto significa que la f.c. integre exactamente a \mathbb{P}_{2n-1} , cuya dimensión es 2n (coincide con el número de parámetros a determinar). De hecho, es sencillo comprobar que el grado de precisión de una f.c. de n nodos nunca podrá ser 2n. En efecto, si suponemos que la f.c. $I_n(f) = \sum_{j=1}^n A_j f(x_j)$ tiene grado de precisión igual a 2n y tomamos $f(x) = \pi_n^2(x) = \prod_{j=1}^n (x - x_j)^2 \in \mathbb{P}_{2n}$, llegamos a la siguiente contradicción: $I_{\omega}(\pi_n^2) \neq I_n(\pi_n^2)$, pues $I_n(\pi_n^2) = \sum_{j=1}^n A_j \pi_n^2(x_j) = 0$, mientras que $I_{\omega}(\pi_n^2) = \int_a^b \pi_n^2(x) \omega(x) dx > 0$.

Para dar respuesta a la cuestión planteada anteriormente, debemos considerar previamente el estudio de polinomios ortogonales con respecto a la función peso ω en la siguiente sección.

1.2. Polinomios ortogonales

Consideremos el espacio de Hilbert

$$L_2^{\omega}\left([a,b]\right) = \left\{f: [a,b] \to \mathbb{R} \ / \ \int_a^b f^2(x)\omega(x)dx < \infty\right\}.$$

Nótese que, en particular, el espacio \mathbb{P} es un subespacio de $L_2^{\omega}([a, b])$. En efecto, para que tenga sentido la noción de polinomio ortogonal, es necesario que el producto $x^k \omega$ sea integrable en [a, b], con $k \ge 0$. Si [a, b] está acotado, entonces lo anterior es inmediato, dado que x^k es una función acotada. Por otro lado, si [a, b]fuese no acotado, entonces sería necesario imponer la condición de integrabilidad mencionada. **Definición 3** Dada una función peso ω , definimos el producto escalar o producto interior inducido por ω como sigue: $\langle f, g \rangle_{\omega} = \int_{a}^{b} f(x)g(x)\omega(x)dx$, $f, g \in L_{2}^{\omega}([a,b])$. A su vez, la norma inducida por este producto interior viene dada por $\parallel f \parallel_{\omega} = \sqrt{\langle f, f \rangle_{\omega}} = \sqrt{\int_{a}^{b} f^{2}(x)\omega(x)dx}$.

Observamos que este producto interior es definido positivo, y se verifica $\langle f, g \rangle_{\omega} = \langle g, f \rangle_{\omega}, \forall f, g \in L_2^{\omega}([a, b]).$

Definición 4 Definimos como k-ésimo momento respecto de la función peso ω a $c_k = \langle x^k, 1 \rangle_{\omega} = \langle 1, x^k \rangle_{\omega} = \int_a^b x^k \omega(x) dx.$

Claramente, por ser ω una función peso, se verifica que $c_0 > 0$. En el caso de que $c_0 = 1$, diremos que ω se trata de una medida de probabilidad.

Definición 5 Decimos que $\{q_k\}_{k=0}^{\infty}$ es una sucesión de polinomios ortogonales respecto a la función peso ω si se cumple que:

1. $q_k \in \mathbb{P}_k \setminus \mathbb{P}_{k-1}$, es decir, $\forall k \in \mathbb{N} : deg(q_k) = k$. 2. $\langle q_i, q_j \rangle_{\omega} = 0$ si y solo si $i \neq j$.

Nótese que la familia $\{q_k\}_{k=0}^{\infty}$ se puede obtener aplicando el método de ortogonalización de Gram-Schmidt a la sucesión de monomios $\{1, x, x^2, x^3, ...\}$. Entonces, se tiene que es única, salvo constante multiplicativa. Cabe destacar que, en función de cómo tomemos dicha contante, podremos obtener dos familias particulares:

- Sucesión de polinomios ortogonales mónicos, que denotaremos por $\{p_k\}_{k=0}^{\infty}$.
- Sucesión de polinomios ortonormales, a los que nos referiremos como $\{\tilde{p}_n\}_{n=0}^{\infty}$, cuando se cumpla $\langle \tilde{p}_i, \tilde{p}_j \rangle_{\omega} = \delta_{i,j}$, siendo $\delta_{i,j}$ el símbolo delta de Kronecker, que fue definido en (1.4).

Es inmediato ver que estas familias están relacionadas: $\tilde{p}_n = \frac{p_n}{\|p_n\|_{\omega}}, \forall n \in \mathbb{N}.$

Seguidamente, vamos a exponer algunas propiedades que satisfacen las familias de polinomios ortogonales. Sin embargo, no abordaremos ninguna prueba, puesto que ya han sido objeto de estudio a lo largo del Grado en Matemáticas.

Teorema 5 (Ley de recurrencia, familia mónica) Sea $\{p_n\}_{n=0}^{\infty}$ la familia de polinomios ortogonales mónicos para la función peso ω . Entonces,

$$p_{n+1}(x) = (x - \alpha_n) p_n(x) - \beta_n p_{n-1}(x), \quad \forall n \ge 0,$$

donde $p_{-1}(x) \equiv 0$, $p_0(x) \equiv 1$ y

$$\alpha_n = \frac{\langle xp_n, p_n \rangle_{\omega}}{\langle p_n, p_n \rangle_{\omega}}, \ \forall n \ge 0, \quad \beta_m = \frac{\langle p_m, p_m \rangle_{\omega}}{\langle p_{m-1}, p_{m-1} \rangle_{\omega}} > 0, \ \forall m \ge 1.$$

Teorema 6 (Ley de recurrencia, familia ortonormal) Sea $\{\tilde{p}_n\}_{n=0}^{\infty}$ la familia de polinomios ortonormales para la función peso ω . Entonces,

$$\tilde{p}_{n+1}(x) = (\gamma_n x - \delta_n) \,\tilde{p}_n(x) - \eta_n \tilde{p}_{n-1}(x), \quad \forall n \ge 0, \tag{1.11}$$

donde $\tilde{p}_{-1}(x) \equiv 0$, $\tilde{p}_0(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{c_0}} y$

$$\begin{split} \gamma_n &= \sqrt{\frac{\langle p_n, p_n \rangle_{\omega}}{\langle p_{n+1}, p_{n+1} \rangle_{\omega}}} > 0, \quad \delta_n = \frac{\langle x p_n, p_n \rangle_{\omega}}{\sqrt{\langle p_n, p_n \rangle_{\omega} \cdot \langle p_{n+1}, p_{n+1} \rangle_{\omega}}}, \quad \forall n \ge 0, \\ \eta_m &= \frac{\langle p_m, p_m \rangle_{\omega}}{\sqrt{\langle p_{m-1}, p_{m-1} \rangle_{\omega} \cdot \langle p_{m+1}, p_{m+1} \rangle_{\omega}}}, \quad \forall m \ge 1. \end{split}$$

Teorema 7 (Localización de ceros) Sea q_n un n-ésimo polinomio ortogonal para la función peso ω . Entonces, q_n tiene exactamente n raíces reales y simples en el intervalo abierto (a, b).

Teorema 8 (Entrelazamiento de los ceros) Sea $\{q_n\}_{n=0}^{\infty}$ una familia de polinomios ortogonales para la función peso ω . Entonces, se tiene que entre dos ceros de q_n siempre existe un cero de q_{n+1} : si $\{x_{i,n}\}_{i=1}^n$ son los ceros de q_n , entonces $x_{1,n+1} < x_{1,n} < x_{2,n+1} < x_{2,n} < \cdots < x_{n,n+1} < x_{n,n} < x_{n+1,n+1}$.

Para concluir esta subsección, veremos un método más eficiente que el habitual para calcular los ceros de polinomios ortogonales. Para ello, retomamos la ley de recurrencia a tres términos para la familia de polinomios ortonormales que hemos visto en (1.11) y definimos las siguientes cantidades: $a_n = \frac{1}{\gamma_{n-1}} > 0$ y $b_n = \frac{\delta_n}{\gamma_n}$. Apreciamos que podemos reescribir la ley de recurrencia como sigue:

$$x\mathbf{P}(x) = J_n\mathbf{P}(x) + a_n\tilde{p}_n(x)e_n, \qquad (1.12)$$

siendo

$$J_{n} = \begin{pmatrix} b_{0} & a_{1} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{1} & b_{1} & a_{2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{2} & b_{2} & a_{3} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n-2} & b_{n-2} & a_{n-1} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & a_{n-1} & b_{n-1} \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{P}(x) = \begin{pmatrix} \tilde{p}_{0}(x) \\ \tilde{p}_{1}(x) \\ \vdots \\ \tilde{p}_{n-2}(x) \\ \tilde{p}_{n-1}(x) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n}, \qquad e_{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n}.$$
(1.13)

Nótese que la matriz tridiagonal J_n , denominada en la literatura como matriz de Jacobi, tiene dimensión n y es simétrica. Sea ahora x_j el j-ésimo cero de \tilde{p}_n con $j \in \{1, \ldots, n\}$, esto es, $\tilde{p}_n(x_j) = 0$. Luego, haciendo $x = x_j$, se comprueba que $x_j \mathbf{P}(x_j) = J_n \mathbf{P}(x_j)$. Observamos que $\tilde{p}_0(x_j) = \frac{1}{\sqrt{c_0}} > 0$ y, por el teorema de entrelazamiento de ceros, $\tilde{p}_{n-1}(x_j) \neq 0$. Entonces,

$$\mathbf{P}(x_j) = \begin{pmatrix} \tilde{p}_0(x_j) \\ \tilde{p}_1(x_j) \\ \vdots \\ \tilde{p}_{n-2}(x_j) \\ \tilde{p}_{n-1}(x_j) \end{pmatrix} \neq \vec{0}, \qquad j \in \{1, \dots, n\}.$$

Por tanto, los ceros de \tilde{p}_n serán los autovalores de la matriz J_n . Además, la norma euclídea del autovector $\mathbf{P}(x_j)$ asociado al autovalor x_j es: $\| \mathbf{P}(x_j) \|_2^2 = \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{p}_k^2(x_j)$. De esta manera, la primera componente del autovector normalizado asociado a x_j se determina como

$$\frac{\tilde{p}_0(x_j)}{\|\mathbf{P}(x_j)\|_2} = \frac{1}{\sqrt{c_0 \cdot \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{p}_k^2(x_j)}}.$$
(1.14)

De esta forma, apreciamos que el cálculo de los ceros de un polinomio ortogonal puede llevarse a cabo mediante un problema de cálculo de autovalores que, desde un punto de vista numérico, es mucho más eficiente. Además, la relación (1.14) será de gran utilidad en la próxima sección.

Una vez hemos hecho un breve estudio acerca de las familias ortogonales con respecto a una función peso, estamos ya en condiciones de dar respuesta a la cuestión planteada al término de la primera sección. Por ello, damos paso al análisis de las *Fórmulas de Cuadratura de Tipo-Gauss*.

1.3. Fórmulas de Cuadratura de Tipo-Gauss

Damos comienzo a esta sección preguntándonos si es posible que existan n nodos distintos entre sí en el intervalo (a, b), $\{x_k\}_{k=1}^n$, de forma que la f.c. $I_n(f) = \sum_{k=1}^n A_k f(x_k)$ tenga grado de precisión n + l, donde $n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ y $l \in \mathbb{N}$. Recordemos que el caso l = 0 se ha considerado ya previamente, dando lugar a la condición (1.9), y también se demostró que l < n al final de la Sección 1.1; es decir, debe ser que $0 \le l \le n-1$. Ahora bien, observamos que la cuestión planteada proporcionaría un sistema no lineal de n + l + 1 ecuaciones con 2nincógnitas, $\{x_k\}_{k=1}^n$ y $\{A_k\}_{k=1}^n$, a calcular:

$$\sum_{k=1}^{n} A_k x_k^r = c_r \quad , \quad r = 0, 1, \dots, n+l.$$
(1.15)

En lugar de afrontar directamente el sistema (1.15), buscaremos ciertas condiciones que ha de cumplir el polinomio nodal $\pi_n(x) = \prod_{k=1}^n (x - x_k)$. Comenzamos demostrando el siguiente resultado fundamental:

Teorema 9 (Jacobi) Sean ω una función peso en [a, b] e $I_n(f) = \sum_{k=1}^n A_k f(x_k)$ una f.c. de n puntos para $I_{\omega}(f) = \int_a^b f(x)\omega(x)dx$. Entonces, $I_n(f)$ tiene grado de precisión n + l, con $0 \le l \le n - 1$, si y sólo si,

- 1. $I_n(f)$ es de Tipo Interpolatorio.
- 2. El polinomio nodal π_n verifica que

$$\int_{a}^{b} x^{j} \pi_{n}(x) \omega(x) dx = 0, \qquad j = 0, 1, \dots, l.$$
 (1.16)

Demostración:

Vamos a demostrar este teorema probando cada implicación por separado: " \Rightarrow " Supongamos primero que $I_n(f) = I_{\omega}(f), \forall f \in \mathbb{P}_{n+l}$, donde $l \in \{0, \ldots, n-1\}$. Entonces, en particular, $I_n(f)$ es exacta en \mathbb{P}_{n-1} , es decir, tiene grado de precisión n-1. Esto implica que, por el Teorema 2, la f.c. $I_n(f)$ es de Tipo Interpolatorio. Si consideramos ahora $Q \in \mathbb{P}_l$ arbitrario, se sigue que $\pi_n Q \in \mathbb{P}_{n+l}$, por lo que $I_n(\pi_n Q) = I_{\omega}(\pi_n Q)$, donde π_n denota el polinomio nodal. Como $\pi_n(x_k) = 0, \ k = 1, \ldots, n$, se tiene que $I_n(\pi_n Q) = 0$. Luego, $0 = I_{\omega}(\pi_n Q) = \int_a^b \pi_n(x)Q(x)\omega(x)dx = \langle \pi_n, Q \rangle_{\omega}$. Por tanto, se verifica que $\pi_n \perp \mathbb{P}_l$, es decir, se cumplen las condiciones (1.16).

" \Leftarrow " Supongamos a continuación que $I_n(f)$ es de Tipo Interpolatorio y que se satisface (1.16). Si $f \in \mathbb{P}_{n+l}$, por el *Teorema de la División Euclídea* sabemos que existen $Q \in \mathbb{P}_l$ y $r \in \mathbb{P}_{n-1}$ tales que $f(x) = Q(x)\pi_n(x) + r(x)$. Así,

$$I_{\omega}(f) = \int_{a}^{b} f(x)\omega(x)dx = \underbrace{\int_{a}^{b} \pi_{n}(x)Q(x)\omega(x)dx}_{=0, \text{ por hipótesis}} + \int_{a}^{b} r(x)\omega(x)dx$$

Igualmente, por el Teorema 2, la f.c. $I_n(f)$ tiene al menos grado de precisión n-1, puesto que esta es de Tipo Interpolatorio por hipótesis. Por tanto, observando que $r \in \mathbb{P}_{n-1}$ y $f(x_k) = r(x_k), \ k = 1, \ldots, n$, podemos escribir:

$$\int_{a}^{b} r(x)\omega(x)dx = I_{n}(r) = \sum_{j=1}^{n} A_{j}r(x_{j}) = \sum_{j=1}^{n} A_{j}f(x_{j}) = I_{n}(f).$$

Luego, concluimos que $I_n(f) = I_{\omega}(f), \forall f \in \mathbb{P}_{n+l}$.

Podemos apreciar que las condiciones (1.16) se traducen en $\langle x^j, \pi_n(x) \rangle_{\omega} = 0, j = 0, 1, \ldots, l$, o lo que es lo mismo: $\pi_n(x) \perp \mathbb{P}_l$. Asimismo, expresando π_n como una combinación lineal de una familia $\{p_k\}_{k=0}^n$ de polinomios ortogonales en el intervalo [a, b] con respecto a la función peso ω (nótese que, en particular, se trata de una base de \mathbb{P}_n), y a partir de la condición de ortogonalidad (1.16) se deduce (véase el Teorema 10 a continuación) que deben existir escalares $\alpha_{l+1}, \ldots, \alpha_n$ tales que

1.3 Fórmulas de Cuadratura de Tipo-Gauss 13

$$\pi_n(x) = \sum_{j=l+1}^n \alpha_j p_j(x).$$
 (1.17)

La expresión (1.17) motiva introducir brevemente en la siguiente subsección el concepto de polinomio cuasi-ortogonal, así como algunas de sus propiedades más elementales, que necesitaremos posteriormente de cara al estudio de las f.c. Tipo-Gauss.

1.3.1. Polinomios cuasi-ortogonales

Del Teorema 9 podemos observar que para construir una f.c. de n nodos con grado de precisión n + l, con $l \in \{0, 1, ..., n - 1\}$, el polinomio nodal debe verificar (1.16). Es ahí donde reside la trascendencia de la siguiente definición:

Definición 6 Un polinomio $Q_{n,r} \in \mathbb{P}_n \setminus \mathbb{P}_{n-1}$ se denomina cuasi-ortogonal de grado exacto n y de orden exacto r, con $0 \leq r \leq n$, con respecto a la función peso ω si $Q_{n,r} \perp \mathbb{P}_{n-1-r} y \langle Q_{n,r}, x^{n-r} \rangle_{\omega} \neq 0$.

Nótese que, en particular, si r = 0, entonces $Q_{n,0}$ coincide exactamente con un *n*-ésimo polinomio ortogonal con respecto de la función peso ω en [a, b]. Además, en ningún caso se puede tener que r > n, puesto que el polinomio cuasi-ortogonal de grado n y de orden r está definido solo para $n \ge r$ (si no, la anterior definición no tendría ningún sentido). Asimismo, si n = r, se tendría que $Q_{n,n}$ debe verificar que $Q_{n,n} \perp \mathbb{P}_{-1}$, donde entendemos $\mathbb{P}_{-1} = \emptyset$; es decir, $Q_{n,n}$ no cumple ninguna condición de ortogonalidad.

El siguiente resultado, que será de vital importancia en lo que sigue, establece cómo podemos caracterizar los polinomios cuasi-ortogonales en función de los respectivos polinomios ortogonales:

Teorema 10 Sea $\{p_k\}_{k=0}^n$ la familia de polinomios ortogonales mónicos con respecto a la función peso ω definida en [a, b]. Un polinomio mónico $Q_{n,r} \in \mathbb{P}_n \setminus \mathbb{P}_{n-1}$ es cuasi-ortogonal de orden exacto r, con $0 \leq r \leq n$, si y solo si existen $a_1, a_2, \ldots, a_{n-r} \in \mathbb{R}$, con $a_{n-r} \neq 0$, tales que

$$Q_{n,r} = p_n + a_{n-1}p_{n-1} + \dots + a_{n-r}p_{n-r}.$$
 (1.18)

Demostración:

Vamos a demostrar este teorema probando cada implicación por separado: " \Rightarrow " Sea $\{p_k\}_{k=0}^n$ la familia de polinomios ortogonales mónicos con respecto a la función peso ω definida en [a, b] y, por tanto, una base del espacio \mathbb{P}_n . Entonces, podemos escribir $Q_{n,r} = p_n + a_{n-1}p_{n-1} + \cdots + a_0p_0$, donde $a_0, \ldots, a_{n-1} \in \mathbb{R}$. Dado que $Q_{n,r}$ es un polinomio cuasi-ortogonal de orden r por hipótesis, se tiene que $Q_{n,r} \perp \mathbb{P}_{n-r-1}$. Esto es, si $t \in \{0, 1, \ldots, n-r-1\}$:

$$0 = \langle Q_{n,r}, x^t \rangle_{\omega} = \langle p_n, x^t \rangle_{\omega} + a_{n-1} \langle p_{n-1}, x^t \rangle_{\omega} + \dots + a_0 \langle p_0, x^t \rangle_{\omega}.$$

Por otra parte, si $k \in \{0, \ldots, n\}$:

$$\langle p_k, x^k \rangle_{\omega} = \langle p_k, p_k + x^k - p_k \rangle_{\omega} = \langle p_k, p_k \rangle_{\omega} - \langle p_k, x^k - p_k \rangle_{\omega} = \langle p_k, p_k \rangle_{\omega} = || p_k ||_{\omega}^2 > 0.$$

Por tanto,

- $t = 0 \Rightarrow 0 = a_0 \langle p_0, x^0 \rangle_\omega = a_0 \parallel p_0 \parallel^2_\omega = a_0 \cdot c_0 \Rightarrow a_0 = 0.$ • $t = 1 \Rightarrow 0 = a_1 \langle p_1, x \rangle_\omega = a_1 \parallel p_1 \parallel^2_\omega \Rightarrow a_1 = 0.$: • $t = n - r - 1 \Rightarrow 0 = a_{n-r-1} \langle p_{n-r-1}, x^{n-r-1} \rangle_\omega = a_{n-r-1} \parallel p_{n-r-1} \parallel^2_\omega \Rightarrow$
- $t = n r 1 \Rightarrow 0 = a_{n-r-1} \langle p_{n-r-1}, x^{n-r-1} \rangle_{\omega} = a_{n-r-1} \parallel p_{n-r-1} \parallel_{\omega}^{2} \Rightarrow a_{n-r-1} = 0.$

Así, hemos comprobado que $Q_{n,r} = p_n + a_{n-1}p_{n-1} + \cdots + a_{n-r}p_{n-r}$. Asimismo, como el orden de cuasi-ortogonalidad es exactamente r, se deduce inmediatamente que $a_{n-r} \neq 0$:

$$0 \neq \langle Q_{n,r}, x^{n-r} \rangle_{\omega} = a_{n-r} \cdot \langle p_{n-r}, x^{n-r} \rangle_{\omega} = a_{n-r} \cdot \parallel p_{n-r} \parallel_{\omega}^2 \Rightarrow a_{n-r} \neq 0.$$

" \Leftarrow " Sea $Q_{n,r} = p_n + a_{n-1}p_{n-1} + \dots + a_{n-r}p_{n-r}$, donde $a_1, a_2, \dots, a_{n-r} \in \mathbb{R}$, con $a_{n-r} \neq 0$. Sea también $t \in \{0, 1, \dots, n-r-1\}$. Entonces:

$$\langle Q_{n,r}, x^t \rangle_{\omega} = \langle p_n + a_{n-1}p_{n-1} + \dots + a_{n-r}p_{n-r}, x^t \rangle_{\omega}$$

= $\langle p_n, x^t \rangle_{\omega} + a_{n-1} \langle p_{n-1}, x^t \rangle_{\omega} + \dots + a_{n-r} \langle p_{n-r}, x^t \rangle_{\omega} = 0.$

Concluimos que $Q_{n,r} \perp \mathbb{P}_{n-1-r}$, y, como $a_{n-r} \neq 0$, se tiene que $\langle Q_{n,r}, x^{n-r} \rangle_{\omega} \neq 0$, por lo que el orden de cuasi-ortogonalidad es exactamente r.

De los teoremas 9 y 10 deducimos que para construir una f.c. cuyo grado de precisión sea n + l, con $0 \le l \le n - 1$ debemos considerar como polinomio nodal a $Q_{n,n-1-l} = p_n + a_{n-1}p_{n-1} + \cdots + a_{l+1}p_{l+1}$. Sin embargo, garantizaremos la existencia de tal f.c. siempre que todos los ceros de $Q_{n,n-1-l}$ se sitúen en (a, b)y sean distintos entre sí. El siguiente resultado fundamental, que generaliza el Teorema 7, establece una conexión entre el orden de cuasi-ortogonalidad y el número de ceros en (a, b) distintos entre sí.

Teorema 11 (Localización de ceros de polinomios cuasi-ortogonales)

Un polinomio $Q_{n,r}$ cuasi-ortogonal de orden r y grado n con respecto a la función peso ω definida en [a,b], $Q_{n,r} \in \mathbb{P}_n \setminus \mathbb{P}_{n-1}$, posee al menos n-r ceros distintos entre sí en (a,b).

Demostración:

Sea $\{\alpha_i\}_{i=1}^m \subset (a, b)$ el conjunto de puntos donde $Q_{n,r}$ cambia de signo en (a, b), que podría ser a priori el conjunto vacío (m = 0). Si definimos $q_m(x) = \prod_{i=1}^m (x - \alpha_i) \in \mathbb{P}_m \setminus \mathbb{P}_{m-1}$, con $q_m \equiv 1$ si m = 0, para ver que $Q_{n,r}$ tiene al menos n-r ceros distintos en (a,b), debemos comprobar que $m \ge n-r$. Para ello, supongamos por reducción al absurdo, que m < n - r. Entonces, $Q_{n,r} = (x - \alpha_1) \dots (x - \alpha_m)(x - \beta_1) \dots (x - \beta_{n-m})$, donde β_i podría coincidir eventualmente con algún α_i , donde $i = 1, \ldots, m$ y $j = 1, \ldots, n - m$. Luego, podemos escribir $Q_{n,r}(x) \cdot q_m(x) = (x - \alpha_1)^2 \dots (x - \alpha_m)^2 (x - \beta_1) \dots (x - \beta_{n-m}).$ Dado que $Q_{n,r}$ y q_m cambian de signo en (a, b) únicamente en los mismos valores, podemos afirmar que $Q_{n,r} \cdot q_m$ posee signo constante en el intervalo (a, b). Entonces, $\int_a^b Q_{n,r}(x)q_m(x)\omega(x)dx \neq 0$. Por otro lado, como sabemos por hipótesis que $Q_{n,r}$ es un polinomio cuasi-ortogonal de orden r, tenemos que $Q_{n,r} \perp \mathbb{P}_{n-r-1}$. Además, habíamos supuesto que m < n - r, por lo que $\langle Q_{n,r}, q_m \rangle_{\omega} = 0$, esto es, $\int_{a}^{b} Q_{n,r}(x)q_{m}(x)\omega(x)dx = 0$. De esta forma, hemos llegado a un absurdo, ocasionado al haber supuesto que m < n - r. Luego, concluimos que $m \ge n - r$, es decir, $Q_{n,r}$ tiene al menos n-r ceros distintos en (a, b).

Asimismo, también existe una ley de recurrencia para polinomios cuasiortogonales que generaliza los Teoremas 5 y 6, véase por ejemplo [4].

Estamos ya en condiciones de realizar un estudio trascendente en relación a los casos maximales l = n - 1, n - 2, n - 3 en el Teorema 9, que tienen como resultado a las denominadas f.c. Gaussianas, f.c. de Gauss-Radau y f.c. de Gauss-Lobatto, respectivamente. Todo ello, con vistas a un posterior estudio acerca de las f.c. generalizadas, que son el objetivo principal de esta Memoria.

1.3.2. Fórmulas de Cuadratura Gaussianas

Comenzamos esta subsección tomando el caso l = n - 1 en el Teorema 9, obteniendo así una caracterización de la existencia y unicidad de las conocidas Fórmulas de Cuadratura Gaussianas:

Corolario 1 Una f.c. de n puntos $I_n(f) = \sum_{k=1}^n A_k f(x_k)$ tiene grado de precisión 2n - 1 si y solo si

- $I_n(f)$ es de Tipo Interpolatorio.
- El polinomio nodal es un n-ésimo polinomio ortogonal con respecto a ω en [a, b].

Por tanto, las f.c. Gaussianas, de la forma (1.1), tienen el mayor grado de precisión posible, que es 2n - 1. Además, por la Proposición 3, sabemos que los pesos de estas f.c. serán positivos. Para su construcción, basta considerar como los nodos, $\{x_k\}_{k=1}^n$, a los ceros del polinomio *n*-ésimo polinomio ortogonal mónico con respecto a la función peso ω en [a, b], que, equivalentemente, se

pueden obtener eficientemente como los autovalores de la matriz de Jacobi J_n (véase (1.13)). Para calcular también los pesos $\{A_k\}_{k=1}^n$ mediante un problema de cálculo de autovalores y autovectores, tan solo debemos tener en cuenta que π_n coincide, salvo factor multiplicativo, con el *n*-ésimo polinomio ortonormal \tilde{p}_n , y, por tanto, la expresión dada en (1.7) es equivalente a

$$A_k = \int_a^b \frac{\tilde{p}_n(x)}{(x - x_k)\tilde{p}'_n(x_k)} \omega(x) dx.$$
(1.19)

Ahora bien, retomando la ley de recurrencia a tres términos para la familia de polinomios ortonormales (Teorema 6), y recordando cómo habíamos tomado anteriormente las cantidades a_n y b_n : $a_n = \frac{1}{\gamma_{n-1}} > 0$ y $b_n = \frac{\delta_n}{\gamma_n}$; si multiplicamos a ambos lados de la ley de recurrencia por a_n , entonces podemos escribir $x\tilde{p}_n(x) = a_{n+1}\tilde{p}_{n+1}(x) + b_n\tilde{p}_n(x) + a_n\tilde{p}_{n-1}(x)$. Multiplicando ahora a ambos lados por $\tilde{p}_n(y)$, obtenemos que

$$x\tilde{p}_{n}(x)\tilde{p}_{n}(y) = a_{n+1}\tilde{p}_{n+1}(x)\tilde{p}_{n}(y) + b_{n}\tilde{p}_{n}(x)\tilde{p}_{n}(y) + a_{n}\tilde{p}_{n-1}(x)\tilde{p}_{n}(y)$$

y si intercambiamos las variables $x \in y$,

$$y\tilde{p}_{n}(x)\tilde{p}_{n}(y) = a_{n+1}\tilde{p}_{n+1}(y)\tilde{p}_{n}(x) + b_{n}\tilde{p}_{n}(x)\tilde{p}_{n}(y) + a_{n}\tilde{p}_{n-1}(y)\tilde{p}_{n}(x).$$

Por último, si restamos las dos expresiones anteriores, con $x \neq y$, entonces

$$(x-y)\tilde{p}_{n}(x)\tilde{p}_{n}(y)$$

= $a_{n+1}[\tilde{p}_{n+1}(x)\tilde{p}_{n}(y) - \tilde{p}_{n}(x)\tilde{p}_{n+1}(y)] - a_{n}[\tilde{p}_{n}(x)\tilde{p}_{n-1}(y) - \tilde{p}_{n-1}(x)\tilde{p}_{n}(y)].$

Aplicando el sumatorio desde k = 0 a n - 1 a ambos miembros de esta igualdad, y teniendo en cuenta que el miembro derecho se corresponde a una serie telescópica, se sigue que

$$\sum_{k=0}^{n-1} \tilde{p}_k(x) \tilde{p}_k(y) = a_n \frac{\tilde{p}_n(x)\tilde{p}_{n-1}(y) - \tilde{p}_{n-1}(x)\tilde{p}_n(y)}{x-y}, \quad x \neq y.$$
(1.20)

Cabe mencionar que esta última igualdad se conoce en la literatura como *Identidad de Christoffel-Darboux para el núcleo reproductor*. Sustituyendo $y = x_k$ en (1.20) se tiene inmediatamente que

$$\sum_{s=0}^{n-1} \tilde{p}_s(x)\tilde{p}_s(x_k) = a_n \frac{\tilde{p}_n(x)\tilde{p}_{n-1}(x_k)}{x - x_k}.$$
(1.21)

Multiplicando en ambos lados por $\omega(x)$, integrando en [a, b], y teniendo en cuenta la linealidad de este operador, llegamos a

1.3 Fórmulas de Cuadratura de Tipo-Gauss 17

$$\sum_{s=0}^{n-1} \left[\tilde{p}_s(x_k) \cdot \int_a^b \tilde{p}_s(x)\omega(x)dx \right] = a_n \tilde{p}_{n-1}(x_k) \int_a^b \frac{\tilde{p}_n(x)}{x - x_k} \omega(x)dx.$$
(1.22)

Usando las condiciones de ortogonalidad, como $\int_a^b \tilde{p}_s(x)\omega(x)dx = \langle \tilde{p}_s(x), 1 \rangle = 0$, $\forall s \ge 1$, se sigue que el lado de la izquierda en (1.22) coincide con

$$\tilde{p}_0(x_k) \cdot \int_a^b \tilde{p}_0(x)\omega(x)dx = \frac{1}{\sqrt{c_0}} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_0}} \cdot \int_a^b \omega(x)dx = \frac{1}{c_0} \cdot c_0 = 1$$

y se tiene entonces que $1 = a_n \tilde{p}_{n-1}(x_k) \int_a^b \frac{\tilde{p}_n(x)}{x-x_k} \omega(x) dx$. Luego, de (1.19) se tiene que $A_k = [a_n \tilde{p}'_n(x_k) \tilde{p}_{n-1}(x_k)]^{-1}$. Haciendo tender x a x_k y aplicando la *Regla de L'Hôpital* en (1.21):

$$\sum_{k=0}^{n-1} \tilde{p}_k^2(x_k) = a_n \left[\tilde{p}_n'(x_k) \tilde{p}_{n-1}(x_k) - \tilde{p}_{n-1}'(x_k) \tilde{p}_n(x_k) \right].$$
(1.23)

A partir de (1.23) concluimos que $\sum_{s=0}^{n-1} \tilde{p}_s^2(x_k) = a_n \tilde{p}'_n(x_k) \tilde{p}_{n-1}(x_k) = A_k^{-1}$, es decir, los pesos de las f.c. Gaussianas se computan como $A_k^{-1} = \sum_{s=0}^{n-1} \tilde{p}_s^2(x_k) > 0$. Finalmente, y recordando (1.14), podemos afirmar que si v_k denota la primera componente del autovector normalizado asociado al autovalor x_k de la matriz de Jacobi J_n , entonces $v_k^2 = \frac{A_k}{c_0}$. En el caso de que la medida es de probabilidad, el peso A_k coincide con el cuadrado de la primera componente del autovector normalizado asociado al autovalor J_n .

A modo de conclusión, podemos apreciar que el cómputo de las f.c. Gaussianas queda eficientemente caracterizado en términos del problema del cálculo de autovalores y autovectores correspondientes en la matriz de Jacobi J_n :

Teorema 12 Sean $I_n(f)$ la f.c. Gaussiana de n puntos para $I_{\omega}(f)$ según (1.1) y J_n la matriz de Jacobi definida en (1.13). Entonces, los nodos $\{x_k\}_{k=1}^n$ coinciden con los autovalores de J_n y los pesos $\{A_k\}_{k=1}^n$ vienen dados por $A_k = v_k^2 \cdot c_0, \forall k \in \{1, 2, ..., n\}$, donde v_k es la primera componente del autovector normalizado asociado al autovalor x_k , para todo k = 1, ..., n.

Seguidamente, abordaremos la estimación del error (1.2) para este tipo de f.c. Recordemos que podemos hacer uso de la Proposición 2 de manera general. Sin embargo, dado que las f.c. Gaussianas son exactas en \mathbb{P}_{2n-1} , podemos mejorar esta estimación para el error cometido considerando el polinomio interpolador de Hermite de f, que denotaremos por $H_{2n-1}(f; \cdot) \in \mathbb{P}_{2n-1}$, y que interpola a la función y su primera derivada en los nodos $\{x_k\}_{k=1}^n$. Es fácil comprobar en este caso que si $f \in C^{(2n)}([a, b])$, entonces (1.8) se convierte en

$$f(x) - H_{2n-1}(f;x) = \frac{f^{(2n)}(\mu)}{(2n)!} \pi_n^2(x), \text{ con } \mu = \mu(x) \in [a,b],$$

donde $\pi_n(x) = \prod_{k=1}^n (x - x_k)$. Multiplicando ahora a ambos lados de la igualdad por $\omega(x)$, integrando sobre el intervalo [a, b] y aplicando el *Teorema del Valor Medio para integrales*, se deduce inmediatamente el siguiente

Teorema 13 Sea $f \in C^{(2n)}([a,b])$. Entonces, existe $\mu \in [a,b]$ tal que el error (1.2) para las f.c. Gaussianas viene dado por

$$E_n(f) = I_{\omega}(f) - I_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\mu)}{(2n)!} \int_a^b \pi_n^2(x)\omega(x)dx, \quad \mu \in [a, b].$$
(1.24)

Observamos de (1.24) que si $f^{(2n)}$ no cambia de signo en [a, b], entonces $I_n(f)$ dará cotas superiores o inferiores para $I_{\omega}(f)$. Además, cabe destacar que, a partir del Teorema 4, en este caso también podemos conseguir una expresión del error en la que solo se requiere que la función sea continua en el intervalo [a, b]:

Corolario 2 Sean $f \in C([a,b])$ e $I_n(f)$ la f.c. Gaussiana de n puntos. Entonces $|E_n(f)| \leq 2 \cdot \rho_{2n-1}(f) \cdot c_0$, siendo $\rho_{2n-1}(f) = \min_{q \in \mathbb{P}_{2n-1}} \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - q(x)| \ y \ c_0 = \int_a^b \omega(x) dx.$

Por tanto, tenemos que estas f.c. son convergentes para cualquier función continua en [a, b]. Sin embargo, como las f.c. Gaussianas son positivas (pesos positivos), sabemos por el *Teorema de Steklov* que dicha convergencia se extiende a integrandos Riemann-Stieltjes integrables con respecto a la función peso ω en [a, b].

1.3.3. Fórmulas de Cuadratura de Gauss-Radau

A continuación, consideramos el caso l = n-2 en el Teorema 9, dando lugar a las *f.c. de Gauss-Radau*, que quedan caracterizadas también por el Teorema 10 mediante el siguiente

Corolario 3 Una f.c. $I_n(f)$ de n puntos para $I_{\omega}(f) = \int_a^b f(x)\omega(x)dx$, siendo ω una función peso definida en [a, b], tiene grado de precisión 2n - 2 si y solo si

- $I_n(f)$ es de Tipo Interpolatorio.
- El polinomio nodal R es de la forma

$$R(x) = \tilde{p}_n(x) + \kappa \cdot \tilde{p}_{n-1}(x), \qquad (1.25)$$

siendo $\{\tilde{p}_k\}_{k=0}^{\infty}$ una familia de polinomios ortonormales para ω en [a,b] y $\kappa \in \mathbb{R} \setminus \{0\}.$

Notemos que si tomamos $\kappa = 0$ en (1.25), recuperamos las f.c. Gaussianas y el grado de precisión aumenta a 2n - 1. Ahora bien, las f.c. de Gauss-Radau, que poseen grado de precisión 2n - 2 y por ende son positivas (Proposición 3), se caracterizan por fijar un nodo, $\alpha \in [a, b]$, de antemano. Es decir, el parámetro

libre κ en (1.25) se debe determinar previamente de manera apropiada si queremos fijar un nodo α . Observamos que caben plantearse tres opciones posibles para fijar dicho nodo de antemano: $\alpha = a$, $\alpha = b$ o $\alpha \in (a, b)$. Primeramente, veremos que las dos primeras pueden resolverse fácilmente, dando lugar a las f.c. clásicas de Gauss-Radau. Posteriormente, y teniendo en cuenta los desarrollos de los casos previos, abordaremos también la última opción.

En primer lugar, consideramos $\alpha = a$. Luego, la f.c. de Gauss-Radau $I_n(f)$ de n puntos es de la forma:

$$I_n(f) = A_a f(a) + \sum_{k=2}^n A_k f(x_k).$$
 (1.26)

El polinomio nodal es $\pi_n(x) = (x-a) \prod_{k=2}^n (x-x_k) = (x-a)q_{n-1}(x) \in \mathbb{P}_n \setminus \mathbb{P}_{n-1}$, y, por el Teorema 9 y (1.16) se debe verificar $\int_a^b x^j q_{n-1}(x)(x-a)\omega(x)dx = 0$, $\forall j = 0, 1, \ldots, n-2$; es decir, q_{n-1} es un (n-1)-ésimo polinomio ortogonal para la medida positiva modificada $\omega_a(x) = (x-a)\omega(x), x \in [a,b]$. Obsérvese que el parámetro κ en (1.25) se calcula de manera que R(a) = 0. Así, este viene dado por $\kappa = -\frac{\tilde{p}_n(a)}{\tilde{p}_{n-1}(a)}$, que por el Teorema 7 sabemos que es no nulo y está bien definido.

Veamos ahora que también podemos calcular eficientemente los nodos y los pesos de la f.c. $I_n(f)$ de Gauss-Radau. Recordemos que $\{\tilde{p}_k\}_{k=0}^{\infty}$ denota la familia de polinomios ortonormales con respecto a ω en [a, b], y nuestro objetivo es computar la familia $\{\tilde{p}_0, \ldots, \tilde{p}_{n-1}, R\}$, con R dado por (1.25). La ley de recurrencia a tres términos para el cálculo de $\{\tilde{p}_0, \ldots, \tilde{p}_{n-1}\}$ (Teorema 6) da lugar a las n-1 primeras ecuaciones de (1.12)–(1.13). En cambio, para el cálculo de R, vemos que la última ecuación vendrá dada por

$$x \cdot \tilde{p}_{n-1}(x) = a_{n-1}\tilde{p}_{n-2}(x) + b_{n-1}\tilde{p}_{n-1}(x) + a_n\tilde{p}_n(x)$$

= $a_{n-1}\tilde{p}_{n-2}(x) + b_{n-1}\tilde{p}_{n-1}(x) + a_n \left[R(x) + \frac{\tilde{p}_n(a)}{\tilde{p}_{n-1}(a)}\tilde{p}_{n-1}(x)\right]$
= $a_{n-1}\tilde{p}_{n-2}(x) + \left[b_{n-1} + a_n\frac{\tilde{p}_n(a)}{\tilde{p}_{n-1}(a)}\right]\tilde{p}_{n-1}(x) + a_nR(x).$

Haciendo x = a en la última igualdad y dado que podemos dividir entre $\tilde{p}_{n-1}(a) \neq 0$, se sigue que $b_{n-1} + a_n \frac{\tilde{p}_n(a)}{\tilde{p}_{n-1}(a)} = a - a_{n-1} \frac{\tilde{p}_{n-2}(a)}{\tilde{p}_{n-1}(a)}$, y entonces,

$$x\tilde{p}_{n-1}(x) = a_{n-1}\tilde{p}_{n-2}(x) + b_{n-1}^{R,L}\tilde{p}_{n-1}(x) + a_nR(x), \quad \text{donde} \quad b_{n-1}^{R,L} = a - a_{n-1}\frac{\tilde{p}_{n-2}(a)}{\tilde{p}_{n-1}(a)}$$

Por tanto, concluimos que $x\mathbf{P}(x) = J_n^{R,L}\mathbf{P}(x) + a_n R(x)e_n$, siendo

$$J_{n}^{R,L} = \begin{pmatrix} b_{0} \ a_{1} \ 0 \ 0 \ \cdots \ 0 \\ a_{1} \ b_{1} \ a_{2} \ 0 \ \cdots \ 0 \\ 0 \ a_{2} \ b_{2} \ a_{3} \ \cdots \ 0 \\ \vdots \\ 0 \ \cdots \ 0 \ a_{n-2} \ b_{n-2} \ a_{n-1} \\ 0 \ \cdots \ 0 \ 0 \ a_{n-1} \ b_{n-1}^{R,L} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}(x) = \begin{pmatrix} \tilde{p}_{0}(x) \\ \tilde{p}_{1}(x) \\ \vdots \\ \tilde{p}_{n-2}(x) \\ \tilde{p}_{n-1}(x) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n}, \quad e_{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n}, \quad (1.27)$$

donde $R(x) = \tilde{p}_n(x) + \kappa \tilde{p}_{n-1}(x)$, con $\kappa = -\frac{\tilde{p}_n(a)}{\tilde{p}_{n-1}(a)}$, y $b_{n-1}^{R,L} = a - a_{n-1} \frac{\tilde{p}_{n-2}(a)}{\tilde{p}_{n-1}(a)}$. Por construcción, los autovalores de $J_n^{R,L}$ son $\{a, x_2, \dots, x_n\}$ en (1.26). Al-

Por construcción, los autovalores de $J_n^{R,D}$ son $\{a, x_2, \ldots, x_n\}$ en (1.26). Alternativamente, hemos visto que $\{x_2, \ldots, x_n\}$ se pueden obtener como los n-1autovalores de J_{n-1} , dada por (1.13) y asociada a la función peso modificada $\omega_a(x) = (x - a)\omega(x), x \in [a, b]$. En cuanto a los pesos, es inmediato comprobar la misma deducción que se llevó a cabo en la subsección anterior para las f.c. Gaussianas. Por consiguiente, podemos afirmar que el cómputo de las f.c. de Gauss-Radau queda eficientemente caracterizado en términos del problema del cálculo de autovalores y autovectores correspondientes en la matriz de Jacobi-Radau $J_n^{R,L}$:

Teorema 14 Sean $I_n(f)$ la f.c. de Gauss-Radau (1.26) de n puntos para $I_{\omega}(f)$ y $J_n^{R,L}$ la matriz de Jacobi-Radau definida en (1.27). Entonces, los n nodos $\{a, x_2, \ldots, x_n\}$ coinciden con los autovalores de la matriz $J_n^{R,L}$ y los n pesos $\{A_a, A_2, \ldots, A_n\}$ vienen dados por $A_a = v_a^2 \cdot c_0$ y $A_k = v_k^2 \cdot c_0$, $\forall k \in \{2, \ldots, n\}$, donde v_a y v_k son las primeras componentes de los autovectores normalizados asociados a los autovalores a y x_k , respectivamente, $\forall k = 2, \ldots, n$ y $c_0 = \int_a^b \omega(x) dx$.

En el caso de considerar $\alpha = b$, cabe destacar que el análisis es análogo al desarrollado para $\alpha = a$, deduciendo igualmente las mismas conclusiones, por lo que omitiremos los detalles. Ahora, el valor de κ en (1.25) viene dado por $\kappa = -\frac{\tilde{p}_n(b)}{\tilde{p}_{n-1}(b)}$, que sigue siendo no nulo y continúa estando bien definido, y el parámetro $b_{n-1}^{R,L}$ en (1.27) queda reemplazado por $b_{n-1}^{R,R} = b - a_{n-1} \frac{\tilde{p}_{n-2}(b)}{\tilde{p}_{n-1}(b)}$.

Finalmente, analizamos el caso $\alpha \in (a, b)$, buscando una f.c. de Gauss-Radau con n nodos de la forma

$$I_n(f) = A_{\alpha}f(\alpha) + \sum_{k=2}^n A_k f(x_k).$$
 (1.28)

Atendiendo al análisis anterior, el polinomio nodal viene dado por $\pi_n(x) = (x - \alpha)q_{n-1}(x) \in \mathbb{P}_n \setminus \mathbb{P}_{n-1}$, donde q_{n-1} es ahora un (n-1)-ésimo polinomio ortogonal con respecto a la medida de signo variante $\omega_{\alpha}(x) = (x - \alpha)\omega(x)$. Por tanto, el concepto de ortogonalidad podría carecer de sentido en este caso (véase [12]) y, en consecuencia, debemos proceder de manera alternativa, abordando directamente el estudio del polinomio nodal (1.25).

Ahora bien, apreciamos que κ ha de elegirse de manera que $R(\alpha) = 0$. Así, obtenemos que $\kappa = -\frac{\tilde{p}_n(\alpha)}{\tilde{p}_{n-1}(\alpha)}$. Por tanto, el polinomio nodal viene dado por

$$R(x) = \tilde{p}_n(x) - f_n(\alpha) \cdot \tilde{p}_{n-1}(x), \text{ donde } f_n(x) = \frac{p_n(x)}{\tilde{p}_{n-1}(x)}.$$
 (1.29)

Obsérvese de esta última expresión lo siguiente:

- Si $\tilde{p}_n(\alpha) = 0$, entonces $R(x) = \tilde{p}_n(x)$, y la f.c. de Gauss-Radau que fija α (cero de \tilde{p}_n) es realmente la f.c. Gaussiana de *n* puntos, cuyo grado de precisión es 2n 1.
- Si $\tilde{p}_{n-1}(\alpha) = 0$, entonces resulta evidente por el Teorema 8 que no puede existir una constante κ tal que el polinomio nodal cuasi-ortogonal de grado n y orden 1, $R(x) = \tilde{p}_n(x) + \kappa \cdot \tilde{p}_{n-1}(x)$, verifique que $R(\alpha) = 0$. Sin duda, lo anterior marca una clara diferencia con respecto al análisis llevado a cabo anteriormente: no podrá existir una f.c. de Gauss-Radau con n puntos que fije como nodo un cero de \tilde{p}_{n-1} .

Luego, notemos que la única restricción que tenemos por el momento para α es que $\tilde{p}_{n-1}(\alpha) \cdot \tilde{p}_n(\alpha) \neq 0$ y $\alpha \in \mathbb{R}$. Por otro lado, por el Teorema 11, sabemos que el polinomio R en (1.29) tiene, al menos, n-1 ceros distintos entre sí en (a, b). Por ende, la existencia de la f.c. (1.28) dependerá de que podamos garantizar que el cero de este polinomio que pudiera estar fuera del intervalo (a, b) se quede en el interior de dicho intervalo, y sea también distinto a los restantes n-1ceros que sabemos con seguridad que se encuentran en (a, b). Además, por la Proposición 3 sabemos que dicha f.c. será positiva. En [9] se prueba que la condición necesaria para garantizar que todos los ceros de R se encuentren en (a, b) es $f_n(a) < f_n(\alpha) < f_n(b)$ (véase también [3]).

Seguidamente, cabe mencionar que algunas propiedades que cumple la función racional f_n de (1.29) por propia definición y por (1.23) son:

- Tiene *n* raíces en los ceros de \tilde{p}_n .
- Posee n-1 asíntotas verticales en los ceros de \tilde{p}_{n-1} .
- $f_n(a) < 0, f_n(b) > 0, \lim_{x \to \infty} f_n(x) = \infty$ y $\lim_{x \to -\infty} f_n(x) = -\infty$.
- Es creciente en su dominio.

Por todo lo anterior, podemos deducir que la ecuación $f_n(\alpha) = f_n(a)$ tiene n-1 soluciones, $\{\xi_j\}_{j=1}^{n-1}$ en el intervalo (a, b). De manera similar, se obtiene que $\{\zeta_j\}_{j=1}^{n-1}$ son las n-1 soluciones de $f_n(\alpha) = f_n(b)$. Asimismo, debe verificarse que

$$a < x_{1,n} < \zeta_1 < x_{1,n-1} < \xi_1 < x_{2,n} < \zeta_2 < \dots < x_{n-1,n} < \zeta_{n-1} < x_{n-1,n-1} < \xi_{n-1} < x_{n,n} < b.$$

Luego, tomando $\alpha \in (\xi_j, \zeta_{j+1})$, se cumplirá que $f_n(\alpha) < f_n(\alpha) < f_n(b)$ y podremos garantizar que R tiene todos sus ceros reales y distintos en el intervalo (a, b).

Así, obtendremos una f.c. de n puntos con pesos positivos y grado de precisión máximo 2n - 2, siendo α un nodo prefijado. Sin embargo, si $\alpha \in (\zeta_j, \xi_j)$ no se cumplirá que $f_n(a) < f_n(\alpha) < f_n(b)$, lo que implica que un cero de R estará por fuera del intervalo [a, b] y no podremos construir una f.c. con todos sus nodos en [a, b]. Además, cabe mencionar que tomando $\alpha = \zeta_j$ o $\alpha = \xi_j$, obtendremos las fórmulas clásicas de Gauss-Radau, en las que se fija uno de los extremos del intervalo de integración, y que han sido analizadas anteriormente.

Por consiguiente, hemos visto que es posible garantizar la existencia de una f.c. con pesos positivos de tipo Gauss-Radau con un nodo fijado en (a, b) si este se encuentra en una cierta partición del mismo. El siguiente teorema, cuya demostración fue introducida en la literatura por primera vez en [3], sintetiza todo lo mencionado hasta el momento:

Teorema 15 Sean ω una función peso en el intervalo finito o infinito [a, b], $\{\tilde{p}_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ la familia de polinomios ortonormales con respecto a ω en [a, b] y el nodo $\alpha \in [a, b]$ de tal manera que no coincide con los ceros de \tilde{p}_{n-1} ni de \tilde{p}_n . Si definimos f_n como antes, es decir, $f_n = \frac{\tilde{p}_n}{\tilde{p}_{n-1}}$ siendo $n \ge 1$, e $I_n(f)$ es una f.c. de n puntos de la forma (1.28) para $I_{\omega}(f) = \int_a^b f(x)\omega(x)dx$ con un nodo α fijado, entonces $I_n(f)$ tiene el máximo grado de precisión, que es 2n-2, y los pesos de la f.c. son positivos si y solo si es de tipo interpolatorio y los nodos son los ceros de $R(x) = \tilde{p}_n(x) - f_n(\alpha)\tilde{p}_{n-1}(x)$. Además, todos los nodos estarán en (a, b) si y solo si $\alpha \in (a, b) \setminus \bigcup_{j=1}^{n-1} [\zeta_j, \xi_j]$, donde las cantidades $\{\zeta_j\}_{j=1}^{n-1} y \{\xi_j\}_{j=1}^{n-1}$ han sido definidas anteriormente. Asimismo, $I_n(f)$ coincide con la f.c. de Gauss-Radau con el nodo x = a prefijado si y solo si $\alpha \in \{a, \xi_1, \ldots, \xi_{n-1}\}$. En cambio, $I_n(f)$ coincide con la f.c. de Gauss-Radau con el nodo x = b prefijado si y solo si $\alpha \in \{a, \zeta_1, \ldots, \zeta_{n-1}\}$.

Finalmente, apreciamos que también podemos computar en este caso los nodos y los pesos de la f.c. $I_n(f)$ de Gauss-Radau cuando $\alpha \in (a,b) \setminus \bigcup_{j=1}^{n-1} [\zeta_j, \xi_j]$, es decir, cuando la f.c. existe. Para ello, basta con proceder de forma análoga al caso $\alpha = a$, obteniendo ahora que la matriz de Jacobi-Radau viene dada por

$$J_{n}^{R,\alpha} = \begin{pmatrix} b_{0} & a_{1} & 0 & 0 & \cdots & 0\\ a_{1} & b_{1} & a_{2} & 0 & \cdots & 0\\ 0 & a_{2} & b_{2} & a_{3} & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & \cdots & 0 & a_{n-2} & b_{n-2} & a_{n-1}\\ 0 & \cdots & 0 & 0 & a_{n-1} & b_{n-1}^{R,\alpha} \end{pmatrix},$$
(1.30)

donde $b_{n-1}^{R,\alpha} = \alpha - a_{n-1} \frac{\tilde{p}_{n-2}(\alpha)}{\tilde{p}_{n-1}(\alpha)}$, y el polinomio nodal vendrá dado por (1.29). Por último, cabe mencionar que deducir el Teorema 15 a partir de la matriz

(1.30) empleando técnicas de *Álgebra Lineal Numérica* es una cuestión abierta.

Con respecto a la expresión del error (1.2) para las f.c. de *n* nodos de Gauss-Radau, podemos hacer uso nuevamente de la Proposición 2. Pese a ello, para mejorar esa estimación general, y puesto que estas f.c. poseen grado de

precisión 2n-2, resulta lógico considerar como en el caso de las f.c. Gaussianas el polinomio interpolador de Hermite $H_{2n-2}(f; \cdot) \in \mathbb{P}_{2n-2}$, que interpola a la función f y a su derivada en $\{x_k\}_{k=2}^n$ (los n-1 nodos "libres"), y al nodo prefijado, $\alpha \in [a, b]$, solo con multiplicidad 1. Es sencillo verificar que si $f \in C^{(2n-1)}([a, b])$, entonces (1.8) es ahora

$$f(x) - H_{2n-2}(f,x) = \frac{f^{(2n-1)}(\epsilon)}{(2n-1)!} \pi_{n-1}^2(x)(x-\alpha), \quad \epsilon = \epsilon(x) \in [a,b],$$

donde $\pi_{n-1}(x) = \prod_{k=2}^{n} (x - x_k)$. Multiplicando a continuación a ambos lados de esta última igualdad por $\omega(x)$, integrando sobre el intervalo [a, b] y aplicando el *Teorema del Valor Medio para integrales*, se deduce el siguiente resultado:

Teorema 16 Sea $f \in C^{(2n-1)}([a,b])$. Entonces, existe $\epsilon \in [a,b]$ que satisface que el error (1.2) para las f.c. de Gauss-Radau viene dado por

$$E_n(f) = \frac{f^{(2n-1)}(\epsilon)}{(2n-1)!} \int_a^b \pi_{n-1}^2(x)(x-\alpha)\omega(x)dx.$$

Además, a partir del Teorema 4, también podemos conseguir una expresión del error en la que solo se necesite que la función sea continua sobre el intervalo [a, b] para las f.c. de Gauss-Radau:

Corolario 4 Sean $f \in C([a,b])$ e $I_n(f)$ la f.c. de Gauss-Radau de n puntos. Entonces, $|E_n(f)| \le 2 \cdot \rho_{2n-2}(f) \cdot c_0$, siendo $\rho_{2n-2}(f) = \min_{q \in \mathbb{P}_{2n-2}} \max_{a \le x \le b} |f(x) - q(x)|$

 $y c_0 = \int_a^b \omega(x) dx.$

Por tanto, concluimos que las f.c. de Gauss-Radau son convergentes para cualquier función continua en el intervalo [a, b]. No obstante, como estas f.c. son positivas (Proposición 3), sabemos por el *Teorema de Steklov* que dicha convergencia se extiende a integrandos Riemann-Stieltjes integrables con respecto a la función peso ω en [a, b], tal y como comentamos que ocurre también para las f.c. Gaussianas.

1.3.4. Fórmulas de Cuadratura de Gauss-Lobatto

Finalizamos este capítulo considerando el caso l = n - 3 en el Teorema 9, que junto con el Teorema 10, nos permite obtener una caracterización para las f.c. de Gauss-Lobatto a través del siguiente

Corolario 5 Una f.c. $I_n(f)$ de n puntos para $I_{\omega}(f) = \int_a^b f(x)\omega(x)dx$, siendo ω una función peso definida en [a, b], tiene grado de precisión 2n - 3 si y solo si

- $I_n(f)$ es de Tipo Interpolatorio.
- El polinomio nodal R es de la forma

$$R(x) = p_n(x) + \kappa_1 p_{n-1}(x) + \kappa_2 p_{n-2}(x), \qquad (1.31)$$

siendo $\{p_k\}_{k=0}^{\infty}$ una familia de polinomios ortogonales para ω en [a, b] y $\kappa_1, \kappa_2 \in \mathbb{R} \setminus \{0\}.$

Nótese que de la expresión (1.31) recuperaremos las f.c. de Gauss-Radau si tomamos $\kappa_2 = 0$ y $\kappa_1 \neq 0$, mientras que si escogemos $\kappa_1 = \kappa_2 = 0$, entonces obtendremos las f.c. Gaussianas. Además, se tiene que las f.c. de Gauss-Lobatto poseen grado de precisión 2n - 3 y, por tanto, no podemos garantizar que la f.c. sea positiva, a diferencia de las f.c. consideradas anteriormente. De hecho, en [15] se demuestra que estas f.c. tienen a lo sumo un peso negativo. Asimismo, apreciamos que estas f.c. se caracterizan por fijar dos nodos distintos, $\alpha, \beta \in$ [a, b], de antemano, es decir, debemos determinar los parámetros κ_1 y κ_2 de forma adecuada.

En lo que sigue, consideraremos $\alpha = a$ y $\beta = b$ por simplicidad, aunque la situación general $\alpha, \beta \in [a, b], \alpha \neq \beta$, ya ha sido estudiada con éxito en la literatura (véase [2] y [3]). En este supuesto, tenemos que la f.c. $I_n(f)$ de Gauss-Radau de n puntos es de la forma:

$$I_n(f) = A_a f(a) + A_b f(b) + \sum_{k=1}^{n-2} A_k f(x_k)$$
(1.32)

Asimismo, el polinomio nodal viene dado por

$$\pi_n(x) = (x-a)(b-x)\prod_{k=3}^n (x-x_k) = (x-a)(b-x)q_{n-2}(x) \in \mathbb{P}_n \setminus \mathbb{P}_{n-1}.$$

Obsérvese que en el caso considerado se puede deducir que la f.c. $I_n(f)$ tiene todos sus pesos positivos, dado que aplicando (1.32) a:

•
$$q_1(x) = (b-x) \cdot (x-x_3)^2 \cdots (x-x_n)^2 \in \mathbb{P}_{2n-3} \Rightarrow A_a > 0.$$

•
$$q_2(x) = (x-a) \cdot (x-x_3)^2 \cdots (x-x_n)^2 \in \mathbb{P}_{2n-3} \Rightarrow A_b > 0.$$

• $q_2(x) = (x-a) \cdot (b-x) \cdot \left[\frac{(x-x_3)\cdots(x-x_n)}{2} \right]^2 \in \mathbb{P}$ $\Rightarrow A > 0 \quad \forall i = 2$

•
$$q_i(x) = (x-a) \cdot (b-x) \cdot \left\lfloor \frac{(x-x_i)^n (x-x_i)}{(x-x_i)} \right\rfloor \in \mathbb{P}_{2n-3} \Rightarrow A_i > 0, \forall i = 3, \dots, n.$$

Se sigue del Teorema 9 que el polinomio nodal π_n debe verificar (1.16), esto es $\int_a^b x^j q_{n-2}(x)(x-a)(b-x)\omega(x)dx = 0, \forall j = 0, 1, ..., n-3$, es decir, q_{n-2} es un (n-2)-ésimo polinomio ortogonal para la medida positiva modificada $\omega_{a,b}(x) = (x-a)(b-x)\omega(x), x \in [a,b].$

Ahora bien, observamos que κ_1 y κ_2 deben elegirse de manera que R(a) = R(b) = 0. Así, obtenemos que

$$\begin{pmatrix} p_{n-1}(a) \ p_{n-2}(a) \\ p_{n-1}(b) \ p_{n-2}(b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa_1 \\ \kappa_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} p_n(a) \\ p_n(b) \end{pmatrix}$$

Se tiene que la matriz asociada a este sistema es no singular. En efecto, como $p_{n-2}(a)p_{n-2}(b) \neq 0$ y $\frac{p_{n-1}(a)}{p_{n-2}(a)} - \frac{p_{n-1}(b)}{p_{n-2}(b)} < 0$, puesto que p_{n-1} y p_{n-2} tienen todos

sus ceros en (a, b) por el Teorema 7, $p_{n-1}(b) \cdot p_{n-2}(b) > 0$ y $p_{n-1}(a) \cdot p_{n-2}(a) < 0$ por el entrelazamiento de ceros (Teorema 8); resulta que

$$\begin{vmatrix} p_{n-1}(a) & p_{n-2}(a) \\ p_{n-1}(b) & p_{n-2}(b) \end{vmatrix} = p_{n-2}(a)p_{n-2}(b) \left(\frac{p_{n-1}(a)}{p_{n-2}(a)} - \frac{p_{n-1}(b)}{p_{n-2}(b)}\right) \neq 0.$$
(1.33)

Por tanto, de la Regla de Cramer, se sigue que κ_1 y κ_2 son no nulos y están bien definidos:

$$\kappa_1 = \frac{p_n(b)p_{n-2}(a) - p_n(a)p_{n-2}(b)}{p_{n-1}(a)p_{n-2}(b) - p_{n-1}(b)p_{n-2}(a)} \quad y \quad \kappa_2 = \frac{p_n(a)p_{n-1}(b) - p_n(b)p_{n-1}(a)}{p_{n-1}(a)p_{n-2}(b) - p_{n-1}(b)p_{n-2}(a)}.$$
 (1.34)

A continuación, veamos que también podemos calcular eficientemente los nodos y los pesos de la f.c. $I_n(f)$ de Gauss-Lobatto mediante una modificación de la matriz de Jacobi definida en (1.13). Nuestro propósito es computar la familia $\{\tilde{p}_0,\ldots,\tilde{p}_{n-1},R\}$. Notemos que la ley de recurrencia a tres términos para el cálculo de $\{\tilde{p}_0, \ldots, \tilde{p}_{n-1}\}$ (Teorema 6) proporciona las n-2 primeras ecuaciones de (1.12) y (1.13). Sin embargo, para calcular las dos últimas ecuaciones (y computar así R), es fácil comprobar que la ecuación correspondiente al cómputo de p_n viene dada por

$$\begin{aligned} x \cdot \tilde{p}_{n-1}(x) &= a_{n-1}\tilde{p}_{n-2}(x) + b_{n-1}\tilde{p}_{n-1}(x) + a_n\tilde{p}_n(x) \\ &= a_{n-1}\tilde{p}_{n-2}(x) + b_{n-1}\tilde{p}_{n-1}(x) + a_n \left[R(x) - \kappa_1 p_{n-1}(x) - \kappa_2 p_{n-2}(x)\right] \\ &= \left[a_{n-1} - a_n\kappa_2\right]\tilde{p}_{n-2}(x) + \left[b_{n-1} - a_n\kappa_1\right]\tilde{p}_{n-1}(x) + a_nR(x). \end{aligned}$$

Evaluando en x = a y x = b, se tiene de esta última igualdad que

$$\begin{pmatrix} \tilde{p}_{n-1}(a) \ \tilde{p}_{n-2}(a) \\ \tilde{p}_{n-1}(b) \ \tilde{p}_{n-2}(b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{b}_{n-1} \\ \tilde{a}_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \tilde{p}_{n-1}(a) \\ b \tilde{p}_{n-1}(b) \end{pmatrix},$$

donde $b_{n-1} = b_{n-1} - a_n \kappa_1$ y $\tilde{a}_{n-1} = a_{n-1} - a_n \kappa_2$. De manera similar a (1.33), la matriz asociada a este sistema es no singular, y la solución del mismo es

$$\begin{cases} \tilde{a}_{n-1} = \frac{(b-a)\tilde{p}_{n-1}(a)\tilde{p}_{n-1}(b)}{\tilde{p}_{n-1}(a)\tilde{p}_{n-2}(b) - \tilde{p}_{n-1}(b)\tilde{p}_{n-2}(a)} = \frac{b-a}{\frac{\tilde{p}_{n-2}(b)}{\tilde{p}_{n-2}(a)} - \frac{\tilde{p}_{n-2}(a)}{\tilde{p}_{n-1}(a)}} > 0, \\ \tilde{b}_{n-1} = \frac{a\tilde{p}_{n-1}(a)\tilde{p}_{n-2}(b) - b\tilde{p}_{n-1}(b)\tilde{p}_{n-2}(a)}{\tilde{p}_{n-1}(a)\tilde{p}_{n-2}(b) - \tilde{p}_{n-1}(b)\tilde{p}_{n-2}(a)}. \end{cases}$$
(1.35)

Por tanto, deducimos que $x\mathbf{P}(x) = J_n^L \mathbf{P}(x) + a_n R(x) e_n$, siendo

$$J_{n}^{L} = \begin{pmatrix} b_{0} \ a_{1} \ 0 \ 0 \ \cdots \ 0 \\ a_{1} \ b_{1} \ a_{2} \ 0 \ \cdots \ 0 \\ 0 \ a_{2} \ b_{2} \ a_{3} \ \cdots \ 0 \\ \vdots \ \vdots \ \ddots \ \ddots \ \ddots \ \vdots \\ 0 \ \cdots \ a_{n-3} \ b_{n-3} \ a_{n-2} \ 0 \\ 0 \ \cdots \ 0 \ a_{n-2} \ b_{n-2} \ \tilde{a}_{n-1} \\ 0 \ \cdots \ 0 \ 0 \ \tilde{a}_{n-1} \ \tilde{b}_{n-1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}(x) = \begin{pmatrix} \tilde{p}_{0}(x) \\ \tilde{p}_{1}(x) \\ \vdots \\ \tilde{p}_{n-2}(x) \\ \tilde{p}_{n-1}(x) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n}, \quad e_{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n}, \quad (1.36)$$

donde R viene dado por (1.31), con κ_1 y κ_2 obtenidos en (1.34), y \tilde{a}_{n-1} , b_{n-1} definidos en (1.35).

Por construcción, los autovalores de J_n^L son $\{a, b, x_3, \ldots, x_n\}$. Equivalentemente, hemos visto que $\{x_3, \ldots, x_n\}$ se pueden obtener como los n-2 autovalores de J_{n-2} , dada por (1.13) y asociada a la función peso modificada $\omega_{a,b}(x) = (x-a)(b-x)\omega(x), x \in [a, b]$. Respecto a los pesos, cabe mencionar que se obtienen de forma idéntica que para las f.c. Gaussianas. Luego, hemos visto que el cómputo de las f.c. de Gauss-Lobatto queda eficientemente caracterizado en términos del problema del cálculo de autovalores y autovectores correspondientes en la matriz de Jacobi-Lobatto J_n^L , obteniendo el siguiente

Teorema 17 Sean $I_n(f)$ la f.c. de Gauss-Lobatto (1.32) de n puntos para $I_{\omega}(f)$ y J_n^L la matriz de Jacobi-Lobatto definida en (1.36). Entonces, los n nodos $\{a, b, x_3, \ldots, x_n\}$ coinciden con los autovalores de la matriz J_n^L y los n pesos $\{A_a, A_b, A_3, \ldots, A_n\}$ vienen dados por $A_a = v_a^2 \cdot c_0$, $A_b = v_b^2 \cdot c_0$ y $A_k = v_k^2 \cdot c_0$, $\forall k \in \{3, \ldots, n\}$; donde v_a , v_b y v_k son las primeras componentes de los autovector normalizados asociados a los autovalores a, b y x_k , $\forall k = 3, \ldots, n$, respectivamente.

Por último, en cuanto a la expresión del error (1.2) para las f.c. de *n* nodos de Gauss-Lobatto, se deducen los siguientes dos resultados de manera similar a los casos previos:

Teorema 18 Sea $f \in C^{(2n-2)}([a,b])$. Entonces, existe $\delta \in [a,b]$ que satisface que el error (1.2) para las f.c. de Gauss-Lobatto de n puntos viene dado por

$$E_n(f) = -\frac{f^{(2n-2)}(\epsilon)}{(2n-2)!} \int_a^b \pi_{n-2}^2(x)(x-a)(b-x)\omega(x)dx.$$

Corolario 6 Sean $f \in C([a, b])$ e $I_n(f)$ una f.c. de Gauss-Lobatto de n puntos. Entonces, $|E_n(f)| \leq 2 \cdot \rho_{2n-3}(f) \cdot c_0$, siendo $\rho_{2n-3}(f) = \min_{q \in \mathbb{P}_{2n-3}} \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - q(x)|$ $y c_0 = \int_a^b \omega(x) dx.$

Por ende, nótese que, análogamente a las f.c. Gaussianas y de Gauss-Radau, las f.c. de Gauss-Lobatto también son convergentes para cualquier función continua en el intervalo [a, b], es decir, $\lim_{n\to\infty} I_n(f) = I_{\omega}(f), \forall f \in C([a, b])$. A pesar de ello, solo podemos extender dicha convergencia a integrandos Riemann-Stieltjes integrables con respecto a la función peso ω en [a, b] cuando $\alpha = a$ y $\beta = b$, ya que en ese caso hemos visto que la f.c. (1.32) tiene siempre pesos positivos.

Tras abordar en este primer capítulo aquellas cuestiones más relevantes acerca de las f.c. que resultan indispensables para abordar el objetivo de esta Memoria, estamos en condiciones de abordar el siguiente capítulo.

Fórmulas de Cuadratura Generalizadas

En este segundo capítulo abordaremos el objetivo principal de esta Memoria: el estudio de *Fórmulas de Cuadratura Generalizadas*¹. Este tipo de reglas permite obtener de manera aproximada el valor de una integral dada con respecto a una función peso y, a diferencia de las f.c. estudiadas en el primer capítulo, cuyos nodos tenían multiplicidad igual a uno, ahora pueden aparecer nodos de multiplicidades arbitrarias en la f.c.

Las f.c.g. aparecen por primera vez en [7, Sección 3.1.1.4], y también en [8]. Desde entonces ha habido diversas publicaciones relacionadas con este tipo de reglas pero, en contraposición con las f.c. clásicas, las f.c.g. no han sido estudiadas con tanta profundidad en la literatura. Por otro lado, cabe mencionar que la obtención de este tipo de fórmulas tiene especial interés en problemas aplicados. Por ejemplo, en [7] se establece que pueden ser de suma importancia en la resolución numérica de problemas de valores iniciales en ecuaciones diferenciales ordinarias, y en [10] se analiza su utilidad en el cálculo de una función spline aproximante en el compacto [a, b] que preserve una sucesión de momentos prefijados.

2.1. Fórmulas de Cuadratura Generalizadas Tipo-Gauss

Comenzamos esta sección considerando las f.c.g. introducidas por primera vez en la literatura por W. Gautschi, que se caracterizan por fijar el extremo $x_0 = a$ con multiplicidad r > 1. Sean, por tanto, una función peso ω definida en [a, b], que podría estar definida en $[a, \infty)$, y la integral $I_{\omega}(f) = \int_a^b f(x)\omega(x)dx$. Consideramos la f.c.g. (compárese con (1.1))

$$I_w(f) \approx I_{n,r}^{RL}(f) = \sum_{l=0}^{r-1} \lambda_0^{(l)} \cdot f^{(l)}(a) + \sum_{k=1}^n A_k^{RL} \cdot f(x_k^{RL}), \qquad (2.1)$$

¹ En lo que sigue, denotaremos por "f.c.g." a las Fórmulas de Cuadratura Generalizadas.

28 2 Fórmulas de Cuadratura Generalizadas

donde r > 1 es la multiplicidad en el extremo $x_0 = a$ (cuando r = 1 recuperamos la f.c. de Gauss-Radau estudiada en la Sección 1.3.3). Obsérvese que la f.c.g. (2.1) tiene 2n + r parámetros por determinar: A_k^{RL} , x_k^{RL} , con k = 1, ..., n, y $\lambda_0^{(l)}$, con l = 0, ..., r - 1. Cabe mencionar que este tipo de f.c. no coinciden exactamente con las conocidas f.c. de Gauss-Turán, que son expresiones de la forma

$$I_{\omega}(f) \approx I_{n,s}(f) = \sum_{k=1}^{n} \sum_{\nu=1}^{2s} A_k^{\nu} \cdot f^{(\nu)}(x_k).$$
(2.2)

A continuación demostraremos que estos parámetros pueden ser calculados siguiendo de nuevo el criterio de máxima exactitud polinómica, inspirado en el *Teorema de Aproximación de Weierstrass* (Teorema 1), de manera que $I_{\omega}(p) = I_{n,r}^{RL}(p), \forall p \in \mathbb{P}_{2n+r-1}$. El primero de los resultados que presentaremos establece una manera sencilla y directa de obtener los nodos y los pesos interiores haciendo uso de una función peso auxiliar:

Teorema 19 Sean ω una función peso definida en [a, b], con $-\infty < a < b \le \infty$, y la integral $I_{\omega}(f) = \int_{a}^{b} f(x)\omega(x)dx$. Si $I_{n,r}^{RL}(f)$ denota la f.c.g. de n + r puntos definida en (2.1) y ω_r denota la función peso modificada $\omega_r(x) = (x-a)^r \cdot \omega(x)$, con $x \in [a, b]$, entonces

$$x_k^{RL} = x_k^{(r)} \quad y \quad A_k^{RL} = \frac{A_k^{(r)}}{(x_k^{RL} - a)^r}, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$
 (2.3)

siendo $x_k^{(r)}$ y $A_k^{(r)}$, k = 1, ..., n, los nodos y pesos de la f.c. Gaussiana de n puntos para la función peso ω_r . En particular, los pesos A_k^{RL} son positivos.

Demostración:

Si $p \in \mathbb{P}_{2n-1}$, entonces la f.c.g. (2.1) es exacta para la función $f(x) = (x-a)^r \cdot p(x) \in \mathbb{P}_{2n+r-1}$. Por tanto, teniendo en cuenta que $f^{(l)}(a) = 0$, $\forall l = 0, 1, \ldots, r-1$, se sigue que $I_{\omega}(f) = I_{n,r}^{RL}(f) = \sum_{k=1}^{n} A_k^{RL} \cdot (x_k^{RL} - a)^r \cdot p(x_k^{RL})$. Por otro lado, $I_{\omega}(f) = \int_a^b f(x) \cdot \omega(x) dx = \int_a^b p(x) \cdot (x-a)^r \cdot \omega(x) dx = I_{\omega_r}(p)$, lo que implica que $I_{\omega_r}(p) = \sum_{k=1}^n A_k^{RL} \cdot (x_k^{RL} - a)^r \cdot p(x_k^{RL})$, $\forall p \in \mathbb{P}_{2n-1}$, es decir, esta última expresión coincide con la f.c. Gaussiana de n puntos para la función peso ω_r , y se sigue por tanto (2.3).

La positividad de los pesos A_k^{RL} es consecuencia inmediata del hecho de que la función peso ω_r es positiva en [a, b], y de que la f.c. Gaussiana es positiva, esto es, $A_k^{(r)} > 0$, $\forall k = 1, \ldots, n$, y $x_k^{RL} > 0$, $\forall k = 1, \ldots, n$.

Recordando que el primer capítulo estaba dedicado en gran parte a la computación eficiente de las f.c. Gaussianas, observamos que, para poder computar completamente la f.c.g. (2.1), falta obtener los pesos frontera $\lambda_0^{(l)}$, l =

 $0, 1, \ldots, r-1$. Esto puede llevarse a cabo resolviendo un sistema lineal de ecuaciones, cuya matriz asociada es triangular superior, mediante el método de sustitución hacia detrás. En efecto, si $\pi_n(x) = \prod_{k=1}^n (x - x_k^{RL}) \in \mathbb{P}_n$, es decir, π_n denota el polinomio nodal mónico cuyos ceros son los nodos interiores de $I_{n,r}^{RL}(f)$, y teniendo en cuenta la *Regla de Derivación de Leibniz*

$$(u \cdot v)^{(n)} = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} \cdot u^{(n-k)} \cdot v^{(k)}, \qquad (2.4)$$

se sigue, sustituyendo en (2.1) las funciones $f_i(x) = (x-a)^i \cdot \pi_n(x)$, con $i = 0, 1, \ldots, r-1$, que los pesos $\lambda_0^{(l)}$, con $l = 0, 1, \ldots, r-1$, son la solución del sistema lineal de ecuaciones expresado en forma matricial,

$$AX = B, (2.5)$$

donde

$$A = \begin{pmatrix} \pi_n(a) \pi'_n(a) \pi''_n(a) \pi'''_n(a) \pi_n^{(r)}(a) \cdots \pi_n^{(r-2)}(a) \pi_n^{(r-1)}(a) \\ 0 \pi_n(a) 2\pi'_n(a) 3\pi''_n(a) 4\pi'''_n(a) \cdots (r-2)\pi_n^{(r-3)}(a) (r-1)\pi_n^{(r-2)}(a) \\ 0 0 2!\pi_n(a) 2! \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix} \pi'_n(a) 2! \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} \pi''_n(a) \cdots 2! \begin{pmatrix} r-2 \\ 2 \end{pmatrix} \pi_n^{(r-4)}(a) 2! \begin{pmatrix} r-1 \\ 2 \end{pmatrix} \pi_n^{(r-3)}(a) \\ 0 0 0 3!\pi_n(a) 3! \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix} \pi'_n(a) \cdots 3! \begin{pmatrix} r-2 \\ 3 \end{pmatrix} \pi_n^{(r-5)}(a) 3! \begin{pmatrix} r-1 \\ 3 \end{pmatrix} \pi_n^{(r-4)}(a) \\ \vdots \vdots \vdots \vdots \vdots \vdots \vdots \vdots \vdots \ddots \vdots \vdots \vdots \vdots \ddots \vdots \vdots \\ 0 0 0 0 0 0 0 0 \cdots (r-3)! \begin{pmatrix} r-2 \\ r-3 \end{pmatrix} \pi'_n(a) (r-3)! \begin{pmatrix} r-1 \\ r-3 \end{pmatrix} \pi''_n(a) \\ 0 0 0 0 0 0 0 \cdots (r-2)!\pi_n(a) (r-2)! \begin{pmatrix} r-1 \\ r-2 \end{pmatrix} \pi'_n(a) \\ 0 0 0 0 0 0 0 \cdots 0 (r-1)!\pi_n(a) \end{pmatrix} \\ X = \begin{pmatrix} \lambda_0^{(0)} \\ \lambda_0^{(1)} \\ \lambda_0^{(2)} \\ \vdots \\ \lambda_0^{(r-2)} \\ \lambda_0^{(r-1)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^r, \quad B = \begin{pmatrix} I_\omega(\pi_n(x)) \\ I_\omega((x-a)\pi_n(x)) \\ I_\omega((x-a)^{r-2}\pi_n(x)) \\ I_\omega((x-a)^{r-1}\pi_n(x)) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^r.$$

Obsérvese que la matriz A asociada al sistema de ecuaciones es triangular superior, como habíamos mencionado anteriormente, y que es claramente no singular, dado que $\pi_n(a) \neq 0$.

La positividad de los pesos $\lambda_0^{(0)}, \ldots, \lambda_0^{(r-1)}$ fue conjeturada por Gautschi en [8, Secciones 2.2 y 3.2] y solo resuelta para el caso r = 2. La demostración de esta conjetura para r > 2 fue revelada en [10] (véase más adelante el Teorema 21).

Lema 1 En las condiciones anteriores, si r = 2, entonces $\lambda_0^{(0)} > 0$ y $\lambda_0^{(1)} > 0$.

30 2 Fórmulas de Cuadratura Generalizadas

Demostración:

Si en (2.1) tomamos r = 2 y sustituimos por $f_0(x) = \pi_n^2(x)$ y $f_1(x) = (x - a) \cdot \pi_n^2(x)$, al ser la f.c.g. exacta en \mathbb{P}_{2n+1} , se sigue que

$$\begin{pmatrix} \pi_n^2(a) \ 2\pi_n(a)\pi_n'(a) \\ 0 \ \pi_n^2(a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_0^{(0)} \\ \lambda_0^{(1)} \\ \lambda_0^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{\omega}(\pi_n^2(x)) \\ I_{\omega}((x-a)\cdot\pi_n^2(x)) \end{pmatrix}.$$
(2.6)

Como las componentes del vector de términos independientes son positivas, se sigue de la segunda ecuación del sistema que $\lambda_0^{(1)} > 0$. Gracias a lo anterior, y que $\pi_n(a) \cdot \pi'_n(a) < 0$, se obtiene de la primera ecuación que $\lambda_0^{(0)} > 0$.

que $\pi_n(a) \cdot \pi'_n(a) < 0$, se obtiene de la primera ecuación que $\lambda_0^{(0)} > 0$. La caracterización para la f.c.g. de Gauss-Radau fijando el extremo $x_0 = b$ con multiplicidad r > 1, $I_w(f) \approx I_{n,r}^{RR}(f) = \sum_{k=1}^n A_k^{RR} \cdot f(x_k^{RR}) + \sum_{l=0}^{r-1} \lambda_0^{(l)} \cdot f^{(l)}(b)$, puede llevarse a cabo de manera análoga.

En cuanto a la f.c.g. de Gauss-Lobatto, en [7, 8] se estudia la f.c.g.

$$I_w(f) \approx I_{n,r}^L(f) = \sum_{l=0}^{r-1} \lambda_0^{(l)} \cdot f^{(l)}(a) + \sum_{k=1}^n A_k^L \cdot f(x_k^L) + \sum_{l=0}^{r-1} \lambda_{n+1}^{(l)} \cdot (-1)^l \cdot f^{(l)}(b), \quad (2.7)$$

en la que se considera ambos extremos del intervalo de integración con multiplicidad r. Además, la f.c.g. se escribe de dicha manera para reflejar que $\lambda_0^{(l)} = \lambda_{n+1}^{(l)}$, $\forall l = 0, 1, \ldots, r-1$, cuando la función peso es simétrica, es decir, $\omega(x) = \omega(-x)$, $\forall x \in [a, b] = [-b, b]$. En efecto, como veremos en el Teorema 20, la f.c.g. (2.7) es única y exacta en $\mathbb{P}_{2n+2r-1}$, un subespacio vectorial de polinomios de dimensión 2n + 2r, siendo esta la cantidad de parámetros a determinar, esto es, A_k^L , x_k^L , con $k = 1, \ldots, n, \lambda_0^{(p)}, \lambda_{n+1}^{(p)}$, con $p = 0, \ldots, r-1$. Si la función peso es simétrica, haciendo el cambio de variable t' = -t y teniendo en cuenta que $f(t) \in \mathbb{P}_{2n+2r-1}$ si y solo si $f(t') \in \mathbb{P}_{2n+2r-1}$, y que si g(x) = f(-x), entonces $g^{(l)}(x) = (-1)^l f^{(l)}(-x), \forall x \in [-b, b]$, podemos deducir

$$I_{\omega}(f) = I_{\omega}(g) = \sum_{l=0}^{r-1} \lambda_0^{(l)} \cdot f^{(l)}(-b) + \sum_{k=1}^n A_k^L \cdot f(x_k^L) + \sum_{l=0}^{r-1} \lambda_{n+1}^{(l)} \cdot (-1)^l \cdot f^{(l)}(b)$$
$$= \sum_{l=0}^{r-1} \lambda_0^{(l)} \cdot (-1)^l \cdot g^{(l)}(b) + \sum_{k=1}^n A_k^L \cdot g(-x_k^L) + \sum_{l=0}^{r-1} \lambda_{n+1}^{(l)} \cdot g^{(l)}(-b)$$

Esta última igualdad implica la simetría de pesos $\lambda_0^{(l)} = \lambda_{n+1}^{(l)}, \forall l = 0, 1, \dots, r - 1$. Asimismo, hemos probado que, en el caso considerado, los nodos interiores aparecen en pares de la forma $\{x_k^L, -x_k^L\}$, siendo los pesos asociados a ambos nodos los mismos (y, por tanto, deduciendo también que si n es impar, entonces x = 0 debe ser un nodo de la f.c.g.). Así, en este caso de simetría, el esfuerzo computacional para obtener esta f.c.g. se reduce esencialmente a la mitad.

Seguidamente, en lugar de considerar la f.c.g. (2.7), consideraremos una situación más genérica analizada en [10]. En ella, las multiplicidades de los nodos extremos $x_0 = a$ y $x_{n+1} = b$ no tienen por qué coincidir necesariamente:

$$I_w(f) \approx I_{n,r,s}(f) = \sum_{j=0}^{r-1} \lambda_0^{(j)} \cdot f^{(j)}(a) + \sum_{k=1}^n A_k \cdot f(x_k) + \sum_{l=0}^{s-1} \lambda_{n+1}^{(l)} \cdot (-1)^l \cdot f^{(l)}(b).$$
(2.8)

De esta manera, observamos que:

- 1. Entendiendo que $\sum_{i=m}^{n} a_i = 0$ cuando m > n, entonces el caso $I_{n,0,0}(f)$ se corresponde con la clásica f.c. Gaussiana de n puntos.
- 2. Los casos $I_{n-1,1,0}(f)$ y $I_{n-1,0,1}(f)$ se corresponden con las clásicas f.c. de Gauss-Radau de n puntos.
- 3. El caso $I_{n-2,1,1}(f)$ se corresponde con la clásica f.c. de Gauss-Lobatto de n puntos.
- 4. Tomando los casos s = 0 y r = s, obtenemos las f.c.g. consideradas por Gautschi en [7, 8].
- 5. Los casos $I_{n-2,2,0}(f)$ y $I_{n-2,0,2}(f)$ han sido estudiados de manera particular en [16].

A continuación, veremos en el siguiente resultado que existe una única f.c.g. de la forma (2.8) que tiene dominio de exactitud $\mathbb{P}_{2n+r+s-1}$. Aunque en [10] no se demuestra ni se caracteriza, reproducimos a continuación la demostración, empleando argumentos similares a los utilizados en la prueba del Teorema 19.

Teorema 20 Existe una única f.c.g. $I_{n,r,s}(f)$ de la forma (2.8) tal que $I_{n,r,s}(p) = I_{\omega}(p), \forall p \in \mathbb{P}_{2n+r+s-1}$. Además, los pesos asociados a nodos interiores son positivos.

Demostración:

Sea la función peso modificada $\omega_{r,s}(x) = (x-a)^r \cdot (b-x)^s \cdot \omega(x) \ge 0$, $\forall x \in [a, b]$. Si tomamos $p \in \mathbb{P}_{2n-1}$, entonces buscamos que la f.c.g. (2.8) sea exacta para la función $f(x) = (x-a)^r \cdot (b-x)^s \cdot p(x) \in \mathbb{P}_{2n+r+s-1}$. Por tanto, se sigue que $I_{\omega}(f) = I_{n,r,s}(f) = \sum_{k=1}^{n} A_k \cdot (x_k - a)^r \cdot (b - x_k)^s \cdot p(x_k)$, puesto que $f^{(j)}(a) = 0, \forall j = 0, 1, \ldots, r-1, y f^{(l)}(b) = 0, \forall l = 0, 1, \ldots, s-1$. Además, se tiene que $I_{\omega}(f) = \int_a^b f(x) \cdot \omega(x) dx = \int_a^b p(x) \cdot (x-a)^r \cdot (b-x)^s \cdot \omega(x) dx = I_{\omega_{r,s}}(p)$, lo que implica que $I_{\omega_{r,s}}(p) = \sum_{k=1}^n A_k \cdot (x_k - a)^r \cdot (b - x_k)^s \cdot p(x_k), \forall p \in \mathbb{P}_{2n-1}$, recuperando así la clásica f.c. Gaussiana de n puntos para la función peso modificada $\omega_{r,s}$. Por tanto, se deduce que $x_k = x_k^{(r)} \ y \ A_k = \frac{A_k^{(r)}}{(x_k - a)^r \cdot (b - x_k)^s}, \ k = 1, 2, \ldots, n$, siendo $x_k^{(r)} \ y \ A_k^{(r)}, \ k = 1, \ldots, n$, los nodos y pesos de la f.c. Gaussiana de n puntos para la función peso $\omega_{r,s}$. En particular, los pesos A_k son positivos, dado que $\omega_{r,s} \ge 0$ en [a, b] y que $A_k^{(r)} > 0, \ \forall k = 1, \ldots, n$, pues la f.c. Gaussiana es positiva y $a < x_k < b, \ \forall k = 1, \ldots, n$.

32 2 Fórmulas de Cuadratura Generalizadas

De nuevo, para poder computar completamente la f.c.g. (2.8) faltaría calcular los pesos frontera $\lambda_0^{(j)}$, $j = 0, 1, \ldots, r-1$ y $\lambda_{n+1}^{(l)}$, $l = 0, 1, \ldots, s-1$. Esto se podrá llevar a cabo resolviendo dos sistemas lineales de ecuaciones que se obtienen de manera similar a (2.5), y cuyas matrices asociadas vuelven a ser triangulares superiores. En este caso, recordando que $\pi_n(x) = \prod_{k=1}^n (x-x_k) \in \mathbb{P}_n$, se puede proceder sustituyendo en (2.8) las funciones $f_i(x) = (x-a)^i \cdot (b-x)^s \cdot \pi_n(x) =$ $(x-a)^i \cdot \pi_{n,b}(x)$, con $i = 0, 1, \ldots, r-1, g_j(x) = (b-x)^j \cdot (x-a)^r \cdot \pi_n(x) =$ $(b-x)^j \cdot \pi_{n,a}(x)$, con $j = 0, 1, \ldots, s-1$, y aplicando de nuevo la *Regla de Derivación de Leibniz* (2.4) resulta que el sistema que se debe resolver para computar $\lambda_0^{(j)}$, $j = 0, 1, \ldots, r-1$ viene dado en forma matricial por (2.5) sustituyendo π_n por $\pi_{n,b}$. De igual manera, el sistema correspondiente para obtener los pesos $\lambda_{n+1}^{(l)}$, $l = 0, 1, \ldots, s-1$ coincide de nuevo con (2.5), aunque sustituyendo ahora π_n por $\pi_{n,a}$. Además, obsérvese que las matrices de coeficientes son no singulares en ambos casos, dado que $\pi_{n,b}(a) \neq 0 \neq \pi_{n,a}(b)$.

El siguiente teorema, que ya fue mencionado anteriormente, aborda la positividad de los pesos A_k , $\forall k = 1, \ldots, n, \lambda_0^{(j)}, \forall j = 0, \ldots, r - 1, y \lambda_{n+1}^{(l)}, \forall l = 0, \ldots, s - 1$ (recordemos que ya vimos en el Teorema 20 que los pesos asociados a los nodos interiores son positivos, aunque comentaremos la demostración alternativa presentada en [10], pues proporciona la idea para probar que los pesos frontera son también positivos). Dada su relevancia, mostraremos en detalle su prueba. Para ello, necesitamos previamente el siguiente

Lema 2 Si $p(x) = \prod_{j=1}^{m} (x_j - x)$, donde $x_1, x_2, \dots, x_m \in (c, \infty)$, entonces $\left(\frac{1}{p(x)}\right)_{|x=c}^{(l)} > 0, \forall l = 0, 1, 2, \dots$

Demostración:

Procedemos aplicando el método de inducción sobre m. Para m = 1 se tiene que $\left(\frac{1}{x_1-x}\right)_{|x=c}^{(l)} = \frac{1}{(x_1-c)^{l+1}} > 0, \ \forall l = 0, 1, 2, \dots$ Supongamos que la propiedad se cumple para el caso m. Sea $p(x) = \prod_{j=1}^{m} (x_j - x)$ y veamos que se cumple para m + 1. Consideremos $Q(x) = p(x) \cdot (x_{m+1} - x)$, con $x_{m+1} \in (c, \infty)$. De la *Regla de Derivación de Leibniz* (2.4) se sigue que

$$\left(\frac{1}{Q(x)}\right)_{|x=c}^{(l)} = \left(\frac{1}{p(x)} \cdot \frac{1}{x_{m+1} - x}\right)_{|x=c}^{(l)} = \sum_{k=0}^{l} \binom{l}{k} \cdot \left[\left(\frac{1}{p(x)}\right)_{|x=c}^{(k)}\right] \cdot \left[\left(\frac{1}{x_{m+1} - x}\right)_{|x=c}^{(l-k)}\right]$$

y el resultado se deduce directamente para el caso m + 1 aplicando la hipótesis de inducción.

Teorema 21 Todos los pesos de la f.c.g. $I_{n,r,s}(f)$ dada por (2.8) son estrictamente positivos para n, r, s > 0, es decir,

$$A_k > 0, \qquad \forall k = 1, \dots, n, \tag{2.9}$$

2.1 Fórmulas de Cuadratura Generalizadas Tipo-Gauss 33

$$\lambda_0^{(j)} > 0, \quad \forall j = 0, \dots, r-1,$$
(2.10)

$$\lambda_{n+1}^{(l)} > 0, \qquad \forall l = 0, \dots, s - 1.$$
 (2.11)

Demostración:

Veamos en primer lugar que se satisface (2.9) empleando un argumento alternativo al expuesto en los Teoremas 19 y 20. Para todo $k = 1, \ldots, n$ definimos

$$p_k(x) = \frac{l_k(x)}{l_k(x_k)}$$
, donde $l_k(x) = (x-a)^r \cdot (b-x)^s \cdot \prod_{\substack{t=1\\t \neq k}}^n (x_k - x)^2 \in \mathbb{P}_{2n+r+s-2}$.

Nótese que $p_k(x) \ge 0, \forall x \in [a, b], p_k(x_k) = 1, p_k(x_t) = 0, \forall t = 1, ..., n, t \ne k$ $p_k^{(j)}(a) = 0, \forall j = 0, 1, \dots, r-1, y p_k^{(l)}(b) = 0, \forall l = 0, 1, \dots, s-1.$ Por lo tanto, se deduce que $0 < I_{\omega}(p_k) = I_{n,r,s}(p_k) = A_k$, demostrando así (2.9). Seguidamente, probaremos (2.10). Para ello, definimos

$$q_{n,r,s,a,j}(x) = q_j(x) = \frac{(x-a)^j}{j!} \cdot \omega_1(x) \cdot \omega_2(x), \quad \forall j = 0, 1, \dots, r-1, \quad (2.12)$$

siendo $\omega_1(x) = (b-x)^s \cdot \prod_{t=1}^n (x_t - x)^2 \in \mathbb{P}_{2n+s}$ y $\omega_2(x)$ la (r-j-1)-ésima suma parcial de Taylor de $\frac{1}{\omega_1}$ en x = a, esto es

$$\omega_2(x) = \frac{1}{\omega_1(a)} + \left(\frac{1}{\omega_1}\right)'(a) \cdot (x-a) + \left(\frac{1}{\omega_1}\right)''(a) \cdot \frac{(x-a)^2}{2!} + \dots + \left(\frac{1}{\omega_1}\right)^{(r-j-1)}(a) \cdot \frac{(x-a)^{r-j-1}}{(r-j-1)!} \in \mathbb{P}_{r-j-1},$$

que está bien definida por la propia definición de ω_1 . De este modo, $q_j \in$ $\mathbb{P}_{2n+r+s-1}$ y se cumple que $I_{\omega}(q_j) = I_{n,r,s}(q_j)$. Nótese que la demostración se obtendrá si probamos que $I_{\omega}(q_i) > 0$ e $I_{n,r,s}(q_i) = \lambda_0^{(j)}, \forall j = 0, \ldots, r-1$. Para ello, apreciamos que se verifican las siguientes propiedades:

- $q_j(x_k) = 0, \forall k = 1, \dots, n.$ $q_j^{(l)}(b) = 0, \forall l = 0, 1, \dots, s 1.$ $q_j^{(t)}(a) = 0, \forall t = 0, 1, \dots, j 1.$

Si t = j, j + 1, ..., r - 1, aplicando la Regla de Derivación de Leibniz (2.4) se deduce que

$$q_{j}^{(t)}(a) = \sum_{l=0}^{t} {\binom{t}{l}} \cdot \left[\frac{(x-a)^{j}}{j!}\right]_{|x=a}^{(l)} \cdot \left[\omega_{1}(x) \cdot \omega_{2}(x)\right]_{|x=a}^{(t-l)} = {\binom{t}{j}} \cdot \left[\omega_{1}(x) \cdot \omega_{2}(x)\right]_{|x=a}^{(t-j)}.$$

Si t = j, queda claro que $q_j^{(j)} = {j \choose j} \cdot \omega_1(a) \cdot \omega_2(a) = 1$, mientras que si t > j, se tiene que $\frac{1}{\omega_1(x)} - \omega_2(x) = o((x-a)^{r-j})$. De forma equivalente podemos escribir

34 2 Fórmulas de Cuadratura Generalizadas

 $\omega_1(x) \cdot \omega_2(x) = 1 - \omega_1(x) \cdot o((x-a)^{r-j})$, y por lo tanto $[\omega_1(x) \cdot \omega_2(x)]_{|x=a}^{(t-j)} = 0$. Concluimos así que $q_j^{(t)}(a) = \delta_{t-j,0}$, siendo $\delta_{k,j}$ el símbolo delta de Kronecker definido en (1.4). Como $q_j \in \mathbb{P}_{2n+r+s-1}$, se sigue que $I_{\omega}(q_j) = I_{n,r,s}(q_j), \forall j = 0, 1, \ldots, r-1$. Por un lado, tenemos por construcción que $I_{n,r,s}(q_j) = \lambda_0^{(j)}$, por lo que para completar la prueba debemos ver que $I_{\omega}(q_j) > 0$ probando que $q_j \ge 0$ en (a, b). A partir de la definición de q_j , se tiene que esto es equivalente a probar que $\omega_2(x) \ge 0$ en (a, b). Dada la definición de ω_2 , la propiedad se cumple si

$$\left(\frac{1}{\omega_1(x)}\right)_{|x=a}^{(l)} > 0, \ \forall l = 0, 1, \dots, r-j-1,$$

lo que sabemos que es cierto por el Lema 2. La demostración de (2.11) puede llevarse a cabo de manera similar, por lo que dejamos los detalles al lector.

2.2. Análisis de la fijación de nodos interiores

En la Sección 1.3.3 se analizó lo que sucede cuando se fija un nodo interior de antemano en una f.c. de Gauss-Radau, obteniendo como resultado que la existencia de esta f.c. queda caracterizada por el Teorema 15. Estudiemos a continuación, para el caso de la f.c.g. (2.8), la posibilidad de fijar una serie de nodos interiores en esta f.c.g. con multiplicidades arbitrarias pero pares, lo cual, por lo que sabemos, no se ha estudiado en la literatura hasta el momento. Parece razonable pensar que esta f.c.g. exista solo cuando dichos nodos interiores satisfagan una serie de condiciones, de forma similar al Teorema 15. Sin embargo, veremos que tomar nodos interiores prefijados con multiplicidades pares va a permitir que esta f.c.g. generalmente siempre exista, lo que genera una diferencia notable con respecto a lo ya tratado en el primer capítulo. Los resultados de esta sección se pueden generalizar realmente a un número arbitrario de nodos interiores fijos de antemano, todos con multiplicidades pares pero arbitrarias. En nuestro caso, por simplicidad, analizaremos los casos de uno y dos nodos interiores prefijados con multiplicidade par.

En primer lugar, consideramos el nodo $\tau \in (a, b)$ tal que $\tau \neq x_k$, $\forall k = 1, \ldots, k$, con multiplicidad 2t, donde $t \in \mathbb{Z}^+$. Sea entonces la f.c.g.

$$I_w(f) \approx I_{n,r,s,t}(f) = \sum_{j=0}^{r-1} \lambda_0^{(j)} \cdot f^{(j)}(a) + \sum_{k=1}^n A_k \cdot f(x_k) + \sum_{m=0}^{2t-1} \lambda_\tau^{(m)} \cdot f^{(m)}(\tau) + \sum_{l=0}^{s-1} \lambda_{n+1}^{(l)} \cdot (-1)^l \cdot f^{(l)}(b).$$
(2.13)

Considerando un caso de simetría similar al analizado para la f.c.g de Gauss-Lobatto (2.7)-(2.8), se obtiene el siguiente resultado:

Lema 3 Sea ω una función peso simétrica definida en [-b,b], b > 0 y tomemos en (2.13) $\tau = 0$, s = r y n par. Entonces, la f.c.g. (2.13) se reduce a la f.c.g. (2.7), en el sentido de que $\lambda_0^{(l)} = \lambda_{n+1}^{(l)}$, $\forall l = 0, 1, \ldots, r-1$, y $\lambda_{\tau}^{(m)} = 0$, $\forall m = 0, 1, \ldots, 2t-1$.

Demostración:

Nótese que la f.c.g. (2.13) tiene como dominio de exactitud $\mathbb{P}_{2n+2r+2t-1}$. Haciendo el cambio de variable t' = -t, teniendo en cuenta que $f(t) \in \mathbb{P}_{2n+r+s+2t-1}$ si y solo si $f(t') \in \mathbb{P}_{2n+r+s+2t-1}$, y que si g(x) = f(-x), entonces $g^{(l)}(x) = (-1)^l f^{(l)}(-x), \forall x \in [-b, b]$, se tiene que

$$I_{\omega}(f) = \sum_{j=0}^{r-1} \lambda_{0}^{(j)} \cdot f^{(j)}(-b) + \sum_{k=1}^{n} A_{k} \cdot f(x_{k}) + \sum_{m=0}^{2t-1} \lambda_{\tau}^{(m)} \cdot f^{(m)}(0) + \sum_{l=0}^{r-1} \lambda_{n+1}^{(l)} \cdot (-1)^{l} \cdot f^{(l)}(b) = I_{\omega}(g)$$
$$= \sum_{j=0}^{r-1} \lambda_{0}^{(j)} \cdot (-1)^{j} \cdot g^{(j)}(b) + \sum_{k=1}^{n} A_{k} \cdot g(-x_{k}) + \sum_{m=0}^{2t-1} \lambda_{\tau}^{(m)} \cdot (-1)^{m} \cdot g^{(m)}(0) + \sum_{l=0}^{r-1} \lambda_{n+1}^{(l)} \cdot g^{(l)}(-b).$$

A partir de esta igualdad queda clara la simetría de pesos $\lambda_0^{(l)} = \lambda_{n+1}^{(l)}, \forall l = 0, 1, \ldots, r-1$. Además, hemos comprobado que los nodos x_k , con $k = 1, \ldots, n$, aparecen en pares de la forma $\{x_k, -x_k\}$, siendo los pesos asociados a ambos nodos los mismos. Nótese que, por lo que acabamos de mencionar, como n es par, no existe $k \in \{1, \ldots, n\}$ tal que $x_k = 0$, lo que no causa ninguna incongruencia con el hecho de que $0 = \tau \neq x_k, \forall k = 1, \ldots, n$. Por otra parte, también se tiene que $\lambda_{\tau}^{(m)} = (-1)^{(m)} \cdot \lambda_{\tau}^{(m)}$, lo que implica que $\lambda_{\tau}^{(m)} = 0, \forall m = 0, 1, \ldots, 2t - 1, y$ la f.c.g. (2.13) se reduce a la f.c.g. (2.7).

Nótese que considerando *n* impar se tendría una situación similar, en la que no existe la f.c.g. (2.13) dado que no se puede garantizar $\tau \neq x_k$, $\forall k = 1, ..., n$. No obstante, en el caso general de que $\tau \neq x_k$, $\forall k = 1, ..., n$ se obtiene el siguiente resultado, cuya demostración es similar a la de los Teoremas 19 y 20:

Teorema 22 Si $\tau \neq x_k$, $\forall k = 1, ..., n$, entonces existe una única f.c.g. $I_{n,r,s,t}(f)$ de la forma (2.13) de forma que $I_{n,r,s,t}(p) = I_{\omega}(p), \forall p \in \mathbb{P}_{2n+r+s+2t-1}$, siendo $A_k > 0, \forall k = 1, ..., n$.

Demostración:

Sea la función peso modificada

$$\omega_{r,s,2t}(x) = (x-a)^r \cdot (b-x)^s \cdot (x-\tau)^{2t} \cdot \omega(x) \ge 0, \ \forall x \in [a,b].$$

Tomando $p \in \mathbb{P}_{2n-1}$, se sigue que la f.c.g. (2.14) es exacta para la función $f(x) = (x-a)^r \cdot (b-x)^s \cdot (x-\tau)^{2t} \cdot p(x) \in \mathbb{P}_{2n+r+s+2t-1}$. Por un lado, $I_{\omega}(f) = I_{n,r,s,t}(f) = \sum_{k=1}^n A_k \cdot (x_k - a)^r \cdot (b - x_k)^s \cdot (x_k - \tau)^{2t} \cdot p(x_k)$, puesto que $f^{(j)}(a) = 0, \forall j = 0, 1, \ldots, r-1, f^{(l)}(b) = 0, \forall l = 0, 1, \ldots, s-1, f^{(m)}(\tau) = 0, \forall m = 0, 1, \ldots, 2t-1$. Por otro lado, $I_{\omega}(f) = \int_a^b p(x) \cdot (x-a)^r \cdot (b-x)^s \cdot (x-\tau)^{2t} \cdot \omega(x) dx = I_{\omega_{r,s,2t}}(p)$, lo que

36 2 Fórmulas de Cuadratura Generalizadas

implica que $I_{\omega_{r,s,2t}}(p) = \sum_{k=1}^{n} A_k \cdot (x_k - a)^r \cdot (b - x_k)^s \cdot (x_k - \tau)^{2t} \cdot p(x_k), \forall p \in \mathbb{P}_{2n-1}.$ De esta forma, hemos recuperado la clásica f.c. Gaussiana de *n* puntos para la función peso modificada $\omega_{r,s,2t}$. Por ende, se deduce que

$$x_k = x_k^{(r)}$$
 y $A_k = \frac{A_k^{(r)}}{(x_k - a)^r \cdot (b - x_k)^s \cdot (x_k - \tau)^{2t}}, \quad k = 1, 2, \dots, n$

siendo $x_k^{(r)}$ y $A_k^{(r)}$, k = 1, ..., n, los nodos y pesos de la f.c. Gaussiana de n puntos para la función peso $\omega_{r,s,2t}$. En particular, los pesos A_k son positivos, dado que $\omega_{r,s,2t} \ge 0$ en [a,b] y que $A_k^{(r)} > 0$, $\forall k = 1, ..., n$, pues la f.c. Gaussiana es positiva, $a < x_k < b$ y $(x_k - \tau)^{2t} > 0$, $\forall k = 1, ..., n$.

En segundo lugar, si añadiéramos dos nodos interiores $\tau_1, \tau_2 \in (a, b)$ con multiplicidades 2t y 2h respectivamente, satisfaciendo que $\tau_1 \neq \tau_2$ y $\tau_i \neq x_k$, $\forall k = 1, \ldots, n \in i = 1, 2$, entonces la f.c.g. viene dada ahora por

$$I_w(f) \approx I_{n,r,s,t,h}(f) = \sum_{j=0}^{r-1} \lambda_0^{(j)} \cdot f^{(j)}(a) + \sum_{k=1}^n A_k \cdot f(x_k) + \sum_{m=0}^{2t-1} \lambda_{\tau_1}^{(m)} \cdot f^{(m)}(\tau_1) + \sum_{p=0}^{2h-1} \lambda_{\tau_2}^{(p)} \cdot (-1)^p \cdot f^{(p)}(\tau_2) + \sum_{l=0}^{s-1} \lambda_{n+1}^{(l)} \cdot (-1)^l \cdot f^{(l)}(b).$$
(2.14)

En este caso se demuestra igualmente que $\lambda_0^{(l)} = \lambda_{n+1}^{(l)}, \forall l = 0, 1, \dots, r-1, y$ $\lambda_{\tau_1}^{(m)} = \lambda_{\tau_2}^{(m)}, \forall m = 0, \dots, 2t-1$, siempre que la función peso sea simétrica, es decir, $\omega(x) = \omega(-x), \forall x \in [a,b] = [-b,b], \tau_1 = -\tau_2, s = r y h = t$. Como $\tau_1 \neq \tau_2$, en este caso n puede ser tanto par como impar: si n es par, entonces $x_k \neq 0, \forall k = 1, \dots, n$; mientras que si n es impar, entonces x = 0 será un nodo de la f.c.g. Omitimos los detalles por ser similares a los empleados en el Lema 3.

Cabe observar que en (2.13) no se ha incluido el factor $(-1)^m$ asociado al sumatorio del nodo τ , a diferencia del factor $(-1)^p$ que sí aparece en el sumando correspondiente al nodo τ_2 en (2.14), dado que en este último caso resulta de importancia para obtener la conclusión anterior en referencia a la igualdad de los pesos de estos dos nodos prefijados en casos de simetría. Asimismo, apreciamos que la f.c.g. (2.14) es exacta en $\mathbb{P}_{2n+r+s+2t+2h-1}$, obteniendo el siguiente resultado cuya demostración es similar a la de los Teoremas 19, 20 y 22, por lo que omitiremos los detalles.

Teorema 23 Existe una única f.c.g. $I_{n,r,s,t,h}(f)$ de la forma (2.14) de forma que $I_{n,r,s,t,h}(p) = I_{\omega}(p), \forall p \in \mathbb{P}_{2n+r+s+2t+2h-1}$. Además, se tiene para $k = 1, \ldots, n$ que

$$x_k = x_k^{(r)} \quad y \quad A_k = \frac{A_k^{(r)}}{(x_k - a)^r \cdot (b - x_k)^s \cdot (x_k - \tau_1)^{2t} \cdot (x_k - \tau_2)^{2h}} > 0,$$

siendo $x_k^{(r)}$ y $A_k^{(r)}$, k = 1, ..., n, los nodos y pesos de la f.c. Gaussiana de n puntos para la función peso $\omega_{r,s,2t,2h} = (x-a)^r \cdot (b-x)^s \cdot (x-\tau_1)^{2t} \cdot (x-\tau_2)^{2h}$, con $x \in [a, b]$.

Cabe destacar que todo lo mencionado funciona correctamente en el caso de prefijar uno a varios nodos interiores, cada uno de ellos con multiplicidad par, gracias a que la función peso modificada será siempre mayor o igual que cero en el intervalo [a, b], algo que no ocurre en el Teorema 15, donde la multiplicidad del nodo interior prefijado es 1, y por tanto la función peso modificada tiene signo variante (véase [3] y [12]). Además, el cálculo de los pesos asociados a estos nodos interiores prefijados con multiplicidades pares arbitrarias puede llevarse a cabo resolviendo un sistema tridiagonal mediante un procedimiento similar al llevado a cabo en la Sección 2.1 (véase la Sección 2.4 más adelante) mientras que la positividad de tales pesos es un problema abierto que no ha sido abordado en la literatura (véase el Anexo A.2).

2.3. Convergencia y estimación del error

En esta sección veremos una estimación del valor absoluto del error cometido al emplear la f.c.g. $I_{n,r,s}(f)$ dada en (2.8), es decir, $|E_{n,r,s}(f)| = |I_{\omega}(f) - I_{n,r,s}(f)|$. Cabe mencionar que los resultados de esta sección se han obtenido mayoritariamente de [10]. La positividad de los pesos estudiada en el Teorema 21 es fundamental para obtener el siguiente resultado de convergencia para dicha f.c.g.:

Teorema 24 Sean el compacto [a, b] y $q = \max\{r - 1, s - 1\}$. Entonces,

$$\lim_{n \to \infty} I_{n,r,s}(f) = I_{\omega}(f), \quad \forall f \in C^q([a, b]).$$

Demostración:

Suponemos sin pérdida de generalidad que $r, s \ge 1$ (nótese que la extensión de la prueba para r = 0 y s = 0 se seguiría de inmediato). Definiendo la norma $|| f || = \max_{0 \le j \le qa \le x \le b} |f^{(j)}(x)|$, se tiene que $(C^q([a, b]), || \cdot ||)$ es un espacio de Banach (véase A.1): la completitud se obtiene a partir de la completitud del espacio C([a, b]) con respecto a la norma $|| \cdot ||_{\infty}$ en [a, b] y de que los polinomios son densos en $(C^q([a, b]), || \cdot ||_{\infty})$ (véase por ejemplo [5]). A continuación, observamos que si $f \in \mathbb{P}_k \setminus \mathbb{P}_{k-1}$, entonces se obtiene que $I_{n,r,s}(f) = I_{\omega}(f), \forall n > \frac{k-r-s}{2}$, dado que la f.c.g. $I_{n,r,s}(f)$ tiene grado de precisión 2n + r + s - 1. Es decir, hemos comprobado la convergencia para un un subconjunto denso de $(C^q([a, b]), || \cdot ||)$. Para obtener la convergencia en $C^q([a, b])$ falta comprobar que la norma de $I_{n,r,s}(f)$ está acotada uniformemente en n. Denotando que los pesos dependen del número de nodos interiores tomados, n, es sencillo ver que²

 $^{^{2}}$ Véase en el Anexo A.1 la definición de norma de un operador lineal.

38 2 Fórmulas de Cuadratura Generalizadas

$$\| I_{n,r,s} \| \le \sum_{j=0}^{r-1} \lambda_0^{(j)}(n) + \sum_{k=1}^n A_k(n) + \sum_{l=0}^{s-1} \lambda_{n+1}^{(l)}(n), \qquad (2.15)$$

dado que todos los pesos son positivos por el Teorema 21. Ahora, tomando $f \equiv 1$ se sigue que $\lambda_0^{(0)}(n) + \sum_{k=1}^n A_k(n) + \lambda_{n+1}^{(0)} = I_{n,r,s}(1) = \int_a^b \omega(x) dx < \infty$. Para el resto de términos, recordando (2.12), definimos

$$P(x) = \sum_{j=1}^{r-1} q_{0,r,s,a,j}(x) + \sum_{l=1}^{s-1} (-1)^l \cdot q_{0,r,s,b,l}(x) \in \mathbb{P}_{r+s-1}$$

Como P es no negativo en [a, b] y la f.c.g. $I_{n,r,s}(f)$ es exacta en $\mathbb{P}_{2n+r+s-1}$, se sigue que $\sum_{j=1}^{r-1} \lambda_0^{(j)}(n) + \sum_{l=1}^{s-1} \lambda_{n+1}^{(l)}(n) \leq I_{n,r,s}(P) = \int_a^b P(x)\omega(x)dx, \ \forall n \geq 0$. Por lo tanto, la expresión a la derecha de (2.15) está acotada uniformemente en n, y por el *Teorema de Banach-Steinhaus* (véase A.1) se concluye el resultado.

Usando argumentos similares a los empleados en el primer capítulo (por ejemplo, en el Teorema 4), podemos estimar la tasa de convergencia para la f.c.g. $I_{n,r,s}(f)$ dada en (2.8). De esta manera, como dicha f.c.g. es exacta en $\mathbb{P}_{2n+r+s-1}$, se tiene la siguiente cota del error:

$$|E_{n,r,s}(f)| \le (c_0 + || I_{n,r,s} ||) \cdot \rho_{2n+r+s-1}(f),$$

siendo $\rho_{2n+r+s-1}(f) = \min_{q \in \mathbb{P}_{2n+r+s-1}} \max_{a \le x \le b} |f(x) - q(x)| \le c_0 = \int_a^b \omega(x) dx$. Ahora, podemos dar una cota superior explícita bastante aproximada para $|| I_{n,r,s}(f) ||$ que es independiente de n: al analizar detalladamente la construcción de los polinomios definidos en (2.12) con n = 0, podemos observar que

$$0 \le q_j(x) \le \frac{(x-a)^j}{j!} \cdot \sum_{l=0}^{r-j-1} \frac{(x-a)^l}{(b-a)^{s+l}} \le r \cdot (b-a)^r, \ \forall x \in [a,b]$$

Obsérvese que en el caso de $(-1)^l \cdot q_{0,r,s,b,j}$ se tiene una cota similar. Así, de (2.15) se sigue que $|| I_{n,r,s} || \leq [1 + r^2 \cdot (b-a)^r + s^2 \cdot (b-a)^s] \cdot \int_a^b \omega(x) dx.$

Por otro lado, obsérvese que, dado que la f.c.g. $I_{n,r,s}(f)$ es exacta en $\mathbb{P}_{2n+r+s-1}$, otra estimación del error se puede obtener considerando el polinomio interpolador de Hermite $H_{n,r,s}(f;\cdot) \in \mathbb{P}_{2n+r+s-1}$, que interpola a la función f en $\{x_k\}_{k=1}^n$ con multiplicidad 2, en $x_0 = a$ con multiplicidad r y en $x_{n+1} = b$ con multiplicidad s. Es bien sabido que si $f \in C^{(2n+r+s)}([a,b])$, entonces

$$|f(x) - H_{n,r,s}(f,x)| \le \frac{M}{(2n+r+s)!} \cdot \pi_n^2(x) \cdot (x-a)^r \cdot (b-x)^s,$$

donde $\pi_n(x) = \prod_{k=1}^n (x - x_k)$ y $M = \| f^{(2n+r+s)} \|_{\infty} = \max_{a \le x \le b} |f^{(2n+r+s)}(x)|$. Por todo lo anterior, y teniendo en cuenta la linealidad de la integral, la siguiente cota de $E_{n,r,s}(f)$ es inmediata:

$$\begin{aligned} |E_{n,r,s}(f)| &= |I_{\omega}(f) - I_{n,r,s}(f)| = |I_{\omega}(f) - I_{n,r,s}(H)| = |I_{\omega}(f) - I_{\omega}(H)| \\ &= |I_{\omega}(f - H)| \le I_{\omega}(|f - H|) \le I_{\omega}\left(\frac{M \cdot \pi_{n}^{2}(x) \cdot (x - a)^{r} \cdot (b - x)^{s}}{(2n + r + s)!}\right) \\ &= \frac{M}{(2n + r + s)!} \int_{a}^{b} \pi_{n}^{2}(x) \cdot (x - a)^{r} \cdot (b - x)^{s} dx. \end{aligned}$$

2.4. Ejemplo numérico

En esta última sección veremos un ejemplo numérico ilustrativo donde llevaremos a la práctica algunos de los resultados de esta Memoria para el caso particular de la función peso de Chebyshev de primera especie: $\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, con $x \in (-1, 1)$. Los correspondientes polinomios ortogonales, que han sido ampliamente estudiados en la literatura, juegan un papel fundamental en *Teoría de Aproximación* (por ejemplo, sus ceros son nodos óptimos en interpolación polinómica) y vienen explícitamente dados por

$$T_n(x) = \cos(n \cdot \arccos(x)), \quad x \in (-1, 1), \quad n \ge 0.$$
 (2.16)

Algunas de las propiedades bien conocidas que cumple esta familia de polinomios ortogonales se enumeran a continuación; muchas se deducen de manera inmediata de la definición (2.16).

- $T_n \in \mathbb{P}_n \setminus \mathbb{P}_{n-1}$, es decir, tiene grado exacto n. La correspondiente familia mónica viene dada por $\hat{T}_0 = T_0 \equiv 1$ y $\hat{T}_n = 2^{1-n} \cdot T_n$ para todo $n \geq 1$, mientras que la familia ortonormal viene dada por $\tilde{T}_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$ y $\tilde{T}_n = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot T_n$ para todo $n \geq 1$.
- La familia $\{\overline{T_k}\}_{k=0}^{\infty}$ verifica la ley de recurrencia a tres términos

$$\begin{cases} T_0(x) \equiv 1, & T_1(x) \equiv x, \\ T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x), & \forall k \ge 1. \end{cases}$$
(2.17)

De las relaciones del apartado anterior es inmediato deducir las correspondientes leyes de recurrencia para las familias mónica (Teorema 5) y ortonormal (Teorema 6). En particular, se sigue que las sucesiones que definen la matriz de Jacobi (1.13) son $a_1 = \frac{\sqrt{2}}{2}$, $a_n = \frac{1}{2}$ para todo $n \ge 2$ y $b_m = 0$, para todo $m \ge 0$.

- Los ceros de T_n vienen dados por $x_k^{(n)} = \cos \theta_k^{(n)}$, donde $\theta_k^{(n)} = \frac{(2k-1)\pi}{2n}$, para todo k = 1, 2, ..., n.
- Los extremos relativos de T_n se alcanzan en $y_k^{(n)} = \cos \eta_k^{(n)} = (-1)^k$, donde $\eta_k^{(n)} = \frac{k\pi}{n}$, para todo k = 0, 1, ..., n.
- Al ser ω una función peso par definida en un intervalo simétrico se verifica la propiedad $T_n(-x) = (-1)^n \cdot T_n(x)$. Se sigue por tanto que T_n estará formado únicamente por monomios de grado par (impar) si n es par (impar).

40 2 Fórmulas de Cuadratura Generalizadas

Es fácil comprobar que la f.c. Gaussiana (Corolario 1) viene explícitamente dada por $I_n(f) = \frac{\pi}{n} \cdot \sum_{k=1}^n f(x_k^{(n)})$. De hecho, un conocido resultado en *Teoría* de Aproximación establece que esta función peso es la única definida en \mathbb{R} que posee, para n fijo, todos los pesos Gaussianos iguales.

Comenzamos considerando la f.c. de Gauss-Radau (1.28) con un nodo $\alpha \in$ (-1,1) prefijado. La función $f_n = \frac{T_n}{T_{n-1}} = \frac{\tilde{T}_n}{\tilde{T}_{n-1}}$, $\forall n \geq 2$, verifica $f_n(1) = 1$ y $f_n(-1) = -1$. Del análisis llevado a cabo que permitió deducir el Teorema 15 se sigue que $\{\zeta_k\}_{k=1}^{n-1}$ son las n-1 raíces en (-1,1) de $f_n(x) = 1$, es decir, $T_n(x) - T_{n-1}(x) = 0$, que posee realmente n raíces en \mathbb{R} , pues x = 1 es también solución. De manera similar, $\{\xi_k\}_{k=1}^{n-1}$ son las n-1 raíces en (-1,1) de $f_n(x) =$ -1, es decir, $T_n(x) + T_{n-1}(x) = 0$, que tiene también n raíces en \mathbb{R} , dado que x = -1 es también solución.

Fijemos n = 8. De (2.17) se sigue que $T_7(x) = 64x^7 - 112x^5 + 56x^3 - 7x$ y $T_8(x) = 128x^8 - 256x^6 + 160x^4 - 32x^2 + 1$, por lo que

$$T_8(x) - T_7(x) = (x-1)(2x+1)(4x^2 + 2x - 1)(16x^4 - 8x^3 - 16x^2 + 8x + 1),$$

$$T_8(x) + T_7(x) = (x+1)(2x-1)(4x^2 - 2x - 1)(16x^4 + 8x^3 - 16x^2 - 8x + 1).$$

El entrelazamiento de los ceros de T_7 y T_8 (Teorema 8) queda reflejado en la Figura 2.1. Por otro lado, la Tabla 2.1 muestra las cantidades $\{\zeta_k, \xi_k\}_{k=1}^{n-1}$ obtenidas.



Figura 2.1: Entrelazamiento de los ceros de polinomios de Chebyshev T_7 y T_8 . Los puntos rojos (resp. azules) representan la proyección que da lugar a los ceros de T_7 , es decir, las asíntotas de f_n (resp. T_8 , es decir, los ceros de f_n) sobre el intervalo (-1, 1).

Alternativamente, si hubiéramos procedido mediante el problema de autovalores asociado a la matriz $J_n^{R,\alpha}$ dada en (1.30), vemos entonces que la cantidad

$\zeta_1 = -0.978147600733806$	$\xi_1 = -0.913545457642601$
$\zeta_2 = -0.809016994374947$	$\xi_2 = -0.669130606358858$
$\zeta_3 = -0.500000000000000000000000000000000000$	$\xi_3 = -0.309016994374947$
$\zeta_4 = -0.104528463267653$	$\xi_4 = 0.104528463267653$
$\zeta_5 = 0.309016994374947$	$\xi_5 = 0.5000000000000000000000000000000000$
$\zeta_6 = 0.669130606358858$	$\xi_6 = 0.809016994374947$
$\zeta_7 = 0.913545457642601$	$\xi_7 = 0.978147600733806$

Tabla 2.1: El cuadro muestra para n = 8 los conjuntos $\{\zeta_k\}_{k=1}^7$ y $\{\xi_k\}_{k=1}^7$ del Teorema 15. De acuerdo con este resultado, no es posible construir una f.c. de Gauss-Radau con 8 nodos en (-1, 1) que fije de antemano un nodo en la región $\bigcup_{k=1}^7 [\zeta_k, \xi_k]$. Puede apreciarse la aparición de regiones "malas" (donde no es posible prefijar el nodo α) distribuidas simétricamente.

que perturba la entrada $b_{n-1} = 0$ de la matriz de Jacobi original asociada a ω , para recuperar la fórmula de Gauss-Radau, viene dada por $b_{n-1}^{R,\alpha} = \alpha - \frac{T_{n-2}(\alpha)}{2T_{n-1}(\alpha)}$. Se trata de una cuestión abierta recuperar el Teorema 15 empleando técnicas del Álgebra Lineal Numérica a partir de la matriz de Jacobi perturbada $J_n^{R,\alpha}$.

Consideremos a continuación el cálculo de diversas f.c.g. asociadas a la función peso ω . La f.c.g. (2.1), caracterizada en el Teorema 19 se computa de la siguiente manera: los nodos y los pesos vienen dados por (2.3) siendo $x_k^{(r)}$ y $A_k^{(r)}$ con $k = 1, \ldots, n$, los nodos y pesos de la f.c. Gaussiana de n puntos asociada a la función peso modificada $\omega_r(x) = (x+1)^{r-1/2}(x-1)^{-1/2}$ con r > 1, que es una función peso de tipo Jacobi, ampliamente estudiada en la literatura³ (véase por ejemplo [7] y [11]). Los pesos frontera se obtendrían resolviendo el sistema triangular (2.5) mediante sustitución hacia detrás. Algo similar sucede si consideramos las f.c.g (2.7) o (2.8) (Teorema 20): las funciones peso $\omega_{r,s}$ modificadas seguirán siendo de tipo Jacobi.

Por lo tanto, consideremos la f.c.g. (2.13) tomando n = 8 y fijemos un nodo interior τ en la f.c.g. con multiplicidad dos (t = 1) haciendo uso de los resultados obtenidos en la Tabla 2.1, de manera que τ se encuentre localizado precisamente en la región donde habíamos comprobado que la correspondiente fórmula de Gauss-Radau que fija de antemano este nodo τ con multiplicidad uno no existe. Tomemos, a modo de ejemplo, $\tau = 0, 4, r = s = 0$ y hagamos uso del Teorema 22: la función peso modificada resulta ser $\omega_{0,0,2}(x) = (x-0.4)^2/\sqrt{1-x^2}, x \in (-1,1)$. Mediante Matlab, hemos computado la correspondiente familia de polinomios ortogonales y la fórmula Gaussiana de n = 8 puntos asociada (véase la Tabla 2.2). En cuanto al cómputo de los pesos interiores $\lambda_{0.4}^{(0)}$ y $\lambda_{0.4}^{(1)}$, podemos proceder de manera similar a lo que se hizo en (2.6) para el nodo fijo x = a, resolviendo ahora el sistema

³ La función peso de Jacobi viene dada por $\omega_{\alpha,\beta}(x) = (x-1)^{\alpha}(x+1)^{\beta}$, con $\alpha,\beta > -1$ y $x \in (-1,1)$. Las cuatro funciones peso de tipo Chebyshev son los casos particulares $\alpha,\beta \in \{\pm \frac{1}{2}\}$.

42 2 Fórmulas de Cuadratura Generalizadas

$$\begin{pmatrix} \pi_8^2(0.4) \ 2\pi_8(0.4)\pi_8'(0.4) \\ 0 \ \pi_8^2(0.4) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_{0.4}^{(0)} \\ \lambda_{0.4}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_\omega(\pi_8^2(x)) \\ I_\omega((x-0.4)\cdot\pi_8^2(x)) \end{pmatrix}.$$

Los valores obtenidos son

$$\lambda_{0.4}^{(0)} = 0.304736857364040$$
 y $\lambda_{0.4}^{(1)} = -0.022097021852320$

(obsérvese que se ha obtenido uno positivo y otro negativo).

$x_1 = -0.98473512517794732718956550748366$	$A_1^{(r)} = 0.670950599805078$	$A_1 = 0.349910623529558$
$x_2 = -0.86536852495006358656184469799791$	$A_2^{(r)} = 0.560460574506844$	$A_2 = 0.350034630028403$
$x_3 = -0.6409279001098916452996249084846$	$A_3^{(r)} = 0.379642810526304$	$A_3 = 0.350375621866743$
$x_4 = -0.33814403234646547335878133154954$	$A_4^{(r)} = 0.191421405829543$	$A_4 = 0.351324369461540$
$x_5 = 0.0078367869813782108649229586441671$	$A_5^{(r)} = 0.054656857948667$	$A_5 = 0.355394708764607$
$x_6 = 0.63188489968512523629514766653135$	$A_6^{(r)} = 0.020170078454527$	$A_6 = 0.375113462385092$
$x_7 = 0.86395716818082093501398099943883$	$A_7^{(r)} = 0.076052303553285$	$A_7 = 0.353310541148629$
$x_8 = 0.98461422357039185099726011274865$	$A_8^{(r)} = 0.120096520745017$	$A_8 = 0.351391839041182$

Tabla 2.2: Nodos y pesos de la f.c. Gaussiana asociada a la función peso modificada $\omega_{0,0,2}$. Se observa claramente que $\tau = 0.4 \neq x_k$, para todo $k = 1, \ldots, 8$, y que la distribución de nodos no es simétrica. La suma de los pesos $A_k^{(r)}$ con $k = 1, \ldots, 8$ proporciona el momento modificado $\tilde{c}_0 = \int_{-1}^1 \frac{(x-0.4)^2}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx$ 2.073451151369264. En la tercera columna, $A_k = \frac{A_k^{(r)}}{(x_k - 0.4)^2}, \forall k = 1, \ldots, 8$.

Como consecuencia directa de lo expuesto anteriormente y con el propósito de ilustrar su aplicación, se obtienen las siguientes aproximaciones para:

• La función $f(x) = e^x$ con $x \in [-1, 1]$, que es siempre positiva:

$$I_{\omega}(f) = \int_{-1}^{1} \frac{e^x}{\sqrt{1-x^2}} dx = 3.977463260506 \dots \approx I_{8,0,0,1}(f) = 3.984488753998 \dots$$

• La función $g(x) = \sin(\pi x)$ con $x \in [-1, 1]$. Nótese que el integrado ahora es impar y, dado que el intervalo de integración es simétrico, se tiene que $I_{\omega}(g) = 0$:

$$I_{\omega}(g) = \int_{-1}^{1} \frac{\sin(\pi x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = 0 \approx I_{8,0,0,1}(g) = -0.010934081266644\dots$$

Conclusiones

En esta Memoria se ha considerado un primer capítulo introductorio en el que se aborda detalladamente la construcción de f.c. de tipo interpolatorio, las propiedades más relevantes sobre familias de polinomios ortogonales y la caracterización de f.c. de Tipo-Gauss en la recta real, incluyendo la posibilidad de fijar algunos nodos interiores al intervalo de integración. Se ha puesto especial énfasis a la computación eficiente de estas últimas mediante un problema de cálculo de autovalores y autovectores asociado a las correspondientes matrices de Jacobi.

En el segundo capítulo se han introducido y caracterizado las f.c.g., que consisten en procedimientos de integración numérica que datan del anõ 2004 (véase [7, 8]), que han sido poco estudiados en la literatura y que parecen tener interesantes aplicaciones en problemas aplicados. Cabe destacar que las pocas referencias existentes son artículos de investigación publicados en revistas especializadas como *BIT Numerical Mathematics, Appl. Numer. Math.* o *JCAM*.

En la Sección 2.2 se incluye la posibilidad de que las f.c.g. puedan poseer algún nodo interior al intervalo de integración con multiplicidad arbitraria par. Por lo que sabemos, este tipo de reglas no han sido introducidas anteriormente en la literatura. Asimismo, en la Sección 2.3 se ha abordado un estudio de la convergencia y la estimación del error para las f.c.g. Finalmente, en la Sección 2.4 se aporta un interesante ejemplo numérico ilustrativo para la función peso de Chebyshev de primera especie, cuyos resultados se obtuvieron haciendo uso del software Matlab.

Dado que no son muchas más las contribuciones existentes en la literatura, cabe mencionar que el tema abordado en esta Memoria constituye una línea de investigación actual dentro de la *Teoría de Aproximación*. En el Anexo final se han incluido una serie de problemas abiertos relacionados que confiamos que resulten de interés al lector.

Anexo

Α

A.1. Teorema de Banach-Steinhaus

En esta sección se enuncia el *Teorema de Banach-Steinhaus* que fue empleado en la prueba del Teorema 24 y cuya demostración es objeto de estudio en cursos de *Análisis Funcional* (véase por ejemplo [13, Capítulo 5] y [14, Capítulo 2]). Este resultado también es conocido en la literatura como *Principio de acotación uniforme*, dado que permite obtener acotación uniforme a partir de acotación puntual para una familia de operadores lineales y continuos. A continuación se define el concepto de espacio de Banach, dado que se encuentra directamente relacionado con el enunciado del mismo.

Definición 7 Diremos que X es un espacio de Banach si es un espacio vectorial normado completo, es decir, toda sucesión de Cauchy en X es convergente a un elemento $x \in X$.

Teorema 25 (Teorema de Banach-Steinhaus) Sean X un espacio de Banach, Y un espacio vectorial normado y $\{\Lambda_{\alpha}\}$ es una colección de transformaciones lineales acotadas de X en Y, donde α recorre un conjunto de índices A. Entonces, debe verificarse una de las dos opciones siguientes:

• Existe una constante $M < \infty$ tal que

 $|| \Lambda_{\alpha} || = \sup \{ || \Lambda x || : x \in X, || x || \le 1 \} \le M, \forall \alpha \in A.$

• Para todo x perteneciente a algún G_{δ} denso en X se tiene que

$$\sup_{\alpha \in A} \parallel \Lambda_{\alpha} \parallel = \infty.$$

En terminología geométrica, el primer punto del teorema equivale a que hay una bola B de centro 0 y radio M en Y tal que cada Λ_{α} aplica la bola unidad de X en B; mientras que la segunda opción afirma que existe un $x \in X$ tal que ninguna bola de Y contiene a $\Lambda_{\alpha} X$ para todo α .

A.2. Problemas abiertos

Aplicaciones

Al comienzo del segundo capítulo se mencionó que las f.c.g. parecen tener gran utilidad en la resolución numérica de problemas de valores iniciales en ecuaciones diferenciales ordinarias (véase [7]–[8]) y en el cálculo de una función spline aproximante en el intervalo compacto [a, b] que preserva una sucesión de momentos prefijados (véase [2]). Sin embargo, por lo que sabemos, a diferencia de las f.c. de Tipo-Gauss, no se han estudiado en profundidad en la literatura aplicaciones de las f.c.g., introducidas en esta Memoria.

Es bien sabido que las f.c. de Tipo-Gauss aparecen en la deducción de métodos Runge-Kutta generales (de tipo implícito) para la resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias de la forma $y' = f(t, y), y(0) = y_0, t \in [0, T]$, siendo indispensables para la integración de problemas "stiff" que aparecen con frecuencia en la práctica (en los que las soluciones varían rápidamente en ciertas regiones del dominio y de manera más lenta en otras). Por tanto, planteamos hacer uso de las f.c.g. introducidas en este trabajo para la integración numérica de otros tipos de problemas de valores en la frontera que no solo involucran valores de una función, sino también posiblemente de sus derivadas.

Experimentación numérica

Es importante destacar que existe escasa experimentación numérica en la literatura sobre las f.c.g., a diferencia de las f.c. de Tipo-Gauss. Cabe señalar que en el ejemplo numérico de la Sección 2.4 se realizó una contribución utilizando la función peso de Chebyshev, y se constató que la computación de f.c.g. para esta función peso está vinculada al cómputo de f.c. para funciones peso de tipo Jacobi. Planteamos realizar otros ejemplos con otras funciones pesos con el objetivo de obtener expresiones explícitas para los nodos y los pesos de las f.c.g. asociadas.

Caracterización de f.c.g. con nodos interiores

Respecto a la caracterización de f.c.g. con un número arbitrario de nodos interiores prefijados de multiplicidad par, cabe mencionar que, hasta donde sabemos, es un tema novedoso en la literatura que aún no ha sido estudiado. En la Sección 2.2, se exploró de manera simplificada qué ocurre cuando se fijaba uno o dos nodos en el interior del intervalo de integración para la f.c.g. (2.8). Asimismo, recordemos, tal y como se comentó anteriormente, que estas f.c.g. no coinciden exactamente con las conocidas f.c. de Gauss-Turán, en las cuales las multiplicidades de todos los nodos coinciden siendo par (véase (2.2)), mientras que las f.c.g. mencionadas en este trabajo permiten fijar nodos interiores con multiplicidades pares arbitrarias. Por lo tanto, parece razonable plantearse la posibilidad de obtener un teorema de caracterización para las f.c.g. con un número arbitrario de nodos interiores prefijados de multiplicidades pares arbitrarias, en el que los nodos de multiplicidad simple se obtienen a partir de una f.c. Gaussiana con respecto a una función peso positiva modificada, siendo por tanto sus pesos asociados positivos (véase la prueba del Teorema 23 para el caso de dos nodos). En cambio, se requiere encontrar un método para calcular los pesos restantes y estudiar si son positivos o no, bajo una serie de condiciones. Además, se propone buscar estimaciones del error similares a las analizadas en la Sección 2.3 para estas f.c.g.

Conexión con la circunferencia unidad

Es bien sabido que la transformación de Joukowski

$$x = \frac{1}{2}(z + z^{-1}), \ x \in [-1, 1], z \in \mathbb{T} = \{z \in \mathbb{C} : |z| = 1\}$$

permite relacionar f.c. de Tipo-Gauss con f.c. de Tipo-Szegő, que consisten en procedimientos numéricos para la estimación de integrales con respecto a una medida μ soportada en la circunferencia unidad T:

$$I_{\mu}(f) = \int_{-\pi}^{\pi} f(e^{i\theta}) d\mu(\theta).$$

Llevar a cabo un análisis detallado sobre este tipo de f.c. en la circunferencia unidad se escapa de los objetivos de esta Memoria. No obstante, sí que queremos plasmar como cuestión abierta la introducción en la literatura de las que podrían denominarse fórmulas de cuadratura de Tipo-Szegő generalizadas.

Bibliografía

- [1] ATKINSON, K. E. An Introduction to Numerical Analysis. Wiley, 1989.
- [2] BECKERMANN, B., BUSTAMANTE, J., MARTÍNEZ-CRUZ, R., QUESADA, J. M. Gaussian, Lobatto and Radau positive quadrature rules with a prescribed abscissa. *Calcolo* 51 (2014): 319–328.
- [3] BULTHEEL, A., CRUZ-BARROSO, R., VAN BAREL, M. On Gauss-type quadrature formulas with prescribed nodes anywhere on the real line. *Calcolo* 47, no. 1 (2010): 21–48.
- [4] CHIHARA, T. S. On quasi-orthogonal polynomials. Proc. Amer. Math. Soc. 8 (1957): 765–767.
- [5] DAVIS, P. J. Interpolation and Approximation. Dover Publications, Inc., 1975.
- [6] DAVIS, P. J., RABINOWITZ, P. Methods of Numerical Integration. Academic Press, New York, 1984.
- [7] GAUTSCHI, W. Orthogonal Polynomials: Computation and Approximation. Oxford University Press, 2004.
- [8] GAUTSCHI, W. Generalized Gauss-Radau and Gauss-Lobatto formulae. BIT Numerical Mathematics 44 (2004): 711–720.
- [9] JOULAK, H. A contribution to quasi-orthogonal polynomials and associated polynomials. *Appl. Numer. Math.* 54 (2005): 65–78.
- [10] JOULAK, H., BECKERMANN, B. On Gautschi's conjecture for generalized Gauss-Radau and Gauss-Lobatto formulae. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 233 (2009): 768–774.
- [11] KRYLOV, V. I. Approximate Calculation of Integrals. The MacMillan Company, New York, 1962.
- [12] MONEGATO, G. On polynomials ortogonal with respect to particular variable-signed weight functions. J. Appl. Math. and Phys. 31 (1980): 549– 555.
- [13] RUDIN, W. Real and Complex Analysis. McGraw-Hill Book Company, New York, 1970.

50 Bibliografía

- [14] RUDIN, W. Functional Analysis. McGraw-Hill Book Company, New York, 1973.
- [15] SHOHAT, J. On mechanical quadratures, in particular, with positive coefficients. Trans. Amer. Math. Soc. 42 (1937): 461–496.
- [16] WELFEST, B. D. The weights of classical Gauss-Radau quadratures with double end-point. Applied Numerical Mathematics 60 (2010): 574–586.

Generalized Quadrature Formulas

Ángel Álvarez Paredes

Facultad de Ciencias • Sección de Matemáticas

Universidad de La Laguna

alu0101325262@ull.edu.es

Abstract

UADRATURE FORMULAS (q.f.) are used to approximate the Qualue of a definite integral with respect to a positive Borel measure. In this report, starting from a weight function ω supported on an interval [a, b], the construction and characterization of interpolatory and Gauss-type rules are first addressed, as well as a brief introduction to the Theory of Orthogonal Polynomials and computational aspects.

The main aim of this work is discussed in the second chapter by introducing the so-called Generalized Quadrature Formulas (g.q.f.) of Gauss-type, which, unlike classical rules, nodes at the endpoints of arbitrary multiplicities may appear. These g.q.f. are particularly useful when integrating functions with singularities or oscillatory behavior, providing a more accurate approximation of the integral under consideration, and they have not been deeply studied in the literature. We consider also the possibility that some of the nodes could be fixed in advance in the rule with arbitrary even multiplicities. As far as we know, this has not been considered before in the literature. Convergence and error estimates are also analyzed, we provide an illustrative numerical example for the Chebyshev weight function of the first kind and we conclude with some related open problems.

1. Quadrature Formulas on the Real Line

Q.F. on the real line is a numerical integration method used to **A** Q.F. on the real line is a numerical magnetization of $I_w(f) = \int_a^b f(x)\omega(x)dx$. Motivated by the definition of the Riemann integral, a quadrature formula with n nodes is of the form:

$$I_n(f) = \sum_{k=1}^n A_k f(x_k), \quad x_j \in [a, b], \quad x_i \neq x_j, \quad \forall i \neq j.$$

The formula is of Interpolatory type when it is obtained from the unique interpolating polynomial to the function f at $\{x_k\}_{k=1}^n$, which are arbitrarily chosen, distinct from each other, and located in (a, b). The rule is obtained by integrating the corresponding interpolatory polynomial by using the Lagrange formula, so the weights A_k are determined by integrating the fundamental Lagrange polynomials over [a, b]. In this case, $I_n(P) = I_{\omega}(P)$, for all polynomials P of degree less than or equal to n-1. Thus, error estimates along with some properties such as stability and convergence results are analyzed. Finally, Gauss-type q.f. are examined, in which the nodes and weights are specifically determined to increase the domain of exactness as much as possible. It is shown that they can be efficiently computed as an eigenvalue and eigenvector problem associated with the corresponding Jacobi matrices (the n nodes in $I_n(f)$ are the roots of the *n*-th orthogonal polynomial with respect to ω). The possibility to fix in advance one or two nodes in the interior of the interval of integration is considered, along with the efficient computation from the associated modified Jacobi matrices.

2. Generalized Quadratura Formulas

.Q.F. contain nodes at the endpoints of the interval of integra-G ton of arbitrary multiplicities. These rules were introduced by Gautschi in 2004 ([1, 2]), they have not been studied deeply in the literature and they are of interest in some applied problems. These rules are of the form

$$I_{n,r,s}(f) = \sum_{j=0}^{r-1} \lambda_0^{(j)} \cdot f^{(j)}(a) + \sum_{k=1}^n A_k \cdot f(x_k) + \sum_{l=0}^{s-1} \lambda_{n+1}^{(l)} \cdot (-1)^l \cdot f^{(l)}(b).$$

TRABAJO FIN DE GRADO, Convocatoria de Mayo, 2023

It is shown that there exists an unique g.g.f. exact for all polynomials of degree less than or equal to 2n + r + s - 1. The interior nodes and weights can be obtained as Gaussian q.f. with respect to a modifed weight function, and the boundary weights can be computed by solving an upper triangular linear system of equations. The positivity of all the weights of this g.g.f. is proved, and convergence and error estimates results are obtained by using interpolation in the Hermite sense.

We have considered also the possibility to include in the g.q.f. some interior nodes fixed in advance of even arbitrary multiplicities. For example, a g.q.f. of the form

$$\begin{split} I_w(f) &\approx I_{n,r,s,t}(f) = \sum_{j=0}^{r-1} \lambda_0^{(j)} \cdot f^{(j)}(a) + \sum_{k=1}^n A_k \cdot f(x_k) \\ &+ \sum_{m=0}^{2t-1} \lambda_\tau^{(m)} \cdot f^{(m)}(\tau) + \sum_{l=0}^{s-1} \lambda_{n+1}^{(l)} \cdot (-1)^l \cdot f^{(l)}(b) \end{split}$$

As far as we know, the resulting g.q.f. that we have characterized have not been considered in the literature before.

3. A Numerical Example

THE OUTCOMES presented in the two preceding chapters have been numerically illustrated by analyzing one of the most significant weight functions in the mathematical literature, owing to its applications in Approximation Theory: the Chebyshev weight function of the first kind $\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, x \in (-1,1)$. We have considered the g.q.f. introduced for the first time in this work by taking $n\,=\,8,\,r\,=\,s\,=\,0$ and an interior fixed node $\tau\,=\,0.4$ of multiplicity two i.e., t = 1 (in this case it is proved that such q.f. does not exist if the multiplicity is equal to one). The interior nodes and weights are Gaussian with respect to the modified weight function $\omega_{0,0,2}(x) = (x - 0.4)^2 / \sqrt{1 - x^2}, x \in (-1, 1).$ The computed boundary weights are $\lambda_{0.4}^{(0)}=0.304736857364040$ and $\lambda_{0.4}^{(1)}=-0.022097021852320,$ and the interior nodes and weights are given by

ven	by

$x_1 = -0.98473512517794732718956550748$	$A_1 = 0.349910623529558$
$x_2 = -0.86536852495006358656184469799$	$A_2 = 0.350034630028403$
$x_3 = -0.6409279001098916452996249084$	$A_3 = 0.350375621866743$
$x_4 = -0.33814403234646547335878133154$	$A_4 = 0.351324369461540$
$x_5 = 0.0078367869813782108649229586441$	$A_5 = 0.355394708764607$
$x_6 = 0.63188489968512523629514766653$	$A_6 = 0.375113462385092$
$x_7 = 0.86395716818082093501398099943$	$A_7 = 0.353310541148629$
$x_8 = 0.98461422357039185099726011274$	$A_8 = 0.351391839041182$

4. Aside

Some open related problems have been included in an Addendum: we hope they will be of interest to the reader.

References

- [1] GAUTSCHI, W. Orthogonal Polynomials: Computation and Approximation. Oxford University Press, 2004.
- [2] GAUTSCHI, W. Generalized Gauss-Radau and Gauss-Lobatto formulae. BIT Numerical Mathematics 44 (2004): 711-720.
- [3] JOULAK, H., BECKERMANN, B. On Gautschi's conjecture for generalized Gauss-Radau and Gauss-Lobatto formulae. Journal of Computational and Applied Mathematics 233 (2009): 768-774.



Sección de Matemáticas Universidad de La Laguna