POLINOMIOS PARA-ORTOGONALES Y FÓRMULAS DE CUADRATURA PARA INTEGRANDOS PERIÓDICOS

Pablo González Vera

Es por todos bien conocido que el cálculo de una integral definida resulta un problema sumamente familiar para cualquier estudiante de un primer curso de ciencias o ingeniería. Por otro lado, también es sabido que los orígenes de tal problema se remontan a los de las propias matemáticas, pues el mismo está conceptualmente ligado al cálculo de un área plana, estando tal cuestión ya presente entre egipcios y griegos (Método de exhaución de Arquímedes). Con todo, es a partir del siglo XVI cuando la integración numérica, entendiendo como tal el estudio que permite determinar el valor numérico de una integral, desarrolla una gran abundancia de métodos. Éstos incluyen, entre otros, el caso del teorema fundamental del cálculo, series infinitas, relaciones funcionales, ecuaciones diferenciales y transformadas integrales. Junto a otros, tenemos los métodos de integración aproximada, basados en las *fórmulas de cuadratura* y donde una integral se aproxima por una combinación lineal de valores del integrando. A saber:

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx \approx A_1 f(x_1) + \ldots + A_n f(x_n) = I_n(f)$$

En la fórmula anterior, $x_1, \ldots, x_n$ son las *abscisas* o *nodos* de la fórmula de cuadratura $I_n(f)$ y $A_1, \ldots, A_n$ sus correspondientes *coeficientes* o *pesos*. Así, para cada n natural fijo, se dispone de 2n parámetros que habrán de seleccionarse *adecuadamente* de modo que $I_n(f)$ proporcione una estimación *razonable* de I(f). Por ejemplo, en caso de que [a,b] sea finito, tomando los nodos igualmente espaciados, es decir: $x_j = a + (j-1)h$, $j=1,..,n$, con $h = \frac{b-a}{n-1}$ $(n>1)$ surge, a partir de consideraciones geométricas elementales, la bien conocida *regla trapezoidal* donde $A_1 = A_n = \frac{h}{2}$ y $A_j = h$; $j = 2, \ldots, n-1$. Ahora bien, cuando el integrando presenta singularidades próximas al intervalo de integración

(piénsese por ejemplo en el cálculo de $\int_{-1}^{1} \frac{\sqrt{e^x}}{1-x^2}\,dx$),

la evaluación de $f(x_j)$ para cierto x_j puede resultar problemática. De aquí que se considere conveniente trabajar integrales de la forma

$$I_w(f) = \int_a^b f(x)w(x)dx \tag{1.2}$$

donde se supone que f es *suficientemente suave*, concentrándose las singularidades en w(x) (función peso), la cual supondremos no negativa en el intervalo de integración. Escribiendo:

$$I_w(f)=\int_a^b f(x)w(x)dx \approx \sum_{j=1}^{n} A_j f(x_j) = I_n(f) \tag{1.3}$$

vemos que los coeficientes $A_1, \ldots, A_n$ dependen, en general, del peso w(x), el cual supondremos fijo, pudiendo $f(x)$ variar.

Antes de proseguir creemos obligado reflexionar sobre el siguiente aspecto: Con la gran cantidad de métodos existentes (algunos muy sofisticados) para calcular integrales, ¿vale la pena realmente profundizar en el estudio de las fórmulas $I_n(f)$ del tipo (1.3) (bastante elementales y primitivas)? La respuesta es muy simple: los procedimientos matemáticos sofisticados no siempre *funcionan* y aun haciéndolo, puede que no resulten apropiados desde un punto de vista computacional.

Así, consideremos por un momento el teorema fundamental del cálculo que permite escribir $\int_a^b f(x)w(x)dx = F(b) - F(a)$, siendo F una primitiva de $f(x)w(x)$.

Sin embargo, todos sabemos que el proceso de integración conduce a menudo a nuevas funciones trascendentes, a veces muy enrevesadas (intente el lector calcular una primitiva de $f(x)=\frac{1}{1+x^4}$) involucrando funciones de difícil evaluación y haciendo que métodos que aparentan ser *exactos* en la superficie, se conviertan en "aproximados" cuando descendemos a las profundidades de los procesos numéricos efectivos. Dicho esto, surge de inmediato, la siguiente cuestión: dada una fórmula de cuadratura $I_n(f)= \sum A_j f(x_j)$, qué criterio seguir en la elección de los parámetros $x_1, \ldots, x_n$ y $A_1, \ldots A_n$ de forma que $I_n(f)$ proporcione una estimación *razonable* de $I_w(f) = \int_a^b f(x)w(x)dx$. Teniendo en cuenta que toda función continua se puede aproximar uniformemente por polinomios en [a,b], parece apropiado utilizar el criterio que determine $x_1, \ldots, x_n$ y $A_1, \ldots, A_n$ de modo que la correspondiente cuadratura $I_n(f)$, *integre exactamente* polinomios del mayor grado posible. Esto conduce a un sistema no lineal de $2n$ ecuaciones con $2n$ incógnitas. A saber:

$$\sum_{j=1}^{n} A_j f(x_j) = \int_a^b f(x)w(x)dx\,; \qquad k = 0, 1, \ldots, 2n-1.$$

Introduciendo el polinomio $Q_n(x)$ que tiene por ceros los nodos $x_1, \ldots, x_n$, se comprueba que satisface la siguiente relación

$$\int_a^b Q_n(x)x^j w(x)dx = 0; \qquad j=0,1,\ldots,n-1$$

o dicho con otras palabras, $Q_n(x)$ es ortogonal a cualquier polinomio de grado n-1 con respecto al producto interior inducido por w(x), esto es,

$$(f, g)_w = \int_a^b f(x)\overline{g(x)}w(x)dx.$$

La relación existente entre *polinomios ortogonales* y *fórmulas de cuadratura* ha facilitado un desarrollo inusitado de éstas en los últimos treinta años, tanto desde un punto de vista cualitativo (propiedades de convergencia, teoremas de caracterización) como computacional (cálculo de nodos y pesos, estimación del error, etc...). Para más detalle, puede verse el trabajo de W. Gautschi ([1]).

Integrandos periódicos

Supongamos ahora que en lugar de la integral $I_w(f)$ dada por (1.2) estamos interesados en estimar el valor numérico de

$$I_\sigma(f) = \int_a^b f(\theta)\sigma(\theta)d\theta, \quad a=0,\ b=2\pi \tag{2.1}$$

siendo f una función periódica de periodo 2π en $[0,2\pi)$ y $\sigma(\theta)$ una función peso no negativa en dicho intervalo. Integrales del tipo (2.1) surgen de modo natural, por ejemplo, en la solución de ciertos problemas de frontera sobre la circunferencia unidad.

Para la aproximacion de (2.1) de nuevo proponemos una fórmula de cuadratura del tipo

$$I_n(f)= \sum_{j=1}^{n} \lambda_j f(\theta_j); \quad \theta_j \neq \theta_k,\ \text{si } j \neq k;\ \theta_j \in [0,2\pi) \tag{2.2}$$

pero ahora exigiendo que en lugar de integrar exactamente polinomios algebraicos, integre polinomios trigonométricos de grado k:

$$T(\theta) = a_0 + \sum_{j=1}^{k} a_j \cos(j\theta) + b_j \operatorname{sen}(j\theta) \tag{2.3}$$

siendo k un entero no negativo (dependiendo de n) lo más grande posible. Esto viene justificado por el hecho conocido que toda función periódica y continua en $[0,2\pi)$ puede aproximarse uniformemente por polinomios trigonométricos.

Pasando del intervalo $[0,2\pi)$ a la circunferencia unidad que denotaremos por $T= \{z\in C,\ |z|=1\}$ y de los polinomios trigonométricos (2.3) al espacio de polinomios de Laurent

$$p<q,\ \Delta_{p,q} =\{L(z) = \sum_{j=p}^{q} \alpha_j z^j;\ \ \alpha^j \in C\} \tag{2.4}$$

podemos reformular nuestro problema en los siguientes términos:

"Dada una integral sobre T, $I_\sigma(f)= \int_a^b f(e^{i\theta})\,\sigma(\theta)\,d\theta$, $(a=0,\ b=2\pi)$ determinar n puntos distintos sobre T; z_k ; $k=1,...,n$ y n pesos λ_k, $k=1,...,n$ de modo que se cumpla:

$$I_\sigma(L)= I_n(L) = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j L(z_j);\ \ \forall\, L \in \Delta_{-k,k} \tag{2.5}$$

k entero no negativo, tan grande como sea posible".

Aquí estamos suponiendo que las integrales $\mu_j = \int_a^b e^{ij\theta}\,\sigma(\theta)\,d\theta$, $(a=0,\ b = 2\pi)$

existen y son fácilmente computables $\forall$ j $\in$ Z (obsérvese que $\mu_{-j} = \mu_j$). En el libro clásico de integración numérica de V. I. Krylov ([5]) se da una respuesta al problema anterior para el caso particular de la función peso $\sigma(\theta) = 1$. Se puede ver que el mayor valor de k=k(n) alcanzable es n-1, siendo los nodos z_j las raíces enésimas de la unidad (o rotaciones de éstas), mientras que los pesos λ_j son todos iguales, es decir: $\lambda_j = \frac{2\pi}{n}$; j=1,...,n

Es fácil comprobar que la fórmula $I_n(f)$ así obtenida coincide con la regla trapezoidal aplicada a la integral $\int_a^b f(e^{i\theta})\, d\theta$, (a=0, b=2π). Esto en cierto modo explica los buenos resultados numéricos que se obtienen cuando se utiliza la regla trapezoidal para integrandos periódicos continuos. Con todo, la obtención de la fórmula $I_n(f)$ para $\sigma(\theta)=1$ depende fuertemente de las propiedades de las raíces de la unidad. Cabría preguntarse cómo proceder cuando $\sigma(\theta)$ sea una función peso arbitraria. Esto nos lleva al concepto de para-ortogonalidad que veremos a continuación.

Polinomios para-ortogonales

Teniendo en cuenta la relación existente entre fórmulas de cuadratura y polinomios ortogonales para intervalos de la recta real, parece lógico pensar que los polinomios ortogonales sobre la circunferencia unidad o polinomios de Szegö jugasen un papel similar. Sin embargo, aparece un hecho que cambia por completo el panorama. En efecto, sea $\rho_n(z)$ el enésimo polinomio de Szegö para $\sigma(\theta)$ es decir, $\rho_n(z)$ es el polinomio de grado n, el cual, salvo factor multiplicativo, viene caracterizado por:

65

$$(\rho_n(z), z^j)_\sigma = \int_a^b \rho_n(e^{i\theta})\, e^{-ij\theta}\, \sigma(\theta)d\theta = 0; \quad (a=0,\ b=2\pi), \quad j=0,1,\dots,n-1.$$

Se sabe que los ceros de $\rho_n(z)$ se encuentran todos en el interior de la circunferencia unidad. Por tanto no pueden usarse como nodos en la fórmula $I_n(f)$.

Esto llevo a Jones, Njåstad y Thron en el año 1989 (véase [4]), a las siguientes consideraciones, movidos por la necesidad de determinar fórmulas de cuadratura sobre la circunferencia unidad, para intentar resolver el llamado *problema trigonométrico de los momentos* de gran interés en el procesamiento de señales digitales. Así, introduciendo el polinomio *recíproco* de ρ_n el cual viene dado por,

$$\rho_n^*(z) = z^n \rho_n\left(\frac{1}{\bar{z}}\right),$$

está claro que si $\rho_n(z)$ tiene sus ceros en el interior de la circunferencia unidad, $\rho_n^*(z)$ los tendrá en el exterior de la misma; de modo que diversos experimentos numéricos permiten conjeturar que los ceros de

$$\rho_n(z) + \tau\rho_n^*(z) \quad (|\tau|=1)$$

debían estar sobre T. Esto fue probado por los autores anteriores en [4]. Además, si $z_1, ..., z_n$ son los ceros de

$$X_n(z) = \rho_n(z) + \tau\rho_n^*(z) \quad (|\tau|=1),$$

se pueden determinar números positivos λ_j , j = 1,...,n, de modo que la fórmula de cuadratura $I_n(f) = \sum_{j=1}^{n} f(z_j)$ sea exacta en el espacio de los polinomios de Laurent $\Delta_{-(n-1),n-1}$, no existiendo fórmulas de cuadratura del tipo anterior con nodos sobre T que sean exactas ni en $\Delta_{-(n-1),n}$ ni en $\Delta_{-n,n-1}$. Los polinomios de la forma

$$X_n(z) = \rho_n(z)+\tau\rho_n^*(z) \quad (|\tau|=1),$$

se denominan *para-ortogonales* pues satisfacen las condiciones de ortogonalidad

$$(X_n(z),z^j)_\sigma = 0; \qquad j=1,...,n-1;$$

representando el sustrato teórico sobre el que, en nuestra opinión, debe sustentarse el estudio de las fórmulas de cuadratura sobre la circunferencia unidad, tema de investigación incipiente (véase [2] y [3]) pero de gran interés y aplicabilidad.

A modo de sencillo ejemplo ilustrativo, consideremos el caso de la función peso $\sigma(\theta)=1$ comprobándose fácilmente que $\rho_n(z) = z^n$ y por tanto $\rho_n^*(z)=1$. Así pues, los polinomios para-ortogonales vendrán dados por

$$X_n(z) = \rho_n(z) + \tau\rho_n^*(z) = z^n + \tau, \quad (|\tau|=1),$$

cuyos ceros son la raíces enésimas de $-\tau$, con lo cual, recuperamos de forma directa e inmediata las fórmulas introducidas en la Sección 2 (tómese $\tau = -1$).

Bibliografía

[1] Gautschi, W.: A survey of Gauss-Christoffel quadrature formulae. En E. B. Christoffel, the influence of his work in Mathematics and Phisical Sciences, eds. P.L. Butzer et al, Birkhäuser, Basel. *Advances in Computational Mathematics 5* (1981) pp. 72-147.

[2] Golinskii, L.: *A Quadrature formula and zeros of para-ortogonal polynomials on the unit circle*. Preprint 2000.

[3] González-Vera, P., Santos-León, J. C y Olav Njåstad. Some results about numerical quadrature on the unit circle. *Advances in Computational Mathematics 5* (1996) pp. 297-328.

[4] Jones, W. B., Njåstad, O. y Thron, W. J.: Moment theory, orthogonal polynomials, quadrature, and continued fractions associated with the unit circle. *Bull. London Math. Soc. 21* (1989) pp. 113-152.

[5] Krylov, V. I.: *Approximate Calculation of Integrals*. Mc Millan Co., Nueva York (1962).