CUADRATURA GAUSSIANA

FABRICIO MACIÀ

Objetivo y contexto. Sea $\Delta = \{x_0, \ldots, x_N\}$ un conjunto de puntos o nodos del intervalo $[a,b]$, distintos dos a dos. Una regla de cuadratura

$$\mathscr{I}_\Delta(f) := \omega_0 f(x_0) + \ldots + \omega_N f(x_N), \quad f \in \mathscr{C}([a,b]),$$

es de *tipo interpolatorio* si

$$\mathscr{I}_\Delta(f) = \int_a^b P_f^\Delta(x)\, dx,$$

siendo P_f^Δ el polinomio interpolador de f por los nodos Δ. Los pesos $(\omega_i)_{i=0,\ldots,N}$ de una regla de tipo interpolatorio vienen completamente determinados por los nodos a través de la identidad:

$$\omega_I = \int_a^b \ell_i(x)\, dx, \quad i = 0, \ldots, N,$$

siendo ℓ_i el i-ésimo polinomio de la base de Lagrange asociada a Δ. Una regla de tipo interpolatorio tiene *grado de exactitud* mayor o igual a $\#\Delta - 1 = N$ (integra de forma exacta todos los polinomios de grado menor o igual a N).

Las regla de cuadratura Gaussiana surgen como respuesta a la siguiente pregunta. Fijado $N > 0$, ¿es posible elegir una familia Δ_O de $N+1$ nodos de tal manera que el grado de exactitud de $\mathscr{I}_\Delta$ sea máximo cuando $\Delta = \Delta_O$ de entre todas las posibles elecciones de $N+1$ nodos Δ en $[a,b]$?

Una primera caracterización. Comencemos investigando que condiciones han de cumplir una familia de $N+1$ nodos Δ para que

$$\mathscr{I}(q) = \int_a^b q(x)\, dx,$$

para cualquier polinomio q de grado $N+m$, con $m > 0$.

Obsérvese que, para un polinomio q de estas características, se cumple que:

$$q(x) - P_q^\Delta(x) = r(x)(x - x_0)\cdots(x - x_N),$$

siendo r un polinomio de grado $m-1$. Esto es consecuencia de que el polinomio:

$$p_{N+1}(x) := (x - x_0)\cdots(x - x_N), \tag{1}$$

divide a $q - P_q^\Delta$ en el anillo de los polinomios, al ser Δ raíces de $q - P_q^\Delta$.

Como consecuencia de esta observación, deducimos que si $\mathscr{I}_\Delta$ tiene grado de exactitud $N+m$ entonces:

$$0 = \int_a^b q(x)\, dx - \mathscr{I}_\Delta(q) = \int_a^b r(x) p_{N+1}(x)\, dx;$$

como q es un polinomio arbitrario de grado menor o igual a $N+m$, se sigue que r es un polinomio arbitrario de grado menor o igual a $m-1$. En particular, se tiene que verificar que

$$\int_a^b x^k p_{N+1}(x)\,dx = 0, \quad k = 0,\dots,m-1. \tag{2}$$

Obsérvese que $m-1 < N+1$; si $m = N+2$, la identidad (2) implicaría que

$$\int_a^b p_{N+1}(x)^2\,dx = 0,$$

lo cual forzaría a que $p_{N+1} = 0$, que es contradictorio.

De todo esto, concluimos que

- Una regla de tipo interpolatorio tiene a lo sumo grado de exactitud $2N+1 = 2\#\Delta - 1$.
- La existencia de una regla de tipo interpolatorio $\mathscr{I}_\Delta$ de grado e exactitud $2N+1$ es equivalente a la existencia de un polinomio mónico p_{N+1}, de grado $N+1$ y cuyas raíces sean precisamente Δ, que cumpla además (2) con $m = N+1$.

El resto de estas notas está dedicado a mostrar que existe un polinomio de grado $N+1$ con estas propiedades y a dar un procedimiento eficiente para calcular sus raíces, el conjunto Δ de nodos de las conocidas como reglas de cuadratura Gaussiana

Es posible además probar que los pesos de las reglas de cuadratura Gaussiana son siempre positivos. Esto tiene implicaciones prácticas importantes a la hora de minimizar efectos indeseados debidos a la artimética de precisión finita.

Polinomios ortogonales. La identidad (2) puede interpretarse como una relación de ortogonalidad dentro del espacio vectorial de los polinomios de grado a lo sumo $N+1$ equipado del producto escalar:

$$(p\,|\,q) := \int_a^b p(x)q(x)\,dx.$$

Demostremos la existencia de un polinomio mónico p_{N+1}, de grado $N+1$, cuyas raíces sean reales, simples y estén contenidas en $[a,b]$ y que sea ortogonal a todos los polinomios de grado a lo sumo N.

Aplicando el algoritmo de Gram-Schmidt a la familia de monomios $\{1, x, \dots, x^{N+1}\}$ deducimos la existencia de polinomios p_k de grado exactamente $k = 0,\dots,N+1$, con la propiedad de que p_k es ortogonal a todos los polinomios de grado a lo sumo $k-1$. Tras normalización, podemos suponer que cada polinomio p_k es además mónico.

Esto concluye la demostración de existencia de p_{N+1} salvo por la propiedad de localización y multiplicidad de sus raíces, que damos a continuación. Demostraremos que p_k posee k raíces reales simples en $[a,b]$.

Sean $c_1,\dots,c_r$ las raíces reales de p_k en $[a,b]$ contadas con sus multiplicidades; construyamos

$$q(x) = (x-c_1)\cdots(x-c_r).$$

Si $r < k$ entonces $(p_k \,|\, q) = 0$; pero por construcción, el siguno de $p_k q$ es constante en $[a,b]$. Esto fuerza a que $r = k$.

Supongamos ahora que alguna raíz es múlltiple. En ese caso existe un índice i y un polinomio r de grado $k-2$ tal que $p_k(x) = (x-c_i)^2 r(x)$. En ese caso:

$$0 = \int_a^b p_k(x) r(x)\, dx = \int_a^b (x-c_i)^2 r(x)^2\, dx,$$

lo cual implicaría la contradicción $0 = r = p$.

Cálculo de Δ_{O}. Pasemos a calcular p_{N+1}. Para ello vamos primero a demostrar la relación de recurrencia:

$$p_{k+1}(x) = (x-a_k)p_k(x) - b_k p_{k-1}(x), \quad k = 0,\ldots,N, \tag{3}$$

siendo $p_{-1} = 0$, $b_0 = 0$, y

$$a_k := \frac{\int_a^b x p_k(x)^2\, dx}{\|p_k\|^2}, \quad b_k := \frac{\|p_k\|^2}{\|p_{k-1}\|^2}.$$

Para ello observamos que

$$q(x) = p_{k+1}(x) - x p_k(x)$$

es un polinomio de grado menor o igual a k. Por ello

$$0 = (q \,|\, p_{k+1}) = \|p_{k+1}\|^2 - \int_a^b x p_k(x) p_{k+1}(x)\, dx,$$

y $q = \alpha_0 p_0 + \ldots + \alpha_k p_k$ con

$$\alpha_i = \frac{(q \,|\, p_i)}{\|p_i\|^2}.$$

Calculemos:

$$(q \,|\, p_i) = (p_{k+1} \,|\, p_i) - \int_a^b x p_k(x) p_i(x)\, dx = -\int_a^b x p_i(x) p_k(x)\, dx.$$

De aquí se sigue que $\alpha_i = 0$ si $i = 0,\ldots,k-2$ y:

$$\alpha_{k-1} = \frac{-\int_a^b x p_i(x) p_k(x)\, dx}{\|p_{k-1}\|^2} = -\frac{\|p_k\|^2}{\|p_{k-1}\|^2},$$

$$\alpha_k = -\frac{\int_a^b x p_k(x)^2\, dx}{\|p_k\|^2}.$$

Este procedimiento permite calcular eficientemente p_{N+1}; una vez calculado se hallan sus raíces y tenemos así los nodos de la regla de cuadratura Gaussiana.

Este método, no obstante, no es el más eficiente para calcularlos. A continuación, describimos un algoritmo alternativo. Las identitdades (3) se pueden escribir en forma vectorial como

$$\mathscr{J}\, P(x) = xP(x) - l(x),$$

siendo

$$\mathscr{J} := \begin{bmatrix} a_0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_1 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & b_{N-1} & a_{N-1} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & b_N & a_N \end{bmatrix},$$

$$P(x) := \begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \\ p_{N-1}(x) \\ p_N(x) \end{bmatrix},$$

$$l(x) := \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ p_{N+1}(x) \end{bmatrix}.$$

Por tanto x_j es raíz de p_{N+1} si y sólo si es un autovalor de $\mathscr{J}$. Los autovalores de $\mathscr{J}$ son fácilmente calculables numéricamente si nos damos cuenta de que $\mathscr{J}$ se puede conjugar a una matriz simétrica. Concretamente, si definimos

$$Q := \mathrm{diag}(\delta_0, \ldots, \delta_N), \quad \delta_0 = 1, \quad \delta_j = \sqrt{b_1 \ldots b_j},$$

Entonces $\tilde{\mathscr{J}} := Q^{-1} \mathscr{J} Q$ es simétrica y tridiagonal. Las entradas de la diagonal sub-principal son $\tilde{\mathscr{J}}_{i+1,i} = \sqrt{b_i}$, y la diagonal coincide con la de $\mathscr{J}$. Uno calcula entonces los autovalores de la matriz $\tilde{\mathscr{J}}$.