MARGARITA MATHEMATICA EN MEMORIA DE
JOSÉ JAVIER (CHICHO) GUADALUPE HERNÁNDEZ
(Luis Español y Juan L. Varona, editores),
Servicio de Publicaciones, Universidad de La Rioja,
Logroño, Spain, 2001.

POLINOMIOS ORTOGONALES, CUADRATURA GAUSSIANA Y PROBLEMAS DE VALORES PROPIOS

JOSÉ-JAVIER MARTÍNEZ

Dedicado a la memoria de José Javier (Chicho) Guadalupe, quien tan bien me acogió en mis inolvidables inicios como docente en el Colegio Universitario de La Rioja

Abstract. The basic theory of Gaussian quadrature formulae, as well as its connection with the classical theory of orthogonal polynomials and with eigenvalue problems is presented in a concise and clear way. The effective computation of the Gaussian formulae by means of several techniques and the relevant role computer algebra systems can play in the different phases of the computation are emphasized.

1. Introducción

Este artículo se centra en el problema de la construcción de *fórmulas de cuadratura gaussianas*, que se basa por un lado en la teoría de *polinomios ortogonales* y por otro (si se desea, como es natural, disponer de métodos eficientes y apropiados desde el punto de vista numérico) en el cálculo de *valores y vectores propios* de matrices.

Nuestro objetivo es condensar en unas breves páginas diversos conceptos y resultados que constituyen el fundamento de la construcción de dichas fórmulas de integración aproximada y configuran un núcleo de conocimientos básicos necesarios para abordar el estudio de importantes generalizaciones a las que hacemos referencia en la Sección 4. Para hacer accesible el trabajo al mayor número posible de lectores, normalmente no familiarizados con todos los aspectos abordados, se hace hincapié en la claridad de la exposición, basada por una parte en la precisión de los enunciados y por otra en una notación unificada que resume muy diversas contribuciones.

Destacaremos fundamentalmente investigaciones debidas a Golub y Welsch por una parte y a Gautschi por otra, los cuales, basándose en la obra de los matemáticos que les precedieron (algunos de ellos tan grandes como Gauss, Jacobi y Christoffel) abordaron, a partir del uso generalizado de los ordenadores, el problema de la construcción efectiva de las fórmulas.

Un enfoque más novedoso del problema —y al cual en nuestra opinión no se ha prestado la suficiente atención— consiste en el uso de sistemas de cálculo simbólico

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 65D30, 65D32, 33C45, 42C05, 65F15.

Key words and phrases. Orthogonal polynomials, Gauss quadrature formulas, eigenvalues, eigenvectors.

La investigación está subvencionada por el Proyecto BFM2000-1253 del Ministerio de Ciencia y Tecnología.

como *Maple* o *Mathematica*, que no solamente permiten hallar (o redescubrir) de manera exacta expresiones explícitas relacionadas con diferentes aspectos de los polinomios ortogonales, sino que para cálculos en precisión finita (es decir *no exactos*) nos permiten trabajar con un gran número de cifras significativas cuando ello resulte necesario. Este enfoque que hemos querido destacar debe contribuir a aumentar la utilidad de la exposición para un lector no especialista.

El resto del artículo se estructura en tres secciones. En la Sección 2 se introduce la noción de *fórmula de cuadratura de tipo interpolatorio* para abordar a continuación el caso particularmente importante de las fórmulas *gaussianas*, que son las que consiguen el grado de precisión óptimo entre las fórmulas de esa clase. Dado que las fórmulas gaussianas se basan en los polinomios ortogonales, se presentan a continuación los elementos básicos de la teoría de polinomios ortogonales y su aplicación a la construcción de las fórmulas de cuadratura.

La Sección 3, basada de manera esencial en la *relación de recurrencia* que verifican los polinomios ortogonales, nos conduce a descubrir la manera más eficiente de construir las fórmulas, mediante el cálculo de valores y vectores propios de una matriz tridiagonal simétrica. En esta sección presentamos con detalle la demostración del resultado central en el que se basa el algoritmo de Golub y Welsch, que combina de manera armoniosa los tres campos a que se refiere el título del artículo: las fórmulas de cuadratura, los polinomios ortogonales y el cálculo de valores propios.

Por último, en la Sección 4 introducimos brevemente una faceta esencial de todo lo expuesto anteriormente: su aplicabilidad a numerosos tipos de problemas relacionados con la extensión de la noción de polinomios ortogonales y de fórmulas de cuadratura gaussiana.

2. Fórmulas de cuadratura gaussianas y polinomios ortogonales

Sea $dw(x)$ una medida no negativa sobre el intervalo real (a, b) (que puede ser acotado o no acotado) tal que existen y son finitos los *momentos*

$$\mu_k := \int_a^b x^k \, dw(x), \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Queremos aproximar el valor de la integral

$$\int_a^b f(x) \, dw(x)$$

mediante una *fórmula de integración numérica* (o *fórmula de cuadratura*) de la forma

$$\int_a^b f(x) \, dw(x) \approx w_1 f(x_1) + \cdots + w_n f(x_n),$$

donde la integral de la función f respecto a la medida dw es aproximada por medio de una suma finita que involucra n valores de f en distintos *nodos* x_i adecuadamente seleccionados.

Consideraremos fórmulas *de tipo interpolatorio*, en las cuales la aproximación se obtiene integrando el polinomio de interpolación, es decir

$$\int_a^b f(x)\,dw(x) \approx \int_a^b p(x)\,dw(x),$$

donde $p(x)$ es el polinomio de interpolación de Lagrange de $f(x)$ en $x_1, \ldots, x_n$, que en la base de Lagrange $\{l_1(x), \ldots, l_n(x)\}$ viene expresado como

$$p(x) = f(x_1)l_1(x) + \cdots + f(x_n)l_n(x).$$

En otras palabras, la fórmula es de tipo interpolatorio si los *pesos* w_i vienen dados por

$$w_i = \int_a^b l_i(x)\,dw(x), \quad i = 1, \ldots, n.$$

El siguiente resultado facilita grandemente el cálculo de los pesos w_i:

Teorema 1. *Dados los nodos* $x_1, \ldots, x_n$*, la fórmula de cuadratura*

$$\int_a^b f(x)\,dw(x) \approx w_1 f(x_1) + \cdots + w_n f(x_n)$$

es de tipo interpolatorio si y sólo si es exacta para los polinomios $1,\ x,\ \ldots,\ x^{n-1}$.

El resultado anterior permite calcular los pesos w_i de la fórmula resolviendo el sistema lineal que se obtiene imponiendo las n condiciones de exactitud, es decir el sistema lineal

$$Vc = d,$$

donde

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

es una *matriz de Vandermonde traspuesta* y

$$d = (d_1, d_2, \ldots, d_n)^T,$$

con

$$d_k = \int_a^b x^{k-1}\,dw(x), \quad k = 1, \ldots, n.$$

La matriz de Vandermonde V^T es la matriz del sistema lineal cuya solución proporciona los coeficientes del polinomio de interpolación en $x_1, \ldots, x_n$. Los sistemas lineales con matrices de Vandermonde (o de Vandermonde traspuestas) pueden resolverse de manera eficiente mediante los algoritmos de Björck-Pereyra (ver [1], [12]).

La matriz V se construye fácilmente con *Maple V* mediante la instrucción

```
V:=transpose(vandermonde([x[1],x[2],x[3],x[4]]));
```

(si tenemos, por ejemplo, $n = 4$).

Se dice que la fórmula de cuadratura tiene grado de precisión d si es exacta para todo polinomio de grado menor o igual que d. Como hemos visto, una fórmula de tipo interpolatorio con n nodos posee al menos grado de precisión $n - 1$.

Puede probarse fácilmente mediante la teoría de polinomios ortogonales (ver, por ejemplo, [18]) que no puede construirse una fórmula de tipo interpolatorio con n nodos y grado de precisión $2n$. En consecuencia, el grado de precisión óptimo usando n nodos es $2n-1$. Las *fórmulas de cuadratura gaussianas* son las que alcanzan dicho grado de precisión óptimo.

La teoría de las fórmulas de cuadratura gaussianas se basa en la teoría de *polinomios ortogonales*, que resumimos, en sus aspectos básicos, a continuación. Una buena presentación de dicha teoría puede verse en el primer capítulo de [3].

Una sucesión de polinomios $\{p_j\}_{j=0}^{\infty}$, con $p_n(x)$ de grado n, se llamará sucesión de polinomios ortogonales respecto al producto escalar

$$(f, g) := \int_a^b f(x)g(x)\, dw(x)$$

(o, dicho de otra forma, respecto a la medida $dw(x)$) si se verifica

$$(p_j, p_k) = 0, \quad j \neq k.$$

Dada una sucesión de polinomios ortogonales respecto a una cierta medida, cada $p_n(x)$ está unívocamente determinado salvo multiplicación por una constante no nula. Por lo tanto una manera sencilla y general de establecer una única sucesión de polinomios ortogonales para cada medida es especificar que todos ellos sean *mónicos*, es decir con coeficiente director igual a 1.

Dada una medida $dw(x)$ tal que existe y es finito μ_k (el momento de orden k) para todo k, una condición suficiente para la existencia de una sucesión de polinomios ortogonales respecto a dicha medida es que la integral

$$\int_a^b q(x)\, dw(x)$$

sea positiva para todo polinomio $q(x)$ no idénticamente nulo y no negativo para todo x del intervalo (a, b).

El siguiente teorema establece una propiedad clave de los polinomios ortogonales de cara a la construcción de una fórmula de cuadratura, cual es el hecho de que las n raíces (en principio complejas) del polinomio ortogonal de grado n son reales y distintas:

Teorema 2. *Sea $p_n(x)$ el polinomio ortogonal (mónico) de grado n. Entonces, las n raíces de $p_n(x)$ son reales, simples y pertenecientes al intervalo abierto (a, b).*

Otro aspecto fundamental de la teoría de polinomios ortogonales es la existencia de *relaciones de recurrencia*, que son cruciales para el cálculo efectivo de los polinomios ortogonales y de las fórmulas de cuadratura gaussianas. Detallaremos esta parte de la teoría en la Sección 3.

Los tres teoremas siguientes, que pueden verse con su demostración en [18], resumen la teoría básica acerca de las fórmulas de cuadratura gaussianas.

Teorema 3. *Sean $x_1, \ldots, x_n$ las raíces del polinomio ortogonal $p_n(x)$ (de grado n) para la medida $dw(x)$ en (a,b). Supongamos que se hallan los pesos $w_1, \ldots, w_n$ imponiendo la exactitud para los polinomios de grado menor o igual que $n-1$, es decir que se construye la fórmula de tipo interpolatorio*

$$\int_a^b f(x)\, dw(x) \approx w_1 f(x_1) + \cdots + w_n f(x_n).$$

Entonces, dicha fórmula tiene grado de precisión $2n-1$.

El segundo resultado afirma que no es posible hallar por otro procedimiento otra fórmula de tipo interpolatorio con grado de precisión $2n-1$:

Teorema 4. *Si una fórmula*

$$\int_a^b f(x)\, dw(x) \approx w_1^* f(x_1^*) + \cdots + w_n^* f(x_n^*)$$

tiene grado de precisión $2n-1$, entonces los puntos x_i^* deben ser los ceros del polinomio ortogonal $p_n(x)$ para la medida $dw(x)$ en (a,b).

El último resultado afirma la positividad de los pesos:

Teorema 5. *En una fórmula de cuadratura gaussiana, todos los pesos w_i son positivos.*

Dado que las fórmulas de cuadratura gaussianas son en particular fórmulas de tipo interpolatorio, si se obtienen en primer lugar los nodos $x_1, \ldots, x_n$ como raíces del polinomio ortogonal $p_n(x)$, los pesos $w_1, \ldots, w_n$ pueden calcularse resolviendo el correspondiente sistema con la matriz de Vandermonde traspuesta [9].

Por ejemplo, haciendo uso de la función `solve` y de otras contenidas en los paquetes `linalg` (álgebra lineal) y `orthopoly` (polinomios ortogonales) de *Maple*, podemos hallar los nodos (que resultan ser $-\sqrt{3/5}$, 0, $\sqrt{3/5}$) y los pesos (que resultan ser $5/9$, $8/9$, $5/9$) de la fórmula de cuadratura de *Gauss-Legendre* con tres puntos en $(-1,1)$:

```
> with(linalg):
> with(orthopoly):
> r:=solve(P(3,x),x);
> V:=transpose(vandermonde([r[1],r[2],r[3]]));
> d:=vector([2,0,2/3]);
> w:=linsolve(V,d);
```

Debe observarse que mediante la orden `P(n,x)` del paquete `orthopoly`, *Maple* no nos proporciona los polinomios de Legendre (en $(-1,1)$) mónicos, sino los que verifican la condición $\phi_k(1) = 1$ para todos los valores de k, los cuales son de interés en ciertos problemas de ecuaciones diferenciales.

Si se conocen las raíces $x_1, \ldots, x_n$, otro procedimiento para calcular los pesos w_i es hacer uso de la siguiente relación, que puede obtenerse (ver [3], [14]) como consecuencia de la *forma confluyente de la identidad de Christoffel-Darboux*:

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{(p_k(x_i))^2}{\gamma_k} = \frac{1}{w_i}.$$

En la expresión anterior,

$$\gamma_k = \int_a^b (p_k(x))^2 \, dw(x),$$

es decir, el cuadrado de la norma de $p_k(x)$ respecto al producto escalar

$$(f, g) := \int_a^b f(x)g(x) \, dw(x).$$

Se debe ser cuidadoso al considerar la anterior relación, ya que en ocasiones aparece expresada como

$$\sum_{k=0}^{n-1} (\pi_k(x_i))^2 = \frac{1}{w_i},$$

en cuyo caso hay que tener presente que los $\pi_k(x)$ son los polinomios *ortonormales* (es decir ortogonales y de norma igual a uno):

$$\pi_k(x) = \frac{p_k(x)}{\sqrt{\gamma_k}}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

En [4] Gautschi indica que esta relación es particularmente adecuada (desde el punto de vista numérico) para el cálculo efectivo de los pesos, puesto que se trata de una suma de términos positivos. No obstante, el mismo autor advierte acerca de los problemas de *inestabilidad numérica* al trabajar con polinomios ortogonales *no clásicos*, es decir cuando no se tienen expresiones explícitas para los polinomios.

Es precisamente esta relación entre los pesos, los nodos y los polinomios ortogonales, junto con la relación de recurrencia que consideraremos a continuación, lo que permite reducir a un problema de valores y vectores propios el problema del cálculo de los nodos y los pesos de una fórmula de cuadratura gaussiana.

3. Cuadratura gaussiana y problemas de valores propios

Uno de los elementos fundamentales de la teoría de polinomios ortogonales es que pueden calcularse mediante una relación de recurrencia, tal como describimos a continuación (ver [2], [3], [7]).

Sea $\{p_j\}_{j=0}^{\infty}$ una sucesión de polinomios *mónicos* ortogonales respecto al producto escalar

$$(f, g) := \int_a^b f(x)g(x) \, dw(x),$$

es decir tales que

$$(p_j, p_k) = 0, \quad j \neq k.$$

Entonces, los polinomios p_j verifican la siguiente relación de recurrencia:

$$p_0(x) := 1, \quad p_1(x) := x - a_0,$$

$$p_{k+1}(x) = (x - a_k)p_k(x) - b_k p_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \ldots,$$

con coeficientes

$$a_k := \frac{(p_k, xp_k)}{(p_k, p_k)}, \quad k = 0, 1, \ldots,$$

$$b_k := \frac{(p_k, p_k)}{(p_{k-1}, p_{k-1})}, \quad k = 1, 2, \ldots.$$

Notemos que los coeficientes b_k son todos positivos, y que por lo tanto podemos tomar la raíz cuadrada positiva $\sqrt{b_k}$ de cada uno de ellos.

Se suele definir también

$$b_0 = \int_a^b dw(x),$$

es decir, la medida del intervalo (a, b).

Observemos que, partiendo de $p_0(x) = 1$, podemos combinar la relación de recurrencia con las expresiones de los a_k y b_k para construir tantos coeficientes a_k y b_k (y tantos polinomios $p_k(x)$) como deseemos. Este procedimiento ha sido llamado por Gautschi ([5], [7]) *procedimiento de Stieltjes.*

El problema que surge al tratar de aplicar dicho procedimiento es la dificultad de evaluar los productos escalares que determinan los coeficientes a_k y b_k, por lo que es habitual el uso de métodos relacionados con los momentos, como el *algoritmo de Chebyshev modificado* ([5], [7]).

No obstante, el procedimiento de Stieltjes puede ser llevado a la práctica en muchos casos si se hace uso de un sistema de cálculo simbólico para evaluar los coeficientes de manera exacta o con precisión finita pero con un número de cifras significativas suficientemente elevado para contrarrestar la posible inestabilidad numérica.

Por ejemplo, las siguientes instrucciones de *Maple* nos proporcionan los coeficientes a_k y b_k y los polinomios ortogonales mónicos en el caso de la *medida de Chebyshev* (es decir $dw(x) = (1 - x^2)^{-1/2}\, dx$) en el intervalo $(-1, 1)$:

```
> p[0]:=1;
> a[0]:=int(x*p[0]^2/sqrt(1-x^2),
  x=-1..1)/int(p[0]^2/sqrt(1-x^2),x=-1..1);
> b[0]:=int(1/sqrt(1-x^2),x=-1..1);
> p[1]:=x-a[0];
> for n from 1 to 9 do
  a[n]:=int(x*p[n]^2/sqrt(1-x^2),
  x=-1..1)/int(p[n]^2/sqrt(1-x^2),x=-1..1);
  b[n]:=int(p[n]^2/sqrt(1-x^2),
  x=-1..1)/int(p[n- 1]^2/sqrt(1-x^2),x=-1..1);
  p[n+1]:=expand((x-a[n])*p[n]-b[n]*p[n-1]);
> od;
```

Se obtienen de este modo los coeficientes bien conocidos (ver [7]) para los *polinomios de Chebyshev*: $a_k = 0$ para todo k, $b_0 = \pi$, $b_1 = \frac{1}{2}$, $b_k = \frac{1}{4}$ para $k = 2, 3, \ldots$

Partiendo solamente del conocimiento de los coeficientes a_k y b_k, el cálculo efectivo de los nodos x_i y los pesos w_i de la correspondiente fórmula de cuadratura gaussiana puede reducirse a un problema de valores y vectores propios para una matriz tridiagonal simétrica. Este resultado y el algoritmo correspondiente se deben a Golub y Welsch [13].

Pese a que dicho algoritmo se remonta (en su versión publicada) a 1969, casi tres décadas después puede leerse en [15] que es *el algoritmo definitivo* para el cálculo de las fórmulas de cuadratura gaussianas. Una versión del algoritmo está incluida en el reciente paquete de *software* debido a Gautschi que se describe extensamente, junto con la teoría correspondiente, en [8].

El resultado es el siguiente:

Teorema 6. *Sea*

$$J_n = \begin{pmatrix} a_0 & \sqrt{b_1} & \cdots & \cdots & 0 \\ \sqrt{b_1} & a_1 & \sqrt{b_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sqrt{b_{n-2}} & a_{n-2} & \sqrt{b_{n-1}} \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{b_{n-1}} & a_{n-1} \end{pmatrix}$$

la matriz de Jacobi (de orden n, tridiagonal y simétrica) construida a partir de los coeficientes a_k y b_k de la relación de recurrencia para los polinomios mónicos ortogonales respecto al producto escalar

$$(f,g) := \int_a^b f(x)g(x)\,dw(x).$$

Entonces, los nodos x_i de la correspondiente fórmula de cuadratura gaussiana con n puntos son los valores propios de J_n, y los pesos w_i vienen dados por

$$w_i = b_0 v_{i1}^2, \quad i = 1, 2, \ldots, n,$$

donde v_{i1} es la primera componente del vector v_i, el vector propio de norma euclídea igual a 1 asociado al valor propio x_i, y

$$b_0 = \int_a^b dw(x).$$

La afirmación del teorema anterior respecto a los nodos no es sorprendente (ver [17], [20]): siendo J_n una matriz tridiagonal simétrica, si denotamos por J_k ($1 \leq k \leq n$) la submatriz de J_n formada tomando sus primeras k filas y columnas, entonces se tiene que los polinomios característicos $q_1, \ldots, q_n$ de esas n matrices (definidos como $q_k = \det(xI - J_k)$ para que todos ellos tengan coeficiente director igual a 1) verifican (tomando $q_0(x) = 1$) la misma relación de recurrencia que los polinomios ortogonales mónicos $p_1, \ldots, p_n$. En particular, $p_n = q_n$ y así las raíces del polinomio ortogonal p_n son las raíces de q_n, es decir los valores propios de J_n.

Naturalmente, es también conocido que cualquier polinomio mónico es el polinomio característico (si definimos el polinomio característico de A como $\det(xI - A)$) de una cierta matriz: la llamada *matriz compañera* del polinomio, que en *Maple* se construye mediante la orden `companion` del paquete `linalg`. Lo realmente notable en el caso de los polinomios ortogonales es que son polinomios característicos de matrices *tridiagonales simétricas*.

Mucho menos evidente es la afirmación del teorema acerca de los pesos w_k. Golub y Welsch se basan en resultados que aparecen en [19], haciendo referencia en particular a la identidad de Christoffel-Darboux.

Merece la pena exponer la demostración de esta parte, no suficientemente clara en el muy citado artículo [13] debido a que Golub y Welsch no parten de la relación de recurrencia para los polinomios ortogonales mónicos.

Observemos en primer lugar que las relaciones de recurrencia para la polinomios mónicos

$$p_0(x) = 1, \quad p_1(x) = x - a_0,$$

$$p_{k+1}(x) = (x - a_k)p_k(x) - b_k p_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \ldots,$$

pueden reescribirse como

$$xp_0(x) = a_0 p_0(x) + p_1(x),$$

$$xp_k(x) = b_k p_{k-1}(x) + a_k p_k(x) + p_{k+1}(x).$$

A su vez, las relaciones anteriores pueden expresarse en forma matricial como sigue:

$$x \begin{pmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \\ p_{n-2}(x) \\ p_{n-1}(x) \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \\ p_{n-2}(x) \\ p_{n-1}(x) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ p_n(x) \end{pmatrix},$$

donde

$$T = \begin{pmatrix} a_0 & 1 & \cdots & \cdots & 0 \\ b_1 & a_1 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & b_{n-2} & a_{n-2} & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & b_{n-1} & a_{n-1} \end{pmatrix}$$

es una matriz tridiagonal.

Ahora bien, si x_i $(i = 1, \ldots, n)$ son las n raíces de $p_n(x)$ se tiene

$$x_i P_i = T P_i, \quad i = 1, \ldots, n,$$

donde

$$P_i = (p_0(x_i), \ldots, p_{n-1}(x_i))^T.$$

Es decir $x_1, \ldots, x_n$ son los valores propios de la matriz T y $P_1, \ldots, P_n$ son los correspondientes vectores propios.

Sin embargo, la matriz T no es simétrica. Para obtener una matriz simétrica, consideremos la matriz diagonal D de orden n con elementos diagonales $d_0, d_1, \ldots, d_{n-1}$, siendo $d_k = 1/\sqrt{\gamma_k}$ $(k = 0, 1, \ldots, n-1)$, donde

$$\gamma_k = \int_a^b (p_k(x))^2 \, dw(x).$$

Observemos que, a partir de la definición de los coeficientes b_k de la relación de recurrencia, se tiene

$$b_k = \frac{\gamma_k}{\gamma_{k-1}},$$

es decir

$$\frac{\sqrt{\gamma_k}}{\sqrt{\gamma_{k-1}}} = \sqrt{b_k}\,.$$

De este modo se tiene, para $k = 1, \ldots, n-1$,

$$\frac{d_{k-1}}{d_k} = \sqrt{b_k}, \qquad \frac{d_k}{d_{k-1}} = \frac{1}{\sqrt{b_k}},$$

y por lo tanto

$$DTD^{-1} = J_n,$$

donde J_n es la matriz de Jacobi de orden n del enunciado.

Ahora, J_n es una matriz semejante a T y por lo tanto tiene los mismos valores propios que T: los ceros del polinomio ortogonal $p_n(x)$.

Por otro lado, es fácil ver que si P_i es un vector propio de T asociado al valor propio x_i, entonces DP_i es un vector propio de $J_n = DTD^{-1}$ asociado al mismo valor propio. En consecuencia, para $i = 1, \ldots, n$,

$$Q_i = DP_i = \Big(\frac{p_0(x_i)}{\sqrt{\gamma_0}}, \ldots, \frac{p_{n-1}(x_i)}{\sqrt{\gamma_{n-1}}}\Big)^T$$

es un vector propio de J_n correspondiente al valor propio x_i.

Haciendo uso de la relación

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{(p_k(x_i))^2}{\gamma_k} = \frac{1}{w_i},$$

ya citada en la Sección 2 (consecuencia de la forma confluyente de la identidad de Christoffel-Darboux) se tiene que la norma euclídea de Q_i es $1/\sqrt{w_i}$. Es decir si v_i es el vector propio de J_n correspondiente a x_i con norma euclídea igual a 1, se tendrá

$$v_i = \sqrt{w_i}\, Q_i.$$

Finalmente, de esta relación se deduce fácilmente (teniendo en cuenta que $p_0(x_i) = 1$ para $i = 1, \ldots, n$, y que hemos definido $b_0 = \gamma_0$) que

$$w_i = b_0 v_{i1}^2,$$

donde v_{i1} es la primera componente del vector v_i, y

$$b_0 = \int_a^b dw(x).$$

Es importante observar el papel y el valor de b_0 en el enunciado del teorema, ya que en ocasiones (por ejemplo el mismo Golub en [11]) se cita el resultado como

$$w_i = v_{i1}^2,$$

de modo evidentemente incorrecto. Lo que explica este aparente error es que páginas atrás se ha supuesto (o simplemente se supone sin afirmarlo expresamente) $b_0 = 1$, y no vuelve a recordarse este hecho a la hora de enunciar el resultado.

Además del teorema anterior, se presenta en [13] un algoritmo que, partiendo del método QR de Francis y Kublanovskaya para el cálculo de los valores propios de J_n, simplifica el cálculo de los vectores propios normalizados debido a que solamente se necesita *la primera componente* de cada uno de ellos.

Si bien en [13] no se especifica la complejidad computacional, en [2] se destaca que, una vez conocidos los coeficientes a_k y b_k de la relación de recurrencia, los nodos y pesos de la fórmula de cuadratura gaussiana pueden calcularse (todos ellos) mediante el algoritmo de Golub-Welsch en $O(n^2)$ operaciones aritméticas.

4. Aplicaciones

Para las medidas *clásicas* (ver [7]), entre las que se encuentran las asociadas a los polinomios ortogonales de Jacobi, de Laguerre y de Hermite, son bien conocidos en forma explícita los coeficientes de las correspondientes relaciones de recurrencia. No obstante, los resultados que aparecen en las secciones precedentes muestran cómo calcular dichos coeficientes y los nodos y pesos de las correspondientes fórmulas de cuadratura gaussianas haciendo uso de un sistema de cálculo simbólico como *Maple* o *Mathematica* sin tener que recurrir a tablas dispersas en diversas referencias bibliográficas.

Aún más interesante es la posibilidad de aplicación de la teoría a medidas *no estándar* como las citadas en [6], [7]. Por ejemplo, podemos concretar una de las medidas no clásicas que aparecen en ciertas aplicaciones [7]: una *medida de Laguerre finita*, dada en un intervalo finito $(-c, c)$ por

$$dw(x) = e^{-x}\,dx.$$

Si elegimos $c = 2$ y tratamos de hacer los cálculos con 16 cifras significativas en *Maple*, la inestabilidad numérica hace imposible el cálculo correcto de los coeficientes de la relación de recurrencia. Afortunadamente, *Maple* (a diferencia de los sistemas tradicionales de cálculo numérico con precisión finita) permite aumentar cuanto queramos el número de cifras significativas y así, tomando 25 cifras significativas con la orden `Digits:=25`, conseguimos generar los correspondientes polinomios ortogonales (al menos hasta grado 10).

Otra fuente importante de aplicaciones de la teoría (básica) que hemos presentado es que constituye la base para extensiones posteriores de las fórmulas de cuadratura de Gauss: las fórmulas de Gauss-Radau, de Gauss-Lobatto y de Gauss-Kronrod (ver [2], [9], [15]).

Finalmente, una generalización aún mayor consiste en considerar *polinomios ortogonales en espacios de Sobolev* (ver por ejemplo [16]). Una aplicación importante de la teoría de las dos secciones anteriores al caso de *polinomios ortogonales de tipo Sobolev* puede verse en [10]. En dicho artículo se muestra la utilidad de las fórmulas de cuadratura gaussianas en la generalización del procedimiento de Stieltjes para el cálculo de los coeficientes de la relación de recurrencia que verifican los polinomios de tipo Sobolev.

Referencias

[1] A. Björck y V. Pereyra, Solution of Vandermonde systems of equations, *Math. Comp.* **24** (1970), 893–903.

[2] D. Calvetti, G. H. Golub, W. B. Gragg y L. Reichel, Computation of Gauss-Kronrod quadrature rules, *Math. Comp.* **69** (2000), 1035–1052.

[3] T. S. Chihara, *An introduction to orthogonal polynomials*, Gordon and Breach, Nueva York, 1978.

[4] W. Gautschi, Construction of Gauss-Christoffel quadrature formulas, *Math. Comp.* **22** (1968), 251–270.

[5] W. Gautschi, On generating orthogonal polynomials, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* **3** (1982), 289–317.

[6] W. Gautschi, Some new applications of orthogonal polynomials, en *Polynômes Orthogonaux et Applications* (Proceedings, Bar-le-Duc 1984, C. Brezinski, A. Draux, A. P. Magnus, P. Maroni y A. Ronveaux, eds.) *Lecture Notes in Mathematics* **1171**, Springer-Verlag, Berlín (1985), 63–73.

[7] W. Gautschi, Computational aspects of orthogonal polynomials, en *Orthogonal polynomials* (Columbus, OH, 1989, P. Nevai, ed.), NATO ASI Ser. C, Math. Phys. Sci. **294**, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht (1990), 181–216.

[8] W. Gautschi, Algorithm 726: ORTHPOL — A package of routines for generating orthogonal polynomials and Gauss-type quadrature rules, *ACM Trans. Math. Software* **20** (1994), 21–62.

[9] W. Gautschi, Orthogonal polynomials and quadrature, *Electron. Trans. Numer. Anal.* **9** (1999), 65–76.

[10] W. Gautschi y M. Zhang, Computing orthogonal polynomials in Sobolev spaces, *Numer. Math.* **71** (1995), 159–183.

[11] G. H. Golub, Some modified matrix eigenvalue problems, *SIAM Rev.* **15** (1973), 318–334.

[12] G. H. Golub y C. F. Van Loan, *Matrix computations*, 3.ª edición, Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1996.

[13] G. H. Golub y J. H. Welsch, Calculation of Gauss quadrature rules, *Math. Comp.* **23** (1969), 221–230.

[14] F. B. Hildebrand, *Introduction to numerical analysis*, 2.ª edición, Dover Publications, Nueva York, 1987.

[15] D. P. Laurie, Calculation of Gauss-Kronrod quadrature rules, *Math. Comp.* **66** (1997), 1133–1145.

[16] F. Marcellán, M. Alfaro y M. L. Rezola, Orthogonal polynomials in Sobolev spaces: old and new directions, *J. Comput. Appl. Math.* **48** (1993), 113–131.

[17] J. Stoer y R. Bulirsch, *Introduction to numerical analysis*, 2.ª edición, Springer-Verlag, Nueva York, 1993.

[18] A. H. Stroud, *Numerical quadrature and solution of ordinary differential equations*, Springer-Verlag, Nueva York, 1974.

[19] H. Wilf, *Mathematics for the physical sciences*, Wiley, Nueva York, 1962.

[20] J. H. Wilkinson, *The algebraic eigenvalue problem*, Clarendon Press, Oxford, 1965.

Departamento de Matemáticas, Universidad de Alcalá, Campus Universitario, 28871 Alcalá de Henares (Madrid), Spain

Correo electrónico: `jjavier.martinez@uah.es`

URL: `http://www2.alcala.es/matema/pp/jjavier/`