

TESIS DOCTORAL

Computación de funciones hipergeométricas y su aplicación a las cuadraturas gaussianas

Autor: Diego Ruiz Antolín

Directores: José Javier Segura Sala
Amparo Gil Gómez



Universidad de Cantabria
Departamento de Matemáticas, Estadística y Computación
2017

Agradecimientos

Heme aquí pensando qué quiero agradecer a las personas que tengo en mente. Es muy sencillo saber quiénes van a ser los protagonistas de este apartado, pero tan difícil expresar todo lo que les quiero agradecer sin correr el riesgo de quedar algo en el tintero. Espero que estas palabras cubran en gran medida todo lo que quiero transmitir y sepáis perdonar lo que no haya mencionado.

Al Dr. José Javier Segura Sala y a la Dra. Amparo Gil Gómez por haberme acompañado a lo largo de toda esta experiencia doctoral. Siempre os habéis preocupado porque mi doctorado fuera lo más provechoso posible cubriendo con creces mis expectativas en la elaboración de mi currículum como investigador. Doy gracias por ese primer día en que me acerqué al despacho de Javier para que me contara en qué consistía su investigación, convenciéndome de que ese era el lugar en el que quería estar. Soy consciente de que en ciertos momentos os habéis tenido que armar de paciencia esperando una reacción por mi parte, sin llegar a perder nunca la esperanza, y es algo por lo que siempre os estaré agradecido y dudo que nunca olvide a lo largo de mi vida académica.

Al Ministerio de Economía por la ayuda BES-2013-064743, a los miembros del proyecto de investigación MTM2012-34787 por admitirme entre sus filas y a la Universidad de Cantabria por todo lo que me ha enseñado. La experiencia universitaria fue completa y muy satisfactoria y llena de profesores que han sabido transmitir la pasión que predicaban por las matemáticas.

A mis padres, por los valores que me han transmitido desde la más tierna infancia. Todos intuimos qué se debe esperar de la vida pero no siempre es fácil interiorizar todo lo que una persona debe ser y vosotros habéis sabido hacer que fuera tan fácil aprenderlo que sin darme cuenta soy esa persona que esperabais conocer algún día. También os agradezco mucho el enorme sacrificio que habéis tenido que hacer para que pudiera llegar hasta aquí. Sé que no ha sido fácil renunciar a tantas cosas y todo el trabajo que habéis tenido que invertir para que pudiera realizar mis estudios y quiero que sepáis que vuestro esfuerzo no ha sido en vano. Sois uno de los pilares más importantes de mi vida y no existen palabras para describir cuanto os quiero.

A mis amigos y compañeros de carrera por haber sido un apoyo constante a lo largo de toda la experiencia universitaria. Desde el primer día formamos una piña y juntos logramos acabar la carrera y labrarnos un futuro. En especial quiero agradecer a Marta y a Juanfri que sean mis mejores amigos. Siempre habéis estado presentes en los mejores y en los peores momentos, celebrando mis triunfos y aconsejándome en mis derrotas. Os considero prácticamente mis hermanos y sé que pase lo que pase, estaremos ahí para lo que sea.

A las personas que, aunque no aparecen aquí mencionadas explícitamente, han formado también parte de este recorrido y que de alguna forma han hecho su aportación.

A todos vosotros, mi eterno agradecimiento.

*“Alicia suspiró, aburrida.
—Creo que podrían emplear mejor el tiempo
—dijo—, y no perderlo en acertijos sin solución.
—Si conocieras al Tiempo como yo —dijo el
Sombrerero—, no hablarías de emplearlo o perderlo.”*

*Alicia en el País de las Maravillas
Lewis Carroll*

Índice general

Preámbulo	1
1. Computación de funciones gamma incompletas	3
1.1. Definición y propiedades	4
1.2. Expansiones en serie de potencias	5
1.3. Relaciones de recurrencia	7
1.4. Expansiones asintóticas uniformes	8
1.5. Expansión de tipo Poincaré	11
1.6. Cuadratura numérica a partir de representaciones integrales	12
1.7. Esquemas de evaluación numérica	12
1.7.1. Caso $z > 0$	13
1.7.2. Caso $z < 0$	16
2. Cálculo de cotas para cocientes de funciones de Bessel modificadas	21
2.1. Resultados generales	22
2.2. Caso de la función $I_\nu(x)$	23
2.2.1. Cotas obtenidas por proceso iterativo	26
2.2.2. Análisis computacional de las cotas obtenidas	30
2.3. Caso de la función $K_\nu(x)$	33
2.3.1. Cotas obtenidas por proceso iterativo	35
2.3.2. Análisis computacional de las cotas obtenidas	37
2.4. Observaciones finales	37
3. Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas	39
3.1. Introducción	39
3.2. Aspectos computacionales de las aproximaciones asintóticas a los nodos y pesos de las cuadraturas gaussianas	43
3.3. Métodos iterativos para el cálculo de cuadraturas gaussianas	53

3.3.1. Descripción general del método iterativo	54
3.3.2. Transformaciones de Liouville de las ecuaciones diferenciales	56
3.3.3. Comportamiento asintótico de los pesos	58
3.3.4. Algoritmo para calcular la cuadratura de Gauss-Hermite	61
3.3.5. Algoritmo para calcular la cuadratura de Gauss-Laguerre	65
3.3.6. Cuadratura de Gauss-Jacobi: elementos básicos	73
3.3.7. Comentarios finales	75

Apéndices **76**

A. Expansiones Asintóticas para Polinomios de Hermite, Laguerre y Jacobi **79**

A.1. Polinomios de Hermite	79
A.2. Polinomios de Laguerre	82
A.2.1. Una primera expansión en términos de funciones de Bessel	82
A.2.2. Otra expansión en términos de funciones de Bessel	83
A.2.3. Expansión en funciones de Airy	84
A.3. Polinomios de Jacobi	85

Preámbulo

Dentro de la matemática computacional, el desarrollo de algoritmos eficientes para evaluar funciones matemáticas constituye una línea de incuestionable utilidad, por sus numerosas aplicaciones en diversos campos de la ciencia, ingeniería y economía. Desde esta perspectiva, el cálculo de funciones de tipo hipergeométrico es particularmente relevante. Un ejemplo prototipo son las funciones de Bessel y su vinculación a problemas en física e ingeniería: estas funciones aparecen en la solución de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales en dominios con simetría cilíndrica (como fibras ópticas) o en la transformada de Fourier de funciones con simetría radial, por mencionar sólo un par de aplicaciones. Particularmente relevantes en el ámbito de la economía y la probabilidad aplicada son, por otra parte, las denominadas funciones gamma incompletas ya que están asociadas a funciones de distribución de probabilidad para determinados rangos de valores de sus parámetros [36].

Abordar el problema de obtener un método eficiente para evaluar numéricamente las funciones hipergeométricas para todos los rangos admisibles de parámetros es una tarea complicada que parece que no va a encontrar solución a medio plazo. Sin embargo, ya se dispone de software para la evaluación de este tipo de funciones para algunos casos particulares como los arriba citados. Tal es el caso de las funciones gamma incompletas $\gamma(a, z)$ y $\Gamma(a, z)$ para las que existe desde hace años software para su evaluación eficiente en el caso de parámetro z positivo [15, 22]. Permaneciendo abierta la cuestión para el parámetro z negativo, con algún estudio particular como en [54], recientemente hemos desarrollado un algoritmo en [18] que funciona en una amplia región del parámetro z negativo y que describimos aquí en el Capítulo 1.

Podemos observar, como veremos en el Capítulo 1, que una misma función puede satisfacer varias propiedades que permiten la obtención de fórmulas para su evaluación numérica y dichas fórmulas tener un comportamiento más eficiente que otras en determinadas regiones de parámetros. Usualmente, la elección de un método u otro dependerá tanto de su rango de aplicabilidad como su de eficiencia, y también estará limitado por el rango de computabilidad de las funciones. Para este último aspecto, es interesante disponer de

Preámbulo

acotaciones para las funciones involucradas. Precisamente en el Capítulo 2 describimos el proceso de obtención de cotas para cocientes de funciones de Bessel modificadas, descritas en [45].

Como ya hemos mencionado, las funciones hipergeométricas están presentes en multitud de problemas científicos, pero también aparecen implicadas en diferentes ámbitos de la matemática como el análisis numérico; de hecho, uno de los aspectos centrales de esta tesis es la evaluación numérica de nodos y pesos de una de las reglas de cuadratura numérica más populares: las reglas de cuadratura gaussianas. Para calcular cuadraturas gaussianas de orden moderado, un algoritmo bien conocido es el algoritmo de Golub-Welsch. Sin embargo, dicho método no es eficiente para cuadraturas de orden alto, para las que es preferible usar métodos iterativos. En el Capítulo 3 describimos métodos iterativos para el cálculo de las cuadraturas clásicas de Gauss-Hermite y Gauss-Laguerre para órdenes tanto grandes como pequeños y que además tienen convergencia garantizada. Dichos métodos combinan varios esquemas de evaluación numérica de los polinomios ortogonales implicados junto a un método de punto fijo convergente globalmente y con orden de convergencia 4. De manera complementaria, en el Capítulo 3 también hacemos un análisis computacional de la evaluación de nodos y pesos de las cuadraturas cuando se utilizan aproximaciones asintóticas uniformes para su estimación.

Como se podrá apreciar en la exposición detallada de los contenidos de esta tesis, en el Capítulo 1 ponemos de manifiesto la necesidad de combinar varios métodos de aproximación para establecer algoritmos precisos y eficientes de computación de una función dependiente de dos parámetros. Por otra parte, en el Capítulo 2 se abordan aproximaciones más simples que aunque pueden ser menos precisas, proporcionan aproximaciones analíticas que son de utilidad en diversas aplicaciones. Por último, el tercer Capítulo es un ejemplo del problema de la evaluación de funciones aplicado a un problema clásico del análisis numérico como es la cuadratura gaussiana. Es de esperar que los resultados que recoge la presente tesis doctoral sirvan como punto de partida para abordar la computación de casos más generales de funciones hipergeométricas, así como otros problemas de interés en el ámbito de la matemática computacional.

1

Computación de funciones gamma incompletas

Las funciones gamma incompletas $\gamma(a, z)$ y $\Gamma(a, z)$ son un tipo de funciones especiales que tienen gran importancia por su vinculación a diversos problemas en el ámbito científico y tecnológico, lo que ha requerido que se considere estudiar su evaluación numérica eficiente para diversos valores de sus parámetros a y z . En la literatura, hay numerosas aplicaciones cuando la variable z es positiva; por ejemplo, [36, 4]. Para valores negativos de la variable z , la función gamma incompleta aparece, por ejemplo, en el estudio de plasmas de Bose [35, 34] y en el análisis de la ecuación de Helmholtz [39, 37].

Respecto a los métodos de computación de estas funciones, se dispone de multitud de fórmulas para su cálculo. Así, por ejemplo, podemos encontrar expansiones en serie [1], expansiones asintóticas [11, 52, 43], fracciones continuas [33], relaciones de recurrencia [29], etc. No obstante, muchas de las propiedades utilizadas en este capítulo aparecen detalladas en el *NIST Handbook of Mathematical Functions* [41] y algunas de ellas están desarrolladas con mayor extensión en [51].

Desde el punto de vista algorítmico, en el caso en que ambos parámetros de la función son reales, se han descrito algoritmos eficientes para evaluar estas funciones cuando el parámetro z es positivo en [15] y [22]. En el caso en que z es negativo, hemos estudiado métodos y establecido un algoritmo que permite alcanzar una precisión elevada en una región de parámetros amplia y que describimos en [18].

Para la construcción de estos algoritmos se han utilizado diversas relaciones funcionales como las que hemos mencionado arriba. Un análisis heurístico en cada una de las regiones de validez de estos métodos permite determinar las zonas en las que son más eficientes frente a otros métodos. Asimismo, alguno de los métodos analizados (como por ejemplo las cuadraturas numéricas para representaciones integrales) no son eficientes computacionalmente aunque sí permiten disponer de métodos de comprobación del error cometido al utilizar otros métodos que sí son más eficientes.

1.1. Definición y propiedades

Antes de detallar los métodos de cálculo usados para la evaluación de las funciones gamma incompletas es conveniente dar una definición explícita de dichas funciones y citar ciertas propiedades básicas satisfechas por estas funciones.

Definición 1.1 *Se definen las funciones gamma incompletas $\gamma(a, z)$ y $\Gamma(a, z)$ de la siguiente forma:*

$$\gamma(a, z) = \int_0^z t^{a-1} e^{-t} dt, \quad \Gamma(a, z) = \int_z^\infty t^{a-1} e^{-t} dt. \quad (1.1)$$

donde a y z son, en general, parámetros complejos y t^a toma su valor principal. Además, $\operatorname{Re}(a) > 0$ en la definición de $\gamma(a, z)$ y para $\Gamma(a, z)$ asumimos que $|\arg z| < \pi$.

Observación 1.2 *En la literatura también aparecen mencionadas como función gamma incompleta inferior para referirse a la función $\gamma(a, z)$ y función gamma incompleta superior para referirse a la función $\Gamma(a, z)$.*

Observación 1.3 *A partir de la definición, se cumple que*

$$\gamma(a, z) + \Gamma(a, z) = \Gamma(a). \quad (1.2)$$

Observación 1.4 *Aunque la definición de la función $\gamma(a, z)$ no es válida para valores de la parte real de a negativos, esta función admite representaciones que sí permiten extender su validez al caso $\operatorname{Re}(a) < 0$. Por señalar alguna, podemos relacionar la función gamma incompleta inferior con la función hipergeométrica confluyente*

$$M(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!}$$

mediante la siguiente fórmula

$$\gamma(a, z) = a^{-1} z^a e^{-z} M(1, a+1, z) = a^{-1} z^a M(a, a+1, -z)$$

donde $(a)_n$ es el símbolo de Pochhammer definido por

$$(a)_0 = 1, (a)_n = a(a+1) \cdots (a+n-1) = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)}, \quad n \geq 1.$$

Observación 1.5 Una normalización conveniente de las funciones gamma incompletas es la dada por las funciones $P(a, z)$ y $Q(a, z)$ definidas como

$$P(a, z) = \frac{\gamma(a, z)}{\Gamma(a)}, \quad Q(a, z) = \frac{\Gamma(a, z)}{\Gamma(a)}, \quad (1.3)$$

que cumplen la propiedad de que $P(a, z) + Q(a, z) = 1$. Estas funciones normalizadas aparecen de forma más natural en la aplicación de las funciones gamma incompletas en problemas de estadística, por ejemplo.

Otra normalización importante de la función gamma incompleta inferior, es

$$\gamma^*(a, z) = \frac{z^{-a}}{\Gamma(a)} \gamma(a, z) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^1 t^{a-1} e^{-zt} dt, \quad (1.4)$$

que tiene la propiedad de ser real positiva para todo valor real de a y z .

Cuando a es entero no negativo, se pueden calcular directamente las funciones gamma incompletas aplicando repetidamente integración por partes, obteniendo

$$\gamma(a+1, z) = a! \left[1 - e^{-z} \sum_{m=0}^a \frac{z^m}{m!} \right],$$

$$\Gamma(a+1, z) = a! e^{-z} \sum_{m=0}^a \frac{z^m}{m!}.$$

1.2. Expansiones en serie de potencias

Las dos siguientes expansiones en serie son útiles en el desarrollo de algoritmos numéricos,

$$\gamma^*(a, z) = e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\Gamma(a+n+1)} = \frac{1}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-z)^n}{n!(a+n)}. \quad (1.5)$$

Vamos a explicar brevemente cómo se obtienen. En primer lugar, partiendo de la definición de $\gamma(a, z)$, hacemos el cambio de variable $t = z(1-u)$

$$\gamma(a, z) = \int_0^z t^{a-1} e^{-t} dt = z^a e^{-z} \int_0^1 (1-u)^{a-1} e^{uz} du.$$

Computación de funciones gamma incompletas

A continuación, desarrollamos en serie de potencias la función exponencial que hay dentro del integrando y tenemos que

$$\gamma(a, z) = e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{a+n}}{n!} \int_0^1 (1-u)^{a-1} u^n du = e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{a+n}}{n!} B(n+1, a),$$

donde $B(p, q)$ es la *integral beta de Euler* que cumple la fórmula

$$B(p, q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}.$$

Finalmente, obtenemos la primera expansión en serie de $\gamma(a, z)$

$$\gamma(a, z) = e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{a+n}}{n!} \frac{\Gamma(n+1)\Gamma(a)}{\Gamma(n+1+a)} = e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{a+n}}{(a)_{n+1}}.$$

Para obtener la segunda expansión en serie, vamos a expandir en serie de potencias la función e^{-t} que aparece en el integrando de la definición de $\gamma(a, z)$ y tendremos

$$\gamma(a, z) = \int_0^z t^{a-1} e^{-t} dt = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^z t^{a-1+n} dt = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{z^{a+n}}{a+n}.$$

Finalmente aplicamos el escalado usado para obtener $\gamma^*(a, z)$ a partir de $\gamma(a, z)$ y ya tenemos las expansiones deseadas.

Dichas series son convergentes salvo en el caso de a entero negativo. Asimismo, hay que tener cuidado cuando a sea de la forma $a = -n + \epsilon$, $n = 1, 2, \dots$ y ϵ pequeño. En este caso conviene reescribir la expansión en serie de $\gamma^*(a, z)$ de la forma

$$\gamma^*(-n + \epsilon, z) = z^n \frac{\Gamma(1+n-\epsilon)}{n!} \frac{\sin \pi \epsilon}{\pi \epsilon} + \frac{1}{\Gamma(-n+\epsilon)} \sum_{k=0, k \neq n}^{\infty} \frac{(-z)^k}{k!(-n+\epsilon+k)}. \quad (1.6)$$

que permite obtener el resultado

$$\gamma^*(-n, z) = z^n \quad (1.7)$$

cuando $\epsilon \rightarrow 0$.

1.3. Relaciones de recurrencia

Las siguientes relaciones de recurrencia, obtenidas directamente de la representación integral de las funciones gamma incompletas usando integración por partes

$$\gamma(a+1, z) = a\gamma(a, z) - z^a e^{-z}, \quad \Gamma(a+1, z) = a\Gamma(a, z) + z^a e^{-z}, \quad (1.8)$$

son muy útiles para el cálculo numérico de dichas funciones cuando se dispone de valores iniciales para empezar el proceso recursivo. No obstante, la dirección en la que se aplica la recurrencia no se puede elegir de forma arbitraria dado que el condicionamiento del cálculo de soluciones de las relaciones de recurrencia fija la dirección en la que se debe aplicar la recurrencia.

Combinando dos relaciones sucesivas de las recurrencias de dos términos dadas en (1.8) es posible obtener la siguiente relación de recurrencia de tres términos

$$y_{a+2} - (a+1+z)y_{a+1} + azy_a = 0 \quad (1.9)$$

que es satisfecha tanto por $\gamma(a, z)$ como por $\Gamma(a, z)$.

La aplicación del teorema de Perron-Kreuser [58] a esta recurrencia junto con el hecho de que para valores positivos de a y z se cumple

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\gamma(a, z)}{\Gamma(a, z)} = 0 \quad (1.10)$$

permite establecer que $\gamma(a, z)$ es la solución mínima, es decir recesiva, de la recurrencia cuando $a \rightarrow \infty$ y $\Gamma(a, z)$ es una solución dominante de la misma.

Del mismo modo, aplicando el teorema de Perron-Kreuser a (1.9) cuando $a \rightarrow -\infty$ ocurre algo similar pero el papel desempeñado por las soluciones cambia. En este caso, tanto $\gamma(a, z)$ como $\Gamma(a, z)$ son dominantes cuando $a \rightarrow -\infty$. No damos una prueba de este resultado, pero sólo recordamos que $\gamma(a, z) + \Gamma(a, z) = \Gamma(a)$ y que, utilizando la fórmula de reflexión

$$\Gamma(a) = \frac{\pi}{\sin(\pi a)} \frac{1}{\Gamma(1-a)}, \quad (1.11)$$

vemos que $\Gamma(a)$ tiende a cero rápidamente cuando $a \rightarrow -\infty$ y se puede comprobar que no es así para $\Gamma(a, z)$. Todo esto nos lleva a que $\Gamma(a, z) \approx \gamma(a, z)$ cuando a es negativo y grande en valor absoluto, de lo que se puede deducir que, en efecto, ambas soluciones son dominantes.

También hay que señalar que estos resultados sobre la dominancia de las soluciones de la recurrencia (1.9) son válidos cuando $|a|$ es grande, pero para valores moderados el comportamiento puede ser distinto.

Computación de funciones gamma incompletas

Hemos visto que $\Gamma(a, z)$ es dominante cuando $a \rightarrow \infty$ y cuando $a \rightarrow -\infty$, lo que indica que para algún valor de a se ha de producir una transición entre el comportamiento dominante de una y otra dirección de recurrencia. Esta transición se produce aproximadamente para los valores de a tales que $-a = z$. Observamos que la recurrencia (1.9) tiene, para a negativo, coeficiente negativo en el término y_a , mientras que el coeficiente asociado a y_{a+1} cambia de signo cuando $z = -(a + 1)$, como se explica en [7]. Esto es un indicativo del cambio de tendencia mencionado. Por lo tanto, esperamos que la recurrencia para $\Gamma(a, z)$ sea aplicable en la dirección de a creciente si $a > -z$ y en la dirección contraria si $a < -z$ ($z > 0$).

Volviendo a la obtención de fórmulas de recurrencia, también podemos obtener a partir de (1.8) la relación de recurrencia para la función escalada $\gamma^*(a, z)$

$$z\gamma^*(a + 1, z) = \gamma^*(a, z) - \frac{e^{-z}}{\Gamma(a + 1)}. \quad (1.12)$$

Cuando a y z son ambos negativos, podemos reemplazar (a, z) por $(-a - 1, -z)$ y usando la fórmula de reflexión $\Gamma(a + 1)\Gamma(-a) = -\frac{\pi}{\sin(\pi a)}$ en (1.12), obtenemos la relación de recurrencia

$$\gamma^*(-a - 1, -z) + z\gamma^*(-a, -z) = -\frac{1}{\pi} \sin(\pi a) e^z \Gamma(a + 1). \quad (1.13)$$

Asimismo, podemos combinar como antes dos relaciones de recurrencia de dos términos (1.12) para obtener la relación de recurrencia a tres términos

$$z(a + 1)\gamma^*(a + 2, z) - (a + 1 + z)\gamma^*(a + 1, z) + \gamma^*(a, z) = 0, \quad (1.14)$$

o bien, si partimos de (1.13), obtenemos

$$\gamma^*(-a - 2, -z) + (z + a + 1)\gamma^*(-a - 1, -z) + z(a + 1)\gamma^*(-a, -z) = 0. \quad (1.15)$$

La ventaja de usar (1.14) o (1.15) en lugar de (1.12) o (1.13) es que se evitan posibles problemas de pérdida de precisión al usar constantemente el término inhomogéneo de estas últimas dos ecuaciones.

1.4. Expansiones asintóticas uniformes

Cuando a y z son negativos y tienen valor absoluto grande, es conveniente usar expansiones asintóticas uniformes para evaluar las funciones. Tal y como se detalla en [52],

partiendo de la función $\gamma^*(a, z)$ para a y z negativos, hacemos el cambio (a, z) por $(-a, -z)$ y tenemos

$$\gamma^*(-a, -z) = z^a \left\{ \cos(\pi a) - \sqrt{\frac{2a}{\pi}} e^{\frac{1}{2}a\eta^2} \sin(\pi a) \left[\sqrt{\frac{2}{a}} F\left(\eta\sqrt{\frac{a}{2}}\right) + \frac{1}{a} T_a(\eta) \right] \right\}, \quad (1.16)$$

donde η se define usando

$$\frac{1}{2}\eta^2 = \lambda - 1 - \log(\lambda), \quad \lambda = \frac{z}{a}, \quad \text{sign}(\eta) = \text{sign}(\lambda - 1). \quad (1.17)$$

Siguiendo el esquema de [52], es conveniente considerar la normalización de la función gamma $\tilde{\gamma}_a(z)$ que se define mediante la relación

$$\gamma^*(-a, -z) = z^a \cos(\pi a) + \sin(\pi a) \Gamma(a) e^z \tilde{\gamma}_a(z), \quad (1.18)$$

con lo que la función $\tilde{\gamma}_a(z)$ queda de la forma

$$\tilde{\gamma}_a(z) = -\frac{a}{\pi \Gamma^*(a)} \left[\sqrt{\frac{2}{a}} F\left(\eta\sqrt{\frac{2}{a}}\right) + \frac{1}{a} T_a(\eta) \right]. \quad (1.19)$$

Usando ahora (1.18) en la relación de recurrencia inhomogénea (1.13), obtenemos

$$-\tilde{\gamma}_{a+1}(z) + \frac{z}{a} \tilde{\gamma}_a(z) + \frac{1}{\pi} = 0. \quad (1.20)$$

Démonos cuenta de que en (1.16) y en (1.19) hemos usado la función $F(z)$ conocida como *integral de Dawson*, que se define como

$$F(z) = e^{-z^2} \int_0^z e^{t^2} dt = -\frac{1}{2} i \sqrt{\pi} e^{-z^2} \text{erf } iz, \quad (1.21)$$

donde erf es la función error.

La integral de Dawson se puede calcular de forma muy eficiente usando la fracción continua (ver [5][Eq. (13.1.13b)])

$$-2ze^{-z^2} \int_0^z e^{t^2} dt = \frac{-F_1 z^2}{1 + G_1 z^2 + \frac{F_2 z^2}{1 + G_2 z^2 + \frac{F_3 z^2}{\ddots}}} \quad (1.22)$$

Computación de funciones gamma incompletas

donde los coeficientes están definidos de la forma

$$\begin{aligned} F_1 = 2, \quad F_m &= \frac{4(m-1)}{(2m-3)(2m-1)}, \quad m \geq 2, \\ G_m &= \frac{-2}{2m-1}, \quad m \geq 1. \end{aligned} \quad (1.23)$$

La función $T_a(\eta)$ en (1.16) y en (1.19) tiene una expansión asintótica en potencias negativas de a

$$T_a(\eta) \sim \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{C_n(\eta)}{a^n}, \quad (1.24)$$

donde los coeficientes $C_n(\eta)$ se pueden obtener a partir de la ecuación diferencial que satisface $T_a(\eta)$:

$$\frac{d}{d\eta} T_a(\eta) + a\eta T_a(\eta) = a(f(\eta)\Gamma^*(a) - 1), \quad (1.25)$$

donde $f(\eta)$ y $\Gamma^*(a)$ se definen como

$$f(\eta) = \frac{\eta}{\lambda - 1}, \quad \Gamma^*(a) = \sqrt{a/(2\pi)} e^a a^{-a} \Gamma(a). \quad (1.26)$$

Sustituyendo la expansión asintótica (1.24) en (1.25) y usando la expansión de la inversa de $\Gamma^*(a)$

$$\frac{1}{\Gamma^*(a)} \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\gamma_n}{a^n}, \quad a \rightarrow \infty, \quad (1.27)$$

se obtiene la siguiente relación entre los coeficientes $C_n(\eta)$

$$C_0(\eta) = \frac{1}{\lambda - 1} - \frac{1}{\eta}, \quad \eta C_n(\eta) = \frac{d}{d\eta} C_{n-1}(\eta) + \gamma_n f(\eta), \quad n \geq 1. \quad (1.28)$$

Cuando $|\eta|$ es pequeño, las singularidades evitables en las representaciones de los coeficientes de C_n pueden producir inestabilidad numérica. Por este motivo, conviene expandir la función $T_a(\eta)$ en potencias de η

$$T_a(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} \omega_n \eta^n. \quad (1.29)$$

Para hallar los coeficientes ω_n usamos la ecuación diferencial (1.25) que satisface $T_a(\eta)$. Sustituyendo la expansión (1.29) en (1.25) y usando los coeficientes d_n de la expansión

$$\frac{\eta}{\lambda - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} d_n \eta^n, \quad d_0 = 1, \quad d_1 = -\frac{1}{3}, \quad d_2 = \frac{1}{12}, \quad (1.30)$$

tenemos que

$$\omega_1 = a (\Gamma^*(a) - 1), \quad (1.31)$$

y, en general,

$$\omega_n = -\frac{n+2}{a}\omega_{n+2} + d_{n+1}\Gamma^*(a), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.32)$$

Si consideramos

$$\omega_n = \alpha_n \Gamma^*(a), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.33)$$

tendremos la recurrencia

$$\alpha_n = -\frac{n+2}{a}\alpha_{n+2} + d_{n+1}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.34)$$

Con esto, podemos aplicar el algoritmo de Miller [21][Cap. 4.6] para hallar la sucesión de valores $\alpha_n, n = 0, 1, 2, \dots$. Dado que

$$\frac{1}{\Gamma^*(a)} = 1 - \frac{1}{a}\alpha_1, \quad (1.35)$$

tenemos la aproximación de $T_a(\eta)$

$$T_a(\eta) \approx \frac{a}{a - \alpha_1} \sum_{n=0}^N \alpha_n \eta^n. \quad (1.36)$$

1.5. Expansión de tipo Poincaré

Dado a positivo y acotado, se puede obtener una expansión de tipo Poincaré que es útil para el caso en que $|z|$ es grande, usando la relación de $\gamma^*(a, z)$ con la función de Kummer $M(a, b, z)$,

$$\gamma^*(a, z) = \frac{1}{\Gamma(a+1)} M(a, 1+a, -z), \quad (1.37)$$

y la expansión [41][Eq. 13.7.1]. De aquí, obtenemos la expansión

$$\gamma^*(a, -z) \sim \frac{e^z}{z\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1-a)_n}{z^n}. \quad (1.38)$$

1.6. Cuadratura numérica a partir de representaciones integrales

Las funciones gamma incompletas están definidas a partir de una representación integral. Por ello, parece razonable pensar que mediante algún cambio de variable adecuado, sería posible obtener una representación adecuada para el uso de ciertas reglas de cuadratura numérica.

Sea $a > 0$, consideramos en (1.4) el cambio z por $-z$

$$\gamma^*(a, -z) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^1 y^{a-1} e^{zy} dy.$$

Ahora consideramos el cambio de variable $r = \log\left(\frac{y}{1-y}\right)$ que nos proporciona la expresión

$$\gamma^*(a, -z) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_{-\infty}^{\infty} (1 + e^{-r})^{-(a+1)} e^{z(1+e^{-r})^{-1}} e^{-r} dr, \quad (1.39)$$

y que podemos simplificar tomando $r = \sinh(t)$, obteniendo

$$\gamma^*(a, -z) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(t)^{a+1} e^{z\phi(t)} e^{-r(t)} \cosh(t) dt, \quad (1.40)$$

donde $\phi(t) = (1 + e^{-r(t)})^{-1}$.

Como se menciona en [50], la regla trapezoidal es un método de integración numérica especialmente indicado para integrandos en \mathbb{R} que decaen de forma doblemente exponencial. Para más detalles ver [21][Sec. 5.4].

1.7. Esquemas de evaluación numérica

Una vez analizados los métodos de cálculo, se está en condiciones de establecer algoritmos para el cálculo de las funciones gamma incompletas.

En el caso en que la variable z es real positiva, se dispone de varios algoritmos eficientes para la evaluación de estas funciones con a parámetro real (ver [15], [22]).

Para el caso en que la variable z es real negativa, el único algoritmo publicado, con anterioridad a nuestro trabajo, era el dado en [54], aunque restringido a valores semienteros del parámetro a . Recientemente hemos presentado en [18] un algoritmo para la evaluación de estas funciones para la región de parámetros $(a, z) \in [-500, 500] \times [-500, 0)$ con una precisión elevada complementando así los resultados obtenidos en [22] y superando el esquema propuesto en [54].

Dado que la función gamma, $\Gamma(a)$, aparecerá a lo largo de toda la sección en varios algoritmos, en adelante supondremos que disponemos de algoritmos para calcular de forma eficiente esta función, como por ejemplo, el software propuesto en [24].

1.7.1. Caso $z > 0$

Basado, en parte, en el trabajo de Gautschi [15], en el artículo de Gil, Segura y Temme [22] se trata la evaluación de las funciones gamma incompletas, más concretamente de sus versiones normalizadas (1.3), para valores de a y z reales y positivos. Por completitud, resumimos a continuación los elementos principales involucrados en el cálculo.

Para z positivo y a negativo, el método de evaluación propuesto por Gautschi en [15] es similar (basado en la fracción continua de Legendre para la función $\Gamma(a, z)$), salvo para z pequeño, en cuyo caso se utiliza recurrencia para $\Gamma(a, z)$ en sentido de a decreciente.

Seguimos en esta sección la notación del artículo en términos de las funciones gamma incompletas normalizadas (1.3). Para el cálculo de las funciones $P(a, z)$ y $Q(a, z)$, se calcula para cada par (a, z) el valor de la función primaria (la menor de las dos) y la otra utilizando la relación

$$P(a, z) + Q(a, z) = 1.$$

Para empezar, se define una función para separar el cuadrante (z, a) en dos partes para asignar la función primaria. Esta elección está basada en estimaciones asintóticas que en la práctica demuestran ser una elección bastante precisa (en [15] se usa una función similar que en [22] fue ligeramente mejorada). La función es

$$\alpha(z) = \begin{cases} z & \text{si } z \geq \frac{1}{2} \\ \frac{\ln(\frac{1}{2})}{\ln(\frac{1}{2}z)} & \text{si } 0 < z < \frac{1}{2} \end{cases}$$

Así, la función primaria será

$$P(a, z) \text{ si } a \geq \alpha(z)$$

$$Q(a, z) \text{ si } a < \alpha(z).$$

El algoritmo que se describe en [22] utiliza diversos métodos, dependiendo de la región del cuadrante (z, a) en el que se esté trabajando. Estas regiones se ilustran en la Figura 1.1.

Estos dominios se determinaron buscando un equilibrio entre eficiencia y precisión en la evaluación de las funciones. Si dos métodos proporcionan la misma precisión en cierta región, se elige el más eficiente de los dos métodos.

Los métodos utilizados en las diferentes regiones se mencionan a continuación.

Computación de funciones gamma incompletas

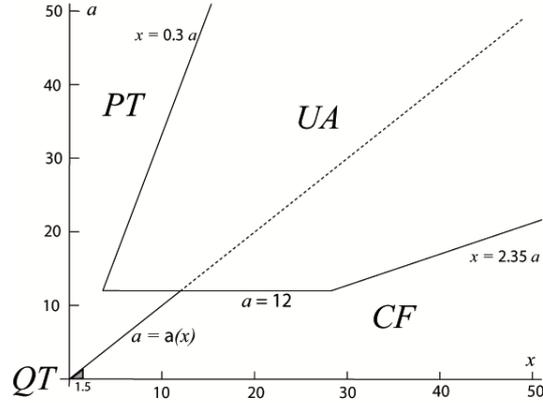


Figura 1.1: Regiones del plano (z, a) donde se aplican los distintos métodos de cálculo para las funciones $P(a, z)$ y $Q(a, z)$.

(PT) En este caso la función primaria es $P(a, z)$ y se usa su expansión en series de Taylor

$$P(a, z) = \frac{z^a e^{-z}}{\Gamma(a+1)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{(a+1)_n}.$$

La serie converge para todo a y z positivos y la convergencia mejora a medida que el cociente $\frac{a}{z}$ tiende a infinito. Además, dado que $a > z$ en la región PT, los términos del sumatorio decrecen rápidamente.

(QT) Se utiliza la otra expansión en serie de la función $P(a, z)$,

$$P(a, z) = \frac{z^a}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^n}{(a+n)n!}. \quad (1.41)$$

Sin embargo, no se puede usar directamente $Q(a, z) = 1 - P(a, z)$ cuando a es pequeño (como es este caso). En su lugar, se escribe

$$Q(a, z) = u + v$$

donde

$$u = 1 - \frac{1}{\Gamma(1+a)} + \frac{1 - z^a}{\Gamma(1+a)}, \quad v = \frac{z^a}{\Gamma(1+a)} (1 - \Gamma(1+a) z^{-a} P(a, z)).$$

En el algoritmo general se utilizan funciones específicas para calcular cada uno de los sumandos u y v .

(CF) En esta región se usa la fracción continua

$$Q(a, z) = \frac{z^a e^{-z}}{(z+1-a)\Gamma(a)} \left(\frac{1}{1+} \frac{a_1}{1+} \frac{a_2}{1+} \frac{a_3}{1+} \frac{a_4}{1+} \dots \right),$$

donde

$$a_k = \frac{k(a-k)}{(z+2k-1-a)(z+2k+1-a)}, k \geq 1.$$

(UA) Se parte de las representaciones siguientes

$$Q(a, z) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(\eta\sqrt{a/2}) + R_a(\eta),$$

$$P(a, z) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(-\eta\sqrt{a/2}) - R_a(\eta),$$

donde $\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2}$ es la *función de error complementaria*. En general, estas estrategias aproximan bastante bien funciones de tipo sigmoide. El valor de η se define como

$$\frac{1}{2}\eta^2 = \lambda - 1 - \ln\lambda, \lambda = \frac{z}{a}. \quad (1.42)$$

Si tomamos raíz cuadrada para despejar η en la última ecuación, consideraremos que $\operatorname{signo}(\eta) = \operatorname{signo}(\lambda - 1)$. Para $R_a(\eta)$ se tiene que

$$R_a(\eta) = \frac{e^{-\frac{1}{2}a\eta^2}}{\sqrt{2\pi a}} S_a(\eta), \quad S_a(\eta) \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C_n(\eta)}{a^n}, a \rightarrow \infty. \quad (1.43)$$

A pesar de existir expresiones analíticas para los coeficientes $C_n(\eta)$, estas representaciones son difíciles de evaluar para η pequeño, es decir, en la zona de transición $z \sim a$.

Sin embargo, en lugar de calcular los coeficientes $C_n(\eta)$, se da una expansión de $S_a(\eta)$ en serie de potencias de η , de forma que

$$S_a(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \eta^n.$$

Cada uno de los coeficientes α_n es de la forma

$$\alpha_n = \frac{\beta_n}{\Gamma^*(a)}, n = 0, 1, 2, \dots$$

Computación de funciones gamma incompletas

donde los β_n se definen mediante la recurrencia

$$\beta_n = \frac{1}{a}(n+2)\beta_{n+2} + d_{n+1}, n = 0, 1, 2, \dots$$

y los coeficientes d_n se definen como los coeficientes de la serie de potencias

$$\frac{\eta}{\lambda-1} = \sum_{n=0}^{\infty} d_n \eta^n.$$

Para calcular los β_n , se utiliza recurrencia hacia atrás empezando desde un N suficientemente grande y considerando $\beta_{N+2} = \beta_{N+1} = 0$. Con todo esto, se tiene que una buena aproximación de $S_a(\eta)$ será

$$S_a(\eta) \approx \frac{a}{a + \beta_1} \sum_{n=0}^N \beta_n \eta^n.$$

1.7.2. Caso $z < 0$

Como ya se ha mencionado antes, este problema lo hemos resuelto en [18] dando un esquema computacional que, al igual que en el caso $z > 0$, combina varios de los métodos descritos anteriormente. En la Figura 1.2 se especifica la región de parámetros en la que calculamos la función $\gamma^*(a, z)$ y en qué zonas aplicamos uno u otro método de computación en base a la precisión alcanzada y su eficiencia.

Conviene mencionar una serie de detalles sobre la aplicación de los diversos métodos. En primer lugar, el uso de de la expansión asintótica uniforme (1.16) para calcular $\tilde{\gamma}_a(z)$ proporciona una precisión de 10^{-14} en la región $(a, z) \in [-1000, 0] \times [-1000, 0)$ con la excepción de las bandas $|a| < 4.5$ y $|z| < 1.5$. Por otra parte, el rango de computación de la función $\gamma^*(a, z)$ está limitado en aritmética de precisión finita debido a problemas de overflow/underflow para valores de $|a|$ grandes. Esto puede comprobarse en la Figura 1.3. Es por ello que hemos elegido en el artículo una región más pequeña $(a, z) \in [-500, 500] \times [-500, 0)$.

En las bandas $|a| < 4.5$ y $|z| < 1.5$, donde falla la expansión asintótica uniforme, el uso de la expansión en serie de potencias (1.5) proporciona una precisión de 10^{-13} pero con el inconveniente de que se requiere un gran número de términos cuando $|z|$ es grande. Es por ello que, en este caso, es mejor usar la expansión asintótica uniforme (1.19) para hallar $\tilde{\gamma}_{\tilde{a}}(z)$ para un \tilde{a} que esté en la región de validez de la expansión asintótica uniforme y mediante la relación de recurrencia (1.20) aplicada en sentido descendente en valores de a obtener el valor $\tilde{\gamma}_a(z)$ necesario para luego hallar $\gamma^*(a, z)$ usando (1.18).

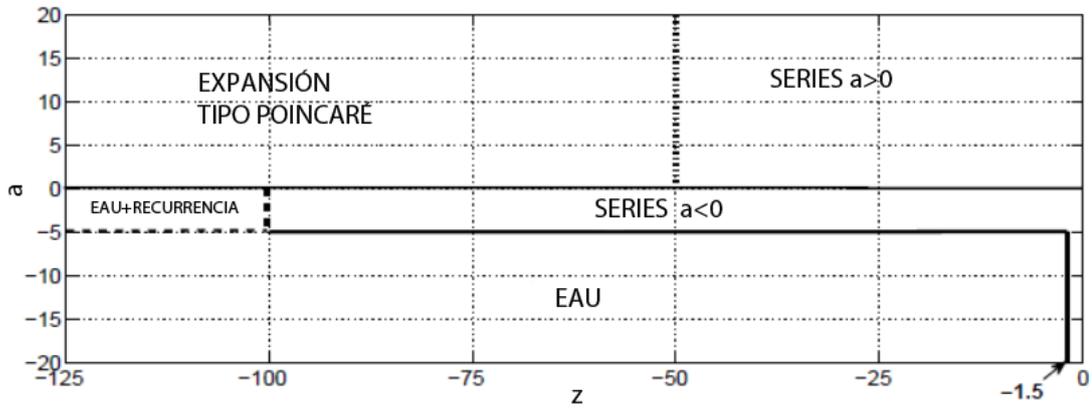


Figura 1.2: Esquema de computación de $\gamma^*(a, z)$. EAU es la expansión asintótica uniforme (1.16). Se usa la relación de recurrencia (1.13).

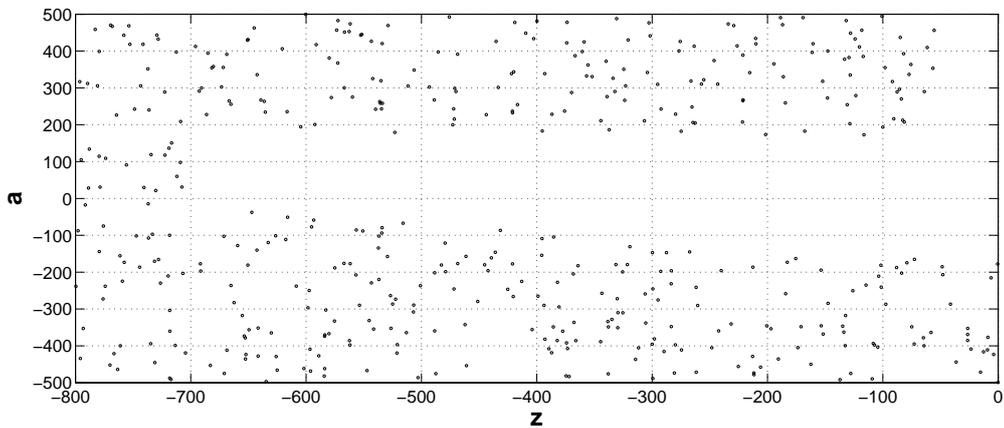


Figura 1.3: Limitaciones de *overflow/underflow* en aritmética de precisión finita en la región $(z, a) \in (-800, 0) \times (-500, 500)$ al calcular la función $\gamma^*(a, z)$. Los puntos corresponden a los valores para los que la función presenta *overflow* o *underflow*.

Computación de funciones gamma incompletas

Así, el esquema de computación queda de la siguiente forma:

1. Para $a > 0$,

Si $z < -50$, usar la expansión de tipo Poincaré(1.38).

En otro caso, usar la expansión en serie de potencias (1.5).

2. Para $a < 0$,

Si $a = -n$, $n \in \mathbb{N}$, usar la expresión (1.7).

En otro caso,

Si $a > -5$ o $z > -1.5$,

Si $z > -100$, usar la expansión en serie de potencias (1.5) o la fórmula (1.6) si $a = -n + \epsilon$ y ϵ es pequeño.

En otro caso, usar la expansión asintótica uniforme (1.16) y la relación de recurrencia (1.20).

En otro caso, usar la expansión asintótica uniforme (1.16).

El algoritmo propuesto funciona de forma eficiente en su rango de validez como puede verse en la Figura 1.4. Como comentábamos anteriormente, se mejora además el rango de computación del algoritmo presentado en [54]. El algoritmo propuesto por Thompson considera la computación de la función gamma incompleta inferior para valores reales negativos del argumento z y valores semienteros del parámetro a utilizando una función $S_n(z)$, n entero y $z > 0$, relacionada con la función gamma incompleta inferior mediante $\gamma(n+1/2, -z) = i(-1)^n e^z z^{n+1} S_n(z)$. La relación de la función $S_n(z)$ con $\gamma^*(a, z)$ está dada entonces por $S_n(z) = \Gamma(n+1/2) e^{-z} \gamma^*(n+1/2, -z)$. El algoritmo de Thompson utiliza valores precomputados en Maple para iniciar el algoritmo y, al menos en la implementación del algoritmo disponible en la librería de TOMS, parece estar restringida a valores de z en el intervalo $[0, 200]$. Nuestra aproximación, aparte de no utilizar valores pre-computados en Maple, extiende el rango de computación para valores reales del parámetro a y valores mayores (en valor absoluto) del argumento z , por lo que supone una mejora evidente en el cálculo de la función.

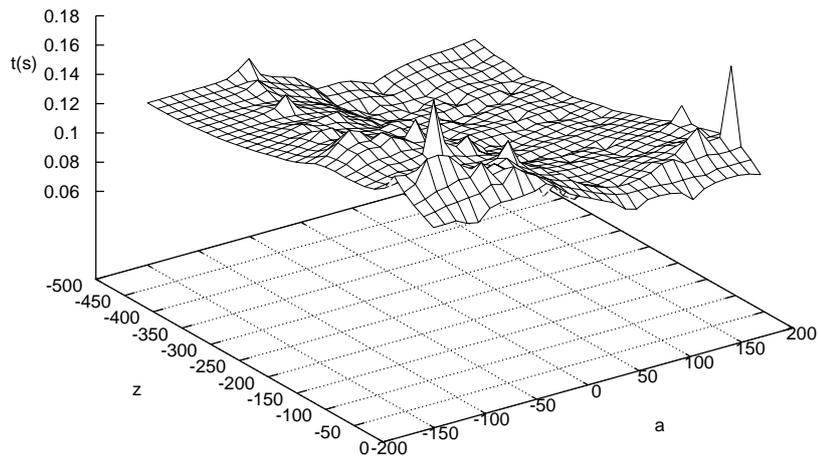


Figura 1.4: Tiempos de computación requeridos por el algoritmo realizando 50000 evaluaciones de la función.

Finalmente, un ejemplo del cálculo de la función $\gamma^*(a, z)$ y de las funciones $P(a, z)$ y $Q(a, z)$ con los algoritmos descritos se muestra en las Figuras 1.5 y 1.6.

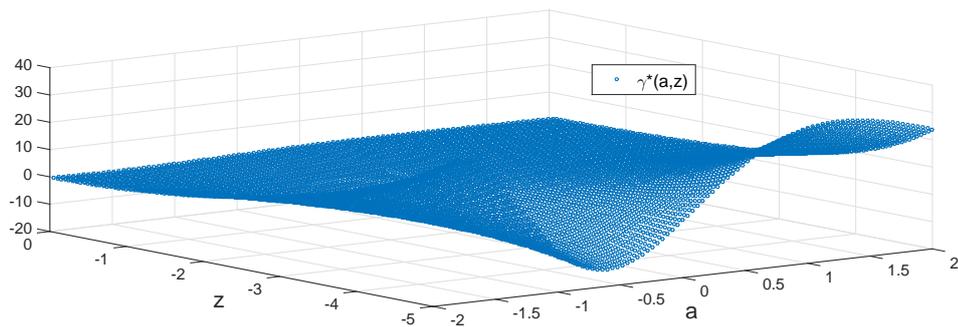


Figura 1.5: En la ilustración se muestra la función $\gamma^*(a, z)$ definida en (1.4) en el dominio de parámetros $(a, z) \in (-2, 2) \times (-5, 0)$.

Computación de funciones gamma incompletas

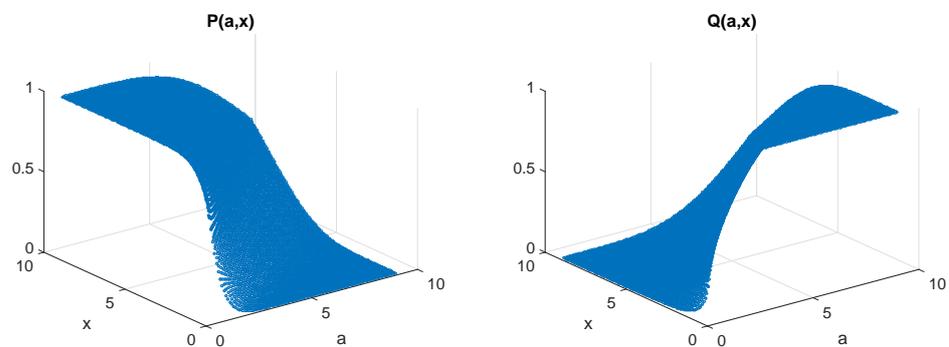


Figura 1.6: Funciones $P(a, z)$ y $Q(a, z)$ definidas en (1.3) en el dominio de parámetros $(a, z) \in (0, 10) \times (0, 10)$.

2

Cálculo de cotas para cocientes de funciones de Bessel modificadas

Los cocientes de funciones de Bessel modificadas de primera y segunda especie de órdenes consecutivos $I_\nu(x)/I_{\nu-1}(x)$, $K_\nu(x)/K_{\nu-1}(x)$ aparecen en numerosos ámbitos científicos. Podemos encontrar estas cantidades en métodos de Schwarz para procesos de reacción-difusión [17], en estadística [32, 42] o en el estudio del comportamiento oscilatorio de soluciones de EDOs de segundo orden [31]. En [47] y las referencias ahí mencionadas se pueden encontrar más ejemplos de aplicaciones.

Siguiendo la metodología propuesta en [47], en [45] hemos obtenido cotas para estos cocientes de funciones aprovechando el hecho de que dichos cocientes satisfacen una ecuación de Riccati en la cual podemos encontrar que una de sus curvas críticas $h'(x) = 0$ (siendo $h(x)$ el cociente considerado) es cota de dichos cocientes. Este artículo en el que hemos trabajado es una ampliación de algunos de los resultados estudiados en [47].

En primer lugar, mostraremos cómo esta técnica puede generar buenas cotas tanto superiores como inferiores (en [47] sólo se obtenían desigualdades en un sentido usando esta técnica). Estas cotas están descritas mediante una familia uniparamétrica de funciones, de las que obtenemos las mejores cotas inferior y superior.

En segundo lugar, describiremos un proceso iterativo que utilizando las cotas obtenidas permite generar nuevas ecuaciones de Riccati que proporcionan nuevas y mejores familias uniparamétricas de cotas. Además, las cotas obtenidas en el primer paso se incluyen entre las obtenidas tras aplicar el proceso iterativo.

En el caso de las funciones de Bessel de primera especie, las mejores cotas posibles obtenidas tras aplicar el proceso iterativo son mejores que las obtenidas inicialmente, y particularmente en los límites $x \rightarrow 0, \infty$ y $\nu \rightarrow \infty$. Para las funciones de Bessel de segunda especie la situación es similar, con la diferencia de que sólo las cotas superiores mejoran tras iterar el proceso.

2.1. Resultados generales

Vamos a describir un proceso iterativo que, partiendo de una ecuación de Riccati, produce cotas para soluciones de dicha ecuación. El proceso genera sucesivas ecuaciones de Riccati para el cociente de la función considerada dividida por la cota obtenida en el paso anterior. Estas cotas surgen de elegir la raíz característica adecuada de la ecuación característica asociada a cada ecuación de Riccati considerada. Vamos a describir el proceso en detalle.

Consideramos una ecuación de Riccati

$$h_0'(x) = A_0(x) + B_0(x)h_0(x) + C_0(x)h_0(x)^2. \quad (2.1)$$

Ahora consideramos la función $h_1(x) = h_0(x)/\phi_0(x)$, donde $\phi_0(x) \equiv \beta_0(x)$ es una de las dos raíces características de la ecuación característica asociada a (2.1), $A_0(x) + B_0(x)\phi_0 + C_0(x)\phi_0^2 = 0$, y que tiene que ser cota de $h_0(x)$. En la siguiente iteración del proceso se considera

$$h_1'(x) = A_1(x) + B_1(x)h_1(x) + C_1(x)h_1(x)^2 \quad (2.2)$$

$$A_1(x) = \frac{A_0(x)}{\phi_0(x)}, B_1(x) = B_0(x) - \frac{\phi_0'(x)}{\phi_0(x)}, C_1(x) = \phi_0(x)C_0(x)$$

Si una de las raíces características $\phi_1(x)$ de la correspondiente ecuación característica asociada a (2.2) es cota de $h_1(x)$, entonces $\beta_1(x) = \phi_1(x)\beta_0(x) = \phi_1(x)\phi_0(x)$ es cota de $h_0(x)$. En general, podemos considerar el proceso iterativo que en el paso n será de la forma

$$h_n'(x) = A_n(x) + B_n(x)h_n(x) + C_n(x)h_n(x)^2 \quad (2.3)$$

$$A_n(x) = \frac{A_0(x)}{\beta_{n-1}(x)}, B_n(x) = B_0(x) - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{\phi_i'(x)}{\phi_i(x)}, C_n(x) = \beta_{n-1}(x)C_0(x)$$

donde

$$\beta_{n-1}(x) = \prod_{i=0}^{n-1} \phi_i(x). \quad (2.4)$$

Las raíces características de (2.3) serán

$$\phi_n(x) = \frac{2A_n(x)}{-B_n(x) \pm \sqrt{B_n(x)^2 - 4A_n(x)C_n(x)}} \quad (2.5)$$

y, una vez elegida la raíz que sea cota de $h_n(x)$, tendremos la siguiente cota para $h_0(x)$

$$\beta_n(x) = \beta_{n-1}(x)\phi_n(x) = \frac{1}{\eta_n(x) \pm \sqrt{\eta_n(x)^2 + \gamma(x)}} \quad (2.6)$$

donde

$$\gamma(x) = -C_0(x)/A_0(x) \quad (2.7)$$

y

$$\eta_n(x) = -\frac{B_n(x)}{2A_0(x)} = \eta_0(x) \left(1 - \frac{1}{B_0(x)} \frac{d}{dx} \log \beta_{n-1}(x) \right). \quad (2.8)$$

Ahora bien, para determinar si los sucesivos $\beta_n(x)$ son cotas de $h_0(x)$, necesitamos que en cada iteración la función $\phi_n(x)$ sea cota de $h_n(x)$. Para hacer dicha comprobación, podemos hacer uso del siguiente teorema.

Teorema 2.1 *Sea $h(x)$ una solución de la ecuación de Riccati $h'(x) = A(x) + B(x)h(x) + C(x)h(x)^2$ definida en $(0, +\infty)$, siendo los coeficientes continuos con $A(x)C(x) < 0$. Sea $\phi(x)$ la raíz positiva de $A(x) + B(x)\phi(x) + C(x)\phi(x)^2 = 0$, si $\phi(x)$ es estrictamente monótona, se cumple lo siguiente:*

1. *Si $C(x) < 0$, $h(0^+) > 0$ y $\phi'(0^+)h'(0^+) > 0$, entonces $h(x) < \phi(x)$ si $\phi'(x) > 0$ y $h(x) > \phi(x)$ si $\phi'(x) < 0$.*
2. *Si $C(x) > 0$, $h(+\infty) > 0$ y $\phi'(+\infty)h'(+\infty) > 0$, entonces $h(x) < \phi(x)$ si $\phi'(x) < 0$ y $h(x) > \phi(x)$ si $\phi'(x) > 0$.*

Demostración Con probar el caso en que $C(x) < 0$ y $\phi'(x) > 0$ es suficiente dado que los otros tres casos restantes se prueban de la misma forma. Dado que $C(x) < 0$, que se cumpla $\phi'(0^+)h'(0^+) > 0$ implica que $0 < h(0^+) < \phi(0^+)$, pero entonces, dado que $\phi(x)$ es creciente, se debe cumplir dicha desigualdad para todo $x > 0$, y por tanto $h(x) < \phi(x)$ para x positivo. En efecto, un valor x_0 que cumpla $h(x_0) = \phi(x_0)$ (luego $h'(x_0) = 0$) no puede existir porque $h(x)$ se acercaría a la gráfica de la función creciente $\phi(x)$ desde abajo y para esto, es necesario que $h'(x_0) > \phi'(x_0) > 0$, lo que contradice que $h'(x_0) = 0$.

2.2. Caso de la función $I_\nu(x)$

Consideramos la ecuación de Riccati cumplida por $h(x) = I_\nu(x)/I_{\nu-1}(x)$, siendo $I_\nu(x)$ la función de Bessel modificada de primera especie,

$$h'(x) = 1 - \frac{2(\nu - 1/2)}{x}h(x) - h(x)^2 \quad (2.9)$$

que puede obtenerse fácilmente a partir de las relaciones de recurrencia cumplidas por $I_\nu(x)$ [41][Ec. 10.29.2]. En [47] se prueba que la raíz característica positiva de la ecuación característica asociada a (2.9) es cota superior de $h(x)$. Nosotros probaremos ese resultado

Cálculo de cotas para cocientes de funciones de Bessel modificadas

más adelante usando el Teorema 2.1. Ahora podríamos aplicar el proceso iterativo seguido en la sección anterior para obtener sucesivas cotas de $h(x)$, pero podemos considerar antes una situación más general, empezando por

$$h_0(x) = x^{-\alpha}h(x), \quad (2.10)$$

dando la ecuación de Riccati

$$h_0'(x) = x^{-\alpha} - \frac{2\lambda}{x}h_0(x) - x^\alpha h_0(x)^2, \lambda = \nu + \frac{1}{2}(\alpha - 1). \quad (2.11)$$

Siguiendo la notación de la sección anterior, tendremos que

$$\beta_0(x) = \phi_0(x) = \frac{1}{\eta_0(x) + \sqrt{\eta_0(x)^2 + \gamma(x)}} = \frac{x^{1-\alpha}}{\lambda + \sqrt{\lambda^2 + x^2}}, \quad (2.12)$$

donde

$$\gamma(x) = x^{2\alpha}, \eta_0(x) = \lambda x^{\alpha-1}. \quad (2.13)$$

Esto nos da una familia de posibles cotas para $h(x)$ dependientes del parámetro α :

$$b_\alpha(\nu, x) = \frac{x}{\lambda + \sqrt{\lambda^2 + x^2}}, \lambda = \nu + \frac{1}{2}(\alpha - 1). \quad (2.14)$$

Como habíamos dicho antes, podemos usar el Teorema 2.1 para probar que $b_0(\nu, x)$ es cota superior de $h(x)$. Este teorema también nos permite probar, como se hizo en [47], que $b_1(\nu, x)$ es cota inferior de $h(x)$. Además, podemos comprobar fácilmente que estas son las mejores cotas posibles que podemos obtener de la forma (2.14).

Teorema 2.2 *Se cumplen las desigualdades*

$$\frac{I_\nu(x)}{I_{\nu-1}(x)} < b_0(\nu, x) = \frac{x}{\nu - 1/2 + \sqrt{(\nu - 1/2)^2 + x^2}}, \nu \geq 1/2, \quad (2.15)$$

$$\frac{I_\nu(x)}{I_{\nu-1}(x)} > b_1(\nu, x) = \frac{x}{\nu + \sqrt{\nu^2 + x^2}}, \nu \geq 0. \quad (2.16)$$

Además, estas cotas son las mejores cotas posibles de la forma $b_\alpha(\nu, x)$, $\alpha \in \mathbb{R}$, en su rango de validez.

Demostración Primero, hay que señalar que para $\alpha \in (0, 1)$ las funciones $b_\alpha(\nu, x)$ no son cotas de $h(x)$. Observando la serie de Maclaurin [41][Ec. 10.25.2] y la expansión asintótica [41][Ec. 10.40.1], tenemos que

$$h_0(x) = x^{-\alpha} \left(\frac{x}{2\nu} - \frac{1}{8\nu^2(\nu+1)} x^3 + \mathcal{O}(x^5) \right), \quad (2.17)$$

$$h_0(x) = x^{-\alpha} \left(1 - \frac{\nu - 1/2}{x} + \mathcal{O}(x^{-2}) \right).$$

De aquí, tenemos que $h'_0(0^+)h'_0(+\infty) < 0$ para $\alpha \in (0, 1)$, implicando que la gráfica de $h_0(x)$ debe cortar a la de la raíz característica $\phi_0(x)$, probando que no puede ser cota de $h_0(x)$. Ahora, vamos a probar que efectivamente los casos $\alpha = 0$ y $\alpha = 1$ son cotas de $h_0(x)$, comprobando que cumplen las hipótesis requeridas para usar el Teorema 2.1.

1. $\alpha = 0$: el caso $\nu = 1/2$ es directo puesto que $I_\nu(x) = I_{-\nu}(x)$. Para $\nu > 1/2$ se puede comprobar directamente que $\phi_0(x) = b_0(\nu, x)$ es estrictamente creciente en la variable x . Además, por (2.17) tenemos que $h_0(0^+) > 0$ y $h'_0(0^+) > 0$, luego $\phi'_0(0^+)h'_0(0^+) > 0$ y ya tenemos las hipótesis para aplicar el Teorema 2.1.
2. $\alpha = 1$: el caso $\nu = 0$ es obvio porque $I_0(x)/I_{-1}(x) = I_0(x)/I_1(x)$ y la desigualdad que hemos probado antes muestra que este cociente es mayor que 1. Ahora, para $\nu > 0$ podemos ver directamente que $\phi_0(x) = b_1(\nu, x)$ es estrictamente decreciente en la variable x y gracias a (2.17) vemos que $h_0(0^+) > 0$ y $h'_0(0^+) < 0$, luego $\phi'_0(0^+)h'_0(0^+) > 0$, volviendo así a obtener las hipótesis para aplicar el Teorema 2.1.

Por último, se puede ver que $b_\alpha(\nu, x)$ es una función decreciente en la variable α , con lo que, dado que $b_1(\nu, x)$ es cota inferior, $b_\alpha(\nu, x)$ es cota inferior para todo $\alpha \geq 1$. Del mismo modo, al ser $b_0(\nu, x)$ cota superior, $b_\alpha(\nu, x)$ es cota superior para todo $\alpha \leq 0$. Se ve así, que las mejores cotas posibles para $h_0(x)$ se dan cuando $\alpha = 0, 1$.

Observamos que el Teorema 2.1 no se puede usar para probar que cualquiera de los valores $\beta_0(x)$ para $\alpha \in (-1, 0) \cup (0, 1)$ es cota, dado que $\phi_0(x) = \beta_0(x)$ es no monótona en este caso (la derivada de $\beta_0(\lambda, x)$ es cero en $x = \pm\sqrt{1 - \alpha^2\lambda/\alpha}$). Sin embargo, de la monotonía de $b_\alpha(\nu, x)$ concluimos que para $\alpha \in (-1, 0)$ se pueden obtener cotas superiores para $I_\nu(x)/I_{\nu-1}(x)$ al menos para $\nu \geq 1/2$; de hecho, estas cotas, aunque menos precisas que $b_0(\nu, x)$, extienden el rango de validez con respecto a ν , y para $\alpha = -1$ tenemos el siguiente resultado:

Teorema 2.3

$$\frac{I_\nu(x)}{I_{\nu-1}(x)} < b_{-1}(\nu, x) = \frac{x}{\nu - 1 + \sqrt{(\nu - 1)^2 + x^2}}, \nu \geq 0. \quad (2.18)$$

Demostración Para $\nu = 0$ la cota se cumple porque es equivalente a $I_1(x)/I_0(x) > x/(1 + \sqrt{1 + x^2})$, que es cierta por el Teorema 2.2 (tomando $\nu = 1$ en la segunda cota). Para $\nu > 0$ tenemos que $\phi_0(x) = xb_{-1}(\nu, x)$ es creciente como función de x y $h'_0(0^+) > 0$; por el Teorema 2.1 tenemos que $h_0(x) = xI_\nu(x)/I_{\nu-1}(x) < \phi_0(x) = x^2/(\nu - 1 + \sqrt{(\nu - 1)^2 + x^2})$.

Observación 2.4 Si consideramos las relaciones de recurrencia cumplidas por $I_\nu(x)$ (véase [41][Ec. 10.29.2]), podemos reescribirlas de la siguiente manera:

$$\frac{I_\nu(x)}{I_{\nu-1}(x)} = \frac{1}{\frac{2\nu}{x} + \frac{I_{\nu+1}(x)}{I_\nu(x)}}. \quad (2.19)$$

Si sustituimos $I_{\nu+1}(x)/I_\nu(x)$ por una de las cotas superiores (resp. inferiores), obtendremos una cota inferior (resp. superior). Este proceso se puede iterar para obtener una sucesión de cotas convergentes, dado que la fracción continua resultante de iterar (2.19) es convergente. Si consideramos las cotas obtenidas en el Teorema 2.2, podemos obtener usando este proceso las siguientes cotas

$$\frac{x}{\nu - 1/2 + \sqrt{(\nu + 1/2)^2 + x^2}} < \frac{I_\nu(x)}{I_{\nu-1}(x)} < \frac{x}{\nu - 1 + \sqrt{(\nu + 1)^2 + x^2}}, \nu \geq 0. \quad (2.20)$$

La cota inferior $\tilde{B}_0(\nu, x)$ es mejor que la cota inferior obtenida en el Teorema 2.2 $B_2(\nu, x)$ para todo $x > 0, \nu \geq 0$, mientras que la cota superior que hemos obtenido mejora la del Teorema 2.2 sólo cuando $x^2 < 4\nu(2\nu + 1)$.

2.2.1. Cotas obtenidas por proceso iterativo

Vamos a considerar la primera iteración del proceso descrito en la primera sección de este capítulo para la función (2.10). Siguiendo la notación usada, tenemos que

$$\eta_1(x) = x^{\alpha-1} \left[\lambda \left(1 + \frac{1}{2\sqrt{\lambda^2 + x^2}} \right) - \frac{\alpha}{2} \right] \quad (2.21)$$

y para $h_0(x)$ tendremos la posible cota $\beta_1(x) = 1/(\eta_1(x) + \sqrt{\eta_1(x)^2 + x^{2\alpha}})$. Así, obtenemos la siguiente familia uniparamétrica de cotas para $h(x) = x^\alpha h_0(x)$,

$$B_\alpha(\nu, x) = \frac{x}{\delta_\alpha(\nu, x) + \sqrt{\delta_\alpha(\nu, x)^2 + x^2}} \quad (2.22)$$

$$\delta_\alpha(\nu, x) = (\nu - 1/2) + \frac{\lambda}{2\sqrt{\lambda^2 + x^2}}, \lambda = \nu + (\alpha - 1)/2.$$

Igual que hicimos con las cotas de la iteración anterior, vamos a probar que esta familia de funciones también son cotas de $h(x)$ para $\alpha \notin (0, 2)$ y que las mejores posibles de este tipo se dan en $\alpha = 0, 2$.

Teorema 2.5 *Se verifica que*

$$\frac{I_\nu(x)}{I_{\nu-1}(x)} < B_0(\nu, x), \nu \geq 1/2, \quad (2.23)$$

$$\frac{I_\nu(x)}{I_{\nu-1}(x)} > B_2(\nu, x), \nu \geq 0. \quad (2.24)$$

Además, estas cotas son las mejores cotas posibles de la forma $B_\alpha(\nu, x)$, $\alpha \in \mathbb{R}$, en su rango de validez.

Demostración Primero, observar que para $\alpha \in (0, 2)$, $B_\alpha(\nu, x)$ no son cotas para todo $x > 0$. Si consideramos las expansiones en serie de $h_1(x) = h_0(x)/\beta_0(x)$ que podemos obtener a partir de (2.17), vemos que

$$h_1(x) = \frac{\lambda}{\nu} - \frac{1}{8} \frac{4\nu(\alpha - 2) + (\alpha - 1)^2}{\nu^2(\nu + 1)(2\nu + \alpha - 1)} x^2 + \mathcal{O}(x^4) \quad (2.25)$$

$$h_1(x) = 1 + \frac{\alpha}{2} x^{-1} + \frac{1}{8} (\alpha^2 + 2 - 4\nu) x^{-2} + \mathcal{O}(x^{-3})$$

donde λ está definido como en (2.22). Vemos así que $h_1'(+\infty) < 0$ si $\alpha > 0$ mientras que $h_1'(0^+) > 0$ si $\nu > (\alpha - 1)^2/(8 - 4\alpha) > 0$. Nuevamente vemos que la gráfica de $h_1(x)$ debe cortar a la de $\phi_1(x)$ en algún x positivo, por lo que $\phi_1(x)$ no puede ser cota de $h_1(x)$. Nuevamente, tenemos que la familia uniparamétrica de funciones $B_\alpha(\nu, x)$ es decreciente en α , por lo que si probamos que para $\alpha = 0$ tenemos cota superior y para $\alpha = 2$ cota inferior, tendremos que son las mejores cotas posibles del tipo $B_\alpha(\nu, x)$.

1. $\alpha = 0$: el caso $\nu = 1/2$ es trivial dado que $I_\nu = I_{-\nu}$. Para $\nu > 1/2$ tenemos, usando (2.25), que $h_1(0^+) > 0$ y $h_1'(0^+) > 0$, luego si probamos que $\phi_1'(x) > 0$ para todo $x > 0$, tendremos que $h_1(x) < \phi_1(x)$ (y, por tanto, $h_0(x) < B_0(\nu, x)$). Vamos a probar que $\phi_1'(x) > 0$ para $\nu > 1/2$. Escribir $\phi_1(x) = \beta_1(x)/\beta_0(x)$ facilita los cálculos, ya que

$$\phi_1'(x) = \left[\frac{\sqrt{\eta_0(x)^2 + 1} + \eta_0(x)}{\sqrt{\eta_1(x)^2 + 1} + \eta_1(x)} \right]' = \frac{\beta_1(x)}{\beta_0(x)} \left[\frac{\eta_0'(x)}{\eta_0(x)^2 + 1} - \frac{\eta_1'(x)}{\eta_1(x)^2 + 1} \right], \quad (2.26)$$

con $\eta_0(x)$ como en (2.13) tomando $\alpha = 0$ y

$$\eta_1(x) = f(x)\eta_0(x), f(x) = 1 + \frac{1}{2\sqrt{(\nu - 1/2)^2 + x^2}}. \quad (2.27)$$

Cálculo de cotas para cocientes de funciones de Bessel modificadas

Dado que $\eta'_0(x) < 0$ y $\eta'_1(x) < 0$ para $\nu > 1/2$, tenemos que $\phi'_1(x) > 0$ equivale a decir que

$$1 + \eta_1(x)^2 < \left(\frac{\eta'_1(x)}{\eta'_0(x)} \right)^2 (1 + \eta_0(x)^2). \quad (2.28)$$

Finalmente, usando que $\eta_1(x) = f(x)\eta_0(x)$, podemos sustituir en la ecuación anterior, obteniendo la desigualdad

$$1 + \eta_0(x)^2 f(x)^2 < \left(f(x) + \frac{\eta_0(x)}{\eta'_0(x)} f'(x) \right)^2 (1 + \eta_0(x)^2) \quad (2.29)$$

que es cierta dado que $\eta_0(x)f'(x)/\eta'_0(x) > 0$ y $f(x) > 1$.

2. $\alpha = 2$: primero probamos el caso $\nu = 0$,

$$\frac{I_0(x)}{I_1(x)} > \frac{x}{\delta + \sqrt{\delta^2 + x^2}}, \delta = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + 4x^2}} \right). \quad (2.30)$$

Dado que $\delta \in (-1/2, 0)$, si $x > 0$, tenemos que

$$\frac{x}{\delta + \sqrt{\delta^2 + x^2}} < \frac{x}{-1/2 + \sqrt{1/4 + x^2}} \quad (2.31)$$

por lo que basta probar que

$$\frac{I_0(x)}{I_1(x)} > \frac{x}{-1/2 + \sqrt{1/4 + x^2}} = \frac{1}{x} \left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + x^2} \right) \quad (2.32)$$

que es cierto gracias al Teorema 2.2 (tomando $\nu = 1$ en la primera desigualdad). Ahora, para el caso más general de $\nu > 0$. Considerando (2.25) tenemos que $h_1(0^+) > 0$, $h'_1(0^+) < 0$. Luego, probando que $\phi'_1(x) < 0$, tenemos que $h_1(x) > \phi_1(x)$ y, por tanto, $h(x) = x^2 h_0(x) > B_2(\nu, x)$. Para $\alpha = 2$ tenemos, para $i = 0, 1$, que

$$\eta_i(x) = \lambda x q_i(x), q_0(x) = 1, q_1(x) = f(x) \quad (2.33)$$

$$f(x) = \gamma + \frac{1}{2\sqrt{\lambda^2 + x^2}}, \lambda = \nu + \frac{1}{2}, \gamma = \frac{\nu - 1/2}{\nu + 1/2}$$

y

$$\beta_i = \frac{1}{\eta_i(x) + \sqrt{\eta_i(x)^2 + x^4}}. \quad (2.34)$$

Calculamos ahora la derivada

$$\phi_1'(x) = \frac{\beta_1(x)}{\beta_0(x)} \left(\frac{\beta_1'(x)}{\beta_1(x)} - \frac{\beta_0'(x)}{\beta_0(x)} \right) \quad (2.35)$$

teniendo que

$$-\frac{\beta_i'(x)}{\beta_i(x)} = \frac{\eta_i'(x) + 2x^3\beta_i(x)}{\sqrt{\eta_i(x)^2 + x^4}} = \frac{1}{x} \left[2 + \frac{\eta_i'(x) - 2\lambda q_i(x)}{\sqrt{(\lambda q_i(x))^2 + x^2}} \right]. \quad (2.36)$$

Luego para probar que $\phi_1'(x) < 0$ tenemos que probar que

$$\frac{f(x) - xf'(x)}{\sqrt{(\lambda f(x))^2 + x^2}} < \frac{1}{\sqrt{\lambda^2 + x^2}} \quad (2.37)$$

Para $f(x) - xf'(x) < 0$ la desigualdad es trivial. Vamos a ver que el caso en que $f(x) - xf'(x) > 0$ se cumple para $\nu \geq 0$. Elevando ambos miembros de (2.37) al cuadrado y simplificando, obtenemos que

$$\frac{1}{x^2 + \lambda^2} - (1 - \gamma^2) - \frac{\lambda^2}{4(\lambda^2 + x^2)^2} < -2\gamma \frac{1}{\sqrt{\lambda^2 + x^2}}. \quad (2.38)$$

Para probar esta desigualdad, basta con probar la desigualdad siguiente (en la que hemos omitido uno de los términos negativos del miembro de la izquierda),

$$\frac{1}{\lambda^2 + x^2} - (1 - \gamma^2) < -\frac{2\gamma}{\sqrt{\lambda^2 + x^2}}. \quad (2.39)$$

Simplificando la notación, si tomamos $\zeta = \sqrt{\lambda^2 + x^2}$, la desigualdad anterior pasa a ser

$$(1 - \gamma^2)\zeta^2 - 2\gamma\zeta - 1 = (1 - \gamma^2)(\zeta - \lambda)(\zeta + 1/(1 + \gamma)) > 0 \quad (2.40)$$

que es cierto si $|\gamma| < 1$ porque $\zeta > \lambda$.

Observación 2.6 Como ya habíamos mencionado en la prueba, $B_\alpha(\nu, x)$ es una función decreciente en α , por lo que para cada $\alpha < 0$ tenemos una cota superior de las cuales, la mejor se alcanza en $\alpha = 0$ y, del mismo modo, para cada $\alpha > 2$ tenemos una cota inferior, alcanzándose la mejor en $\alpha = 2$. Dado que $B_{+\infty}(\nu, x) = b_1(\nu, x)$ y $B_{1-2\nu}(\nu, x) = b_0(\nu, x)$, tenemos que las cotas de $B_0(\nu, x)$ y $B_2(\nu, x)$ son mejores que las del tipo $b_\alpha(\nu, x)$.

Observación 2.7 *Nuevamente, podemos realizar el mismo proceso que detallamos en la Observación 2.4 para obtener nuevas cotas sustituyendo las ya obtenidas en la fracción (2.19). En este caso, tenemos que*

$$\tilde{B}_0(\nu, x) < \frac{I_\nu(x)}{I_{\nu-1}(x)} < \tilde{B}_2(\nu, x), \nu \geq 0 \quad (2.41)$$

donde $\tilde{B}_\alpha(\nu, x)$ está definida de la siguiente manera

$$\tilde{B}_\alpha(\nu, x) = \frac{x}{\delta_\alpha^-(\nu, x) + \sqrt{\delta_\alpha^+(\nu, x)^2 + x^2}} \quad (2.42)$$

$$\delta_\alpha^\pm(\nu, x) = (\nu \pm 1/2) \pm \frac{\sigma}{2\sqrt{\sigma^2 + x^2}}, \sigma = \nu + (\alpha + 1)/2$$

La cota inferior es mejor que la que hemos obtenido en el Teorema 2.5, mientras que la cota superior no supera la obtenida en dicho teorema.

2.2.2. Análisis computacional de las cotas obtenidas

En las Observaciones 2.4 y 2.7 hemos utilizado la relación de recurrencia cumplida por la función $I_\nu(x)$ para obtener mejores que, sin embargo, no mejoran los resultados cuando x es grande. Veremos que efectivamente la iteración de la fracción continua (2.19) no mejora la eficacia de las cotas cuando $x \rightarrow \infty$ pero sí lo hace cuando $x \rightarrow 0$ o $\nu \rightarrow \infty$.

Vamos a considerar las sucesiones de cotas obtenidas mediante este proceso, empezando por las cotas inferior $l_\nu^{(0)}(x)$ y superior $u_\nu^{(0)}(x)$. Así, las sucesiones de cotas obtenidas se definen:

$$l_\nu^{(i+1)}(x) = \frac{1}{\frac{2\nu}{x} + u_{\nu+1}^{(i)}(x)}, u_\nu^{(i+1)}(x) = \frac{1}{\frac{2\nu}{x} + l_{\nu+1}^{(i)}(x)} \quad (2.43)$$

Para ver si estas cotas mejoran con cada iteración podemos ver si las cotas superior e inferior se acercan con cada iteración. Para ello, consideramos $c_\nu^{(i)}(x) = u_\nu^{(i)}(x)/l_\nu^{(i)}(x)$. Usando (2.43) tenemos:

$$c_\nu^{(i+1)}(x) = c_{\nu+1}^{(i)}(x) \frac{1}{1 + \frac{2\nu}{xl_{\nu+1}^{(i)}(x)}}. \quad (2.44)$$

Así, tenemos que

$$l_\nu^{(i)}(x) = \frac{x}{2\nu}(1 + \mathcal{O}(\nu^{-1})), \nu \rightarrow \infty \quad (2.45)$$

e, igualmente, cuando $x \rightarrow 0$. Sin embargo, $l_\nu^{(i)}(x) = (1 + \mathcal{O}(x^{-1}))$ cuando $x \rightarrow \infty$. Por tanto,

$$c_\nu^{(i+1)}(x) \sim \frac{x^2}{4\nu^2} c_{\nu+1}^{(i)}(x) \quad (2.46)$$

cuando $x \rightarrow 0$ o $\nu \rightarrow \infty$, mientras que

$$c_\nu^{(i+1)}(x) = c_{\nu+1}^{(i)}(x)(1 + \mathcal{O}(x^{-1})) \quad (2.47)$$

cuando $x \rightarrow \infty$. Esto explica por qué las cotas obtenidas en los Teoremas 2.2 y 2.5 son superadas por las obtenidas en sus respectivas iteraciones de la fracción continua (2.19). Sin embargo, para un número fijo de iteraciones de dicha fracción continua siempre existirá un x suficientemente grande para el que las cotas de los Teoremas 2.2 y 2.5 serán mejores.

Considerando las cotas del Teorema 2.2 tenemos que

$$\begin{aligned} c_\nu^{(0)}(x) &= \frac{1}{2\nu - 1}(1 + \mathcal{O}(x)), \nu > 1/2, x \rightarrow 0 \\ c_\nu^{(0)}(x) &= \frac{1}{2\nu}(1 + \mathcal{O}(\nu^{-1})), \nu \rightarrow \infty \\ c_\nu^{(0)}(x) &= \frac{1}{2x}(1 + \mathcal{O}(x^{-1})), x \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Por otro lado, denotando por $\tilde{c}_\nu^{(0)}(x)$ a las mismas cantidades, pero respecto del Teorema 2.5, tenemos que

$$\begin{aligned} \tilde{c}_\nu^{(0)}(x) &= \frac{8x^2}{(4\nu^2 - 1)^2}(1 + \mathcal{O}(x)), \nu > 1/2, x \rightarrow 0 \\ \tilde{c}_\nu^{(0)}(x) &= \frac{x^2}{2\nu^4}(1 + \mathcal{O}(\nu^{-1})), \nu \rightarrow \infty \\ \tilde{c}_\nu^{(0)}(x) &= \frac{1}{2x^2}(1 + \mathcal{O}(x^{-1})), x \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Como hemos mencionado, las cotas obtenidas en el Teorema 2.5 son mejores que las obtenidas en el Teorema 2.2. Las estimaciones que acabamos de indicar confirman este hecho en los tres límites considerados y, además, muestran que las cotas del Teorema 2.5 son, para x suficientemente grande, más precisas que las cotas iteradas empezando desde las obtenidas en el Teorema 2.2. Sin duda, la fracción continua mejora las cotas a medida que $x \rightarrow 0$ y $\nu \rightarrow \infty$, y tenemos que

$$c_\nu^{(i)}(x) = \frac{1}{2\nu} \left(\frac{x}{2\nu} \right)^{2i} (1 + \mathcal{O}(x, \nu^{-1})), \tilde{c}_\nu^{(i)}(x) = \frac{1}{2\nu^2} \left(\frac{x}{2\nu} \right)^{2i+2} (1 + \mathcal{O}(x, \nu^{-1})) \quad (2.50)$$

pero cuando $x \rightarrow \infty$

$$c_\nu^{(i)}(x) = \frac{1}{2x}(1 + \mathcal{O}(x^{-1})), \tilde{c}_\nu^{(i)}(x) = \frac{1}{2x^2}(1 + \mathcal{O}(x^{-1})). \quad (2.51)$$

Cálculo de cotas para cocientes de funciones de Bessel modificadas

Las cotas del Teorema 2.5 se pueden usar para mejorar la computación del cociente $I_\nu(x)/I_{\nu-1}(x)$ mediante la fracción continua (2.19): usar el Teorema 2.5 como primera estimación mejora la convergencia para x grande. Notamos que los aproximantes de la fracción continua proceden de iterar (2.19) usando

$$H_\nu^{(i+1)}(x) = \frac{1}{\frac{2\nu}{x} + H_{\nu+1}^{(i)}(x)}, H_\nu^{(0)}(x) \equiv 0, \quad (2.52)$$

donde $H_\nu^{(2i-1)}(x), i = 1, 2, \dots$ son cotas superiores y $H_\nu^{(2i)}(x)$ son cotas inferiores para $I_\nu(x)/I_{\nu-1}(x)$. Tenemos en este caso

$$\frac{H_\nu^{(2i-1)}(x)}{H_\nu^{(2i)}(x)} - 1 = \frac{1}{(2i)^2(\nu+i)(\nu+i-1)} x^2(1 + \mathcal{O}(x^{-2})), \quad (2.53)$$

que tiene mal comportamiento asintótico cuando x se hace grande. Una primera mejora viene de usar el Teorema 2.2 que da $c_\nu^{(i)}(x) = \mathcal{O}(x^{-1})$ y, entonces usando el Teorema 2.5 obtenemos una mayor mejora dando $c_\nu^{(i)}(x) = \mathcal{O}(x^{-2})$ (ver (2.51)).

Finalizamos esta sección con una ilustración de la efectividad de las diferentes cotas obtenidas para la función $h_\nu(x)$. En la Figura 2.1 vemos varias gráficas superpuestas de las diferencias entre la función $h(x)$ (para el cálculo de las funciones $I_\nu(x)$ implicadas se ha utilizado la función de Matlab `BesselI`) y las cotas que hemos obtenido en los Teoremas 2.2 y 2.5 y la Observación 2.4.

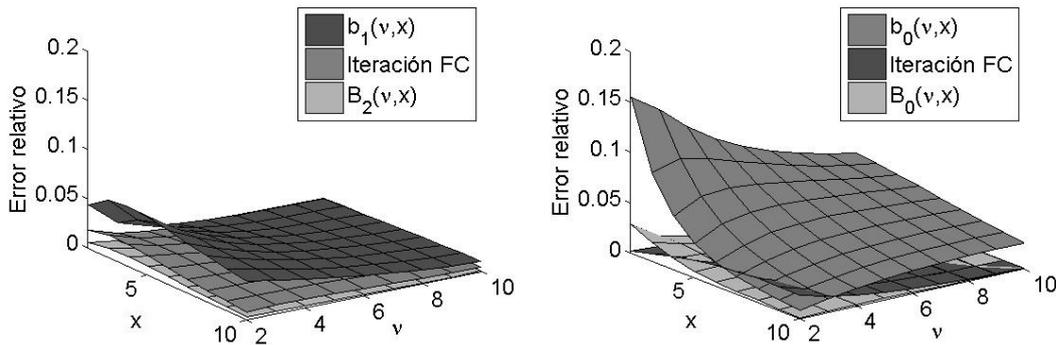


Figura 2.1: A izquierda tenemos una comparación de la función $h(x)$ con las cotas inferiores y a derecha una comparación con las cotas superiores.

Para poder diferenciar claramente los casos se han utilizado diferentes escalas de grises para cada comparación siendo las más oscuras las comparaciones con cotas de tipo $b_\alpha(\nu, x)$, seguidas de las comparaciones con las cotas obtenidas en la Observación 2.4 (que denotamos *iteración FC* en la leyenda de la figura) y finalizando con las gráficas más claras, que representan las comparaciones de $h(x)$ con las cotas de tipo $B_\alpha(\nu, x)$.

Confirmamos de forma empírica cómo el proceso iterativo detallado en la Observación 2.4 mejora las cotas obtenidas en el Teorema 2.2 y, del mismo modo, las cotas obtenidas en el Teorema 2.5 mejoran los otros dos casos anteriores.

2.3. Caso de la función $K_\nu(x)$

Para la función de Bessel $K_\nu(x)$ vamos a realizar un análisis similar. Sea $h(x) = K_{\nu-1}(x)/K_\nu(x)$, consideramos la función

$$h_0(x) = x^{-\alpha}h(x) \tag{2.54}$$

que cumple la ecuación de Riccati

$$h'_0(x) = x^{-\alpha} + \frac{2\tau}{x}h_0(x) + x^\alpha h_0(x)^2, \tau = \nu - \frac{1}{2}(\alpha + 1). \tag{2.55}$$

Tenemos que

$$\gamma(x) = x^{2\alpha}, \eta_0(x) = \tau x^{\alpha-1} \tag{2.56}$$

y la posible cota para $h_0(x)$

$$\beta_0(x) = \phi_0(x) = \frac{1}{\eta_0(x) + \sqrt{\eta_0(x)^2 + \phi(x)}} = \frac{x^{1-\alpha}}{\tau + \sqrt{\tau^2 + x^2}}. \tag{2.57}$$

Tendremos así, la familia uniparamétrica de posibles cotas para $h(x)$

$$d_\alpha(\nu, x) = \frac{x}{\tau + \sqrt{\tau^2 + x^2}}, \tau = \nu - \frac{1}{2}(\alpha + 1). \tag{2.58}$$

Vamos a probar que los casos $\alpha = 0, 1$ son cotas de $h(x)$ y son las mejores posibles del tipo $d_\alpha(\nu, x)$.

Teorema 2.8 *Se cumplen las desigualdades*

$$\frac{K_{\nu-1}}{K_\nu} \geq d_0(\nu, x) = \frac{x}{\nu - 1/2 + \sqrt{(\nu - 1/2)^2 + x^2}}, \nu \geq 1/2 \tag{2.59}$$

Cálculo de cotas para cocientes de funciones de Bessel modificadas

$$\frac{K_{\nu-1}}{K_\nu} \leq d_1(\nu, x) = \frac{x}{\nu - 1 + \sqrt{(\nu - 1)^2 + x^2}}, \nu \in \mathbb{R}$$

Además, estas cotas son las mejores cotas posibles de la forma $d_\alpha(\nu, x)$, $\alpha \in \mathbb{R}$, en su rango de validez.

Demostración En este caso, también se cumple que para $\alpha \in (0, 1)$, $d_\alpha(\nu, x)$ no es cota. Usando que $K_\nu(x) \sim \frac{1}{2}\Gamma(\nu)(x/2)^{-\nu}$ para $\nu > 0$ cuando $x \rightarrow 0^+$ y la expansión asintótica [41][Ec. 10.40.2], tenemos que

$$h_0(x) = \frac{x^{1-\alpha}}{2(\nu-1)}(1 + \mathcal{O}(1)), \nu > 1 \quad (2.60)$$

$$h_0(x) = x^{-\alpha}(1 - (\nu - 1/2)x^{-1} + \mathcal{O}(x^{-2})).$$

Por lo que $h_0(0^+)h_0(+\infty) < 0$ para $\alpha \in (0, 1)$, así que la gráfica de $h_0(x)$ corta la de $\phi_0(x)$, así que no puede ser cota de $h_0(x)$. Probamos ahora que son cotas los casos particulares $\alpha = 0, 1$.

1. $\alpha = 0$: el caso $\nu = 1/2$ es trivial, dado que $K_{1/2}(x) = K_{-1/2}(x)$. Para $\nu > 1/2$ tenemos que $\phi_0(x) = x/(\tau + \sqrt{\tau^2 + x^2})$, $\tau = \nu - 1/2$ es estrictamente creciente. Además, (2.60) nos indica que $h_0(+\infty) > 0$ y $h'_0(+\infty) > 0$. Con lo que podemos aplicar el Teorema 2.1 para probar que $h_0(x) > \phi_0(x)$.
2. $\alpha = 1$: tenemos que $\phi_0(x) = 1/(\nu - 1 + \sqrt{(\nu - 1)^2 + x^2})$ es estrictamente decreciente y (2.60) muestra que $h_0(+\infty) > 0$ y $h'_0(+\infty) < 0$, luego aplicando el Teorema 2.1 probamos que $h_0(x) < \phi_0(x)$.

Por último, dado que la función $d_\alpha(\nu, x)$ es creciente como función de α , tenemos que para $\alpha \geq 1$, las funciones $d_\alpha(\nu, x)$ son cotas superiores, siendo $d_0(\nu, x)$ la mejor y para $\alpha \leq 0$, las funciones $d_\alpha(\nu, x)$ son cotas inferiores, siendo $d_1(\nu, x)$ la mejor.

De igual modo que para el caso de las funciones de Bessel de primera especie, el Teorema 2.1 no se puede usar para probar que los valores $\beta_0(x)$ en el caso $\alpha \in (-1, 0) \cup (0, 1)$ sean cotas, debido a que $\phi_0(x) = \beta_0(x)$ no es monótona. Sin embargo, de la monotonía de $d_\alpha(\nu, x)$ concluimos que para $\alpha \in (-1, 0)$ podemos obtener cotas inferiores para $K_{\nu-1}(x)/K_\nu(x)$ al menos para $\nu \geq 1/2$; de hecho, estas cotas, aunque menos precisas que $d_0(\nu, x)$ para ν positivo, extienden el rango de validez. Para $\alpha = -1$ tenemos el siguiente resultado:

Teorema 2.9

$$\frac{K_{\nu-1}(x)}{K_\nu(x)} > d_{-1}(\nu, x) = \frac{x}{\nu + \sqrt{\nu^2 + x^2}}, \nu \in \mathbb{R} \quad (2.61)$$

Demostración Para todo valor real ν tenemos que $\phi_0(x)$ es creciente para $\alpha = -1$ y $h'_0(0^+) > 0$. El Teorema 2.1 implica que $h_0(x) = xK_{\nu-1}(x)/K_\nu(x) > \phi_0(x) = x^2/(\nu + \sqrt{\nu^2 + x^2})$.

Observación 2.10 *Igual que para el caso de las funciones de Bessel $I_\nu(x)$ podemos obtener sucesivas cotas utilizando el método propuesto en la Observación 2.4, también podemos obtener una expresión similar a (2.19) para el caso de $K_\nu(x)$ utilizando la relación de recurrencia [41][Ec. 10.29.2] dando como resultado*

$$\frac{K_{\nu-1}(x)}{K_\nu(x)} = \frac{1}{\frac{2(\nu-1)}{x} + \frac{K_{\nu-2}(x)}{K_{\nu-1}(x)}}. \quad (2.62)$$

Sin embargo, las sucesivas cotas obtenidas repitiendo el proceso descrito en la Observación 2.4 producen cotas para un rango de valores de ν más limitado que las cotas obtenidas en 2.8 por lo que no hemos una descripción detallada de las cotas obtenidas de esta forma.

2.3.1. Cotas obtenidas por proceso iterativo

La primera iteración del proceso descrito en la primera sección, partiendo de la función (2.54), es

$$\eta_1(x) = x^{\alpha-1} \left(\nu - \frac{1}{2} - \frac{\tau}{2\sqrt{\tau^2 + x^2}} \right), \tau = \nu - \frac{\alpha + 1}{2} \quad (2.63)$$

y las posibles cotas para $h(x)$ serán la familia uniparamétrica

$$D_\alpha(\nu, x) = \frac{x}{\varphi_\alpha(\nu, x) + \sqrt{\varphi_\alpha(\nu, x)^2 + x^2}} \quad (2.64)$$

con

$$\varphi_\alpha(\nu, x) = (\nu - 1/2) - \frac{\tau}{2\sqrt{\tau^2 + x^2}}. \quad (2.65)$$

Vamos a probar, usando el Teorema 2.1, que $h_1(x) = h_0(x)/\beta_0(x)$ está acotado por $\phi_1(x) = \beta_1(x)/\beta_0(x)$. Para esto, tendremos que usar la expansión asintótica obtenida a partir de (2.60),

$$h_1(x) = 1 - \frac{\alpha}{2}x^{-1} + \frac{1}{2} \left(\nu - \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\alpha^2 \right) x^{-2} + \mathcal{O}(x^{-3}). \quad (2.66)$$

Teorema 2.11 *Para $\nu \geq 1/2$ se cumple que*

$$D_{2\nu-1}(\nu, x) \leq \frac{K_{\nu-1}}{K_\nu} \leq D_0(\nu, x) \quad (2.67)$$

dándose la igualdad para $\nu = 1/2$. Además, estas cotas son las mejores cotas posibles de la forma $D_\alpha(\nu, x)$, $\alpha \in \mathbb{R}$, en su rango de validez.

Cálculo de cotas para cocientes de funciones de Bessel modificadas

Demostración Dado que $D_{2\nu-1}(\nu, x) = d_0(\nu, x)$, este caso ya está probado. Vamos a probar por tanto, que el caso $\alpha = 0$ es una cota superior. Para ello, basta comparar la monotonía de $\phi_1(x)$ con la de $h_1(x)$ para x grande.

Tenemos, usando (2.66), que $h_1(x) > 0$ y $h_1'(x) < 0$ para $\nu > 1/2$ y x suficientemente grande. Por otro lado, vamos a probar que $\phi_1(x)$ es decreciente para todo $x > 0$ si $\nu > 1/2$. Tenemos así que

$$\phi_1'(x) = \frac{\beta_1(x)}{\beta_0(x)} \left[\frac{\eta_0'(x)}{\sqrt{\eta_0(x)^2 + 1}} - \frac{\eta_1'(x)}{\sqrt{\eta_1(x)^2 + 1}} \right] \quad (2.68)$$

donde, considerando que $\alpha = 0$, tenemos que $\eta_1(x) = \eta_0(x)f(x)$ en la que se define $f(x) = 1 - \frac{1}{2\sqrt{(\nu-1/2)^2+x^2}} < 1$.

Tenemos que distinguir ahora dos casos, que $\eta_1'(x) \geq 0$ o $\eta_1'(x) < 0$. Para el caso positivo, es obvio que $\phi_1'(x) < 0$ porque $\eta_0'(x)$ siempre es negativo. En el caso $\eta_1'(x) < 0$, tenemos que $\phi_1'(x) < 0$ equivale a decir

$$1 + \eta_0(x)^2 f(x)^2 > \left(f(x) + \frac{\eta_0(x)}{\eta_0'(x)} f'(x) \right)^2 (1 + \eta_0(x)^2). \quad (2.69)$$

El término entre paréntesis de esta desigualdad que es igual a $\eta_1'(x)/\eta_0'(x)$ cumple

$$0 < \frac{\eta_1'(x)}{\eta_0'(x)} = f(x) + \frac{\eta_0(x)}{\eta_0'(x)} f'(x) < f(x) < 1. \quad (2.70)$$

La igualdad de esta última expresión es obvia porque $\eta_0'(x) < 0$ y estamos asumiendo que $\eta_1'(x) < 0$. La parte $\eta_1'(x)/\eta_0'(x) < f(x)$ es obvia. Esta última cadena de desigualdades nos permite probar (2.69).

Hasta ahora hemos probado que $h_1(x) > 0$ y $h_1'(x) < 0$ para x suficientemente grande y que $\phi_1(x)$ es decreciente para todo $x > 0$. Usando un argumento similar al usado en 2.1, pero para valores grande de x en lugar de un entorno de 0, podemos probar que $h_1(x) > 0$, $h_1'(x) < 0$ para todo x y de ahí tenemos $h_1(x) < \phi_1(x)$.

Observación 2.12 Dado que $D_\alpha(\nu, x)$ es decreciente como función de α y que $D_{2\nu-1}(\nu, x)$ es cota inferior, tenemos que para todo $\alpha \geq 2\nu - 1$ la función $D_\alpha(\nu, x)$ es también cota inferior, pero más débil que el caso $\alpha = 2\nu - 1$. Del mismo modo, $D_\alpha(\nu, x)$ es cota superior para todo $\alpha \leq 0$ siendo la mejor el caso $\alpha = 0$. Ya hemos probado que $D_{\mp\infty}(\nu, x)$ son cotas (ver Teoremas 2.8 y 2.9), que son necesariamente menos precisas que $D_0(\nu, x)$ y $D_{2\nu-1}(\nu, x)$ respectivamente.

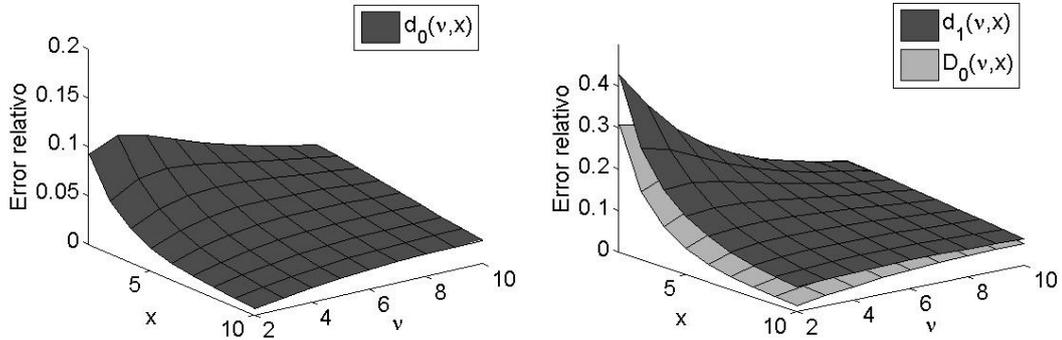


Figura 2.2: A izquierda tenemos una comparación de la función $h(x)$ con las cotas inferiores y a derecha una comparación con las cotas superiores.

2.3.2. Análisis computacional de las cotas obtenidas

En la Figura 2.2 se muestran la diferencia entre la función $h(x)$ (para el cálculo de las funciones $K_\nu(x)$ implicadas se ha utilizado la función de Matlab de Matlab `BesselK` y las cotas obtenidas en los Teoremas 2.8 y 2.11 (recordar que las cotas inferiores obtenidas en ambos teoremas son la misma). Nuevamente, las gráficas de color más oscuro representan la diferencia de la función $h(x)$ con las cotas de tipo $d_\alpha(\nu, x)$ mientras que la gráfica más clara es la comparación con las cotas de tipo $D_\alpha(\nu, x)$.

Observamos de nuevo, de forma empírica, como las cotas obtenidas en el Teorema 2.11 tras aplicar un proceso iterativo son mejores que las cotas iniciales obtenidas en el Teorema 2.8.

Realizando dichos cálculos en un rango más amplio de parámetros que el que se aprecia en la Figura 2.2 se puede observar que las cotas mejoran cuanto mayor es el valor de x , pero se ha reducido dicho rango de parámetros para obtener una mayor claridad en las gráficas mostradas.

2.4. Observaciones finales

Todas las ideas estudiadas en este capítulo podrían ser usadas para obtener nuevas cotas para otras funciones. Por ejemplo, las funciones gamma incompletas y las funciones de Bessel pueden ser expresadas en términos de funciones hipergeométricas confluentes y, en general, los cocientes de funciones hipergeométricas satisfacen ecuaciones de Riccati. Esto nos sitúa en el contexto del Teorema 2.1 y sugiere que un análisis parecido al que hemos realizado en [45] se podría realizar también para este tipo de funciones.

Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas

En este capítulo abordaremos la evaluación numérica de las reglas de cuadratura gaussianas clásicas, incidiendo particularmente en las cuadraturas de Gauss-Hermite y Gauss-Laguerre, aunque también esbozaremos procedimientos análogos para el caso Gauss-Jacobi.

Como es bien sabido, las cuadraturas gaussianas son óptimas respecto al grado de exactitud, y esta propiedad explica su popularidad, si bien estas fórmulas de cuadratura tienen fama de ser difíciles y costosas de calcular, en particular para grados altos. Sin embargo, y como se describe en [55], se han producido recientes avances tanto en la evaluación mediante aproximaciones asintóticas (en particular para Gauss-Legendre [2]), como en la utilización de métodos iterativos (por ejemplo para el caso Gauss-Jacobi [30], en combinación con métodos asintóticos) que permiten evaluar estas cuadraturas de forma eficiente, también para grados altos.

En este capítulo analizamos la evaluación eficiente de cuadraturas gaussianas clásicas, Empezaremos describiendo métodos basados en aproximaciones asintóticas para pasar a continuación a describir métodos iterativos, basados en los métodos de punto fijo descritos en [46]. Estos algoritmos iterativos, como veremos, darán lugar métodos de evaluación rápidos (de cuarto orden), precisos y fiables (con convergencia garantizada), además de resultar válidos para rangos de los parámetros no accesibles para previos métodos (en particular para el caso Gauss-Laguerre).

3.1. Introducción

Dada una integral definida

$$I(f) = \int_a^b f(x)w(x)dx \tag{3.1}$$

Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas

donde $w(x)$ es una función peso en el intervalo $[a, b]$, la regla de cuadratura

$$Q_n(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) \quad (3.2)$$

es una regla de cuadratura gaussiana si tiene el mayor grado de exactitud posible, es decir, $I(f) = Q_n(f)$ para todo polinomio f de grado a lo sumo $2n - 1$.

Los nodos $x_i, i = 1, \dots, n$ de una regla de cuadratura gaussiana son las raíces de los polinomios ortogonales, por ejemplo mónicos, que cumplen

$$\int_a^b x^i p_n(x) w(x) dx = 0, i = 0, \dots, n - 1. \quad (3.3)$$

Entre las reglas de cuadratura gaussiana, las asociadas a los polinomios ortogonales clásicos (que son soluciones de ecuaciones diferenciales de segundo orden), son especialmente populares. Estas reglas clásicas son:

- Gauss-Hermite: $w(x) = e^{-x^2}$; $a = -\infty, b = +\infty$. Los polinomios ortogonales asociados son los polinomios de Hermite, $H_n(x)$.
- Gauss-Laguerre: $w(x) = x^\alpha e^{-x}$; $\alpha > -1$; $a = 0, b = +\infty$. Los polinomios ortogonales asociados son los polinomios de Laguerre, $L_n^\alpha(x)$.
- Gauss-Jacobi: $w(x) = (1 - x)^\alpha (1 + x)^\beta$; $\alpha, \beta > -1$ $a = -1, b = 1$. Los polinomios ortogonales asociados son los polinomios de Jacobi, $P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$.

Dados los nodos de estas cuadraturas gaussianas, podemos hallar sus correspondientes pesos en términos de las derivadas de los polinomios:

- Gauss-Hermite:

$$w_i^H = \frac{\sqrt{\pi} 2^{n+1} n!}{[H_n'(x_i)]^2}, \quad (3.4)$$

- Gauss-Laguerre:

$$w_i^L = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! x_i [L_n^{(\alpha)'}(x_i)]^2}, \quad (3.5)$$

- Gauss-Jacobi:

$$w_i^J = \frac{M_{n, \alpha, \beta}}{(1 - x_i^2) [P_n^{(\alpha, \beta)'}(x_i)]^2}, \quad (3.6)$$

donde

$$M_{n, \alpha, \beta} = 2^{\alpha + \beta + 1} \frac{\Gamma(n + \alpha + 1) \Gamma(n + \beta + 1)}{n! \Gamma(n + \alpha + \beta + 1)}. \quad (3.7)$$

Existen diversos métodos para calcular los nodos y pesos de las cuadraturas gaussianas clásicas de forma numérica. Uno de los métodos más conocidos es el llamado algoritmo de Golub-Welsch [28] que utiliza la relación de recurrencia

$$xp_n(x) = a_n p_{n+1}(x) + b_n p_n(x) + c_n p_{n-1}(x) \quad (3.8)$$

cumplida por los polinomios ortogonales, y cuyos coeficientes se pueden escribir en términos de fórmulas cerradas en el caso de las cuadraturas clásicas. Para reglas no clásicas, los métodos de evaluación vienen precedidos de un método numérico de evaluación de los coeficientes de la recurrencia. Referimos a [16] para una descripción detallada de estos métodos.

Considerando los polinomios ortonormales $\tilde{p}_n = p_n / \|p_n\|$, es fácil comprobar que estos polinomios satisfacen una relación de recurrencia de la forma

$$\alpha_{i+1} \tilde{p}_{i+1}(x) + \beta_i \tilde{p}_i(x) + \alpha_i \tilde{p}_{i-1}(x) = x \tilde{p}_i(x) \quad (3.9)$$

donde

$$\alpha_0 \tilde{p}_{-1}(x) = 0; \beta_i = b_i, i \geq 0; \alpha_i = \sqrt{c_i a_{i-1}}, i \geq 1 \quad (3.10)$$

con a_i, b_i, c_i los coeficientes de la relación de recurrencia definida en (3.8) para los polinomios ortogonales p_n .

Si consideramos una regla de cuadratura gaussiana de n nodos podemos usar dicha relación de recurrencia para construir la matriz

$$J = \begin{pmatrix} \beta_0 & \alpha_1 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha_1 & \beta_1 & \alpha_2 & & \\ 0 & \alpha_2 & \beta_2 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \alpha_{n-1} \\ 0 & \dots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} & \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

cuyos autovalores son los nodos de la cuadratura gaussiana considerada. Para calcular los pesos w_i de la cuadratura se utiliza la relación

$$w_i = \frac{1}{\|\tilde{p}(x_i)\|} = \mu_0 \frac{(\phi_1^{(i)})^2}{\|\phi^{(i)}\|^2} \quad (3.12)$$

donde $\phi^{(i)} = (\phi_1^{(i)}, \dots, \phi_n^{(i)})$ es un autovector de la matriz J asociado al autovalor x_i y

$$\mu_0 = \int_a^b w(x) dx. \quad (3.13)$$

El problema de este método es que es un algoritmo de complejidad $\mathcal{O}(n^2)$ lo que hace que sea un método poco aconsejable para problemas de gran magnitud.

Como alternativa para calcular cuadraturas de grado alto podemos considerar métodos iterativos para resolver este problema; estos métodos, de hecho, preceden en el tiempo al algoritmo de Golub-Welsch [6, 38].

Los métodos iterativos requieren disponer de métodos de evaluación de los polinomios ortogonales involucrados en el problema. En el Apéndice A se describen expansiones asintóticas que pueden servir para el cálculo de los polinomios para grado elevado aunque el uso de series locales de Taylor puede representar una interesante alternativa [27] como discutiremos más adelante. En la literatura se pueden encontrar métodos asintóticos aplicados a cuadraturas de Gauss-Jacobi de orden alto [56], de Gauss-Legendre [3] y de Gauss-Hermite [56]. Por supuesto, la situación ideal sería disponer de métodos eficientes que permitan evaluar los polinomios involucrados en la cuadratura para cualquier rango de parámetros. Este es el caso de los polinomios de Hermite para los que se presenta en [20] un algoritmo, prácticamente sin restricciones en el rango de parámetros, para la evaluación de funciones del cilindro parabólico, de las que los polinomios de Hermite son un caso particular. En [26] se presentan métodos para el cálculo de los polinomios de Laguerre para parámetro α moderado.

Por otro lado, por lo general también es necesario disponer de una aproximación inicial de las raíces de estos polinomios para poder iniciar el proceso iterativo, salvo para el caso de los métodos globalmente convergente que nosotros consideraremos. Para el caso de Jacobi (con $\alpha, \beta \in [-1/2, 1/2]$) se mencionan una serie de aproximaciones en [56] entre las que encontramos una expansión alejada de $x = \pm 1$ [14] y una fórmula en términos de ceros de funciones de Bessel [12]. En el caso de Laguerre, se propone una expansión para los ceros pequeños en [57] que posteriormente fue mejorada en [13] para los ceros grandes. A veces estas aproximaciones son tan precisas que pueden usarse como métodos directos para calcular dichos polinomios, como es el caso de la cuadratura de Gauss-Legendre en la que las series dadas en [2] permiten calcular los nodos y los pesos de la cuadratura con doble precisión. Una reciente referencia con nuevas estimaciones asintóticas para las cuadraturas gaussianas clásicas la encontramos en [25].

Finalmente, se necesita refinar dichas aproximaciones con un método iterativo adecuado y disponer de alguna relación funcional que use los polinomios ortogonales para poder calcular los pesos de la cuadratura. El método de Newton es, con mucha diferencia, el más empleado, aunque existen métodos alternativos de mayor orden como el considerado en [59] o el método que vamos a describir en este capítulo [46], que además garantiza una convergencia global del proceso iterativo. Por contra, el caso del método de Newton sólo existe una prueba de su convergencia para el caso de Gauss-Legendre [44].

Aunque el elemento fundamental de nuestro estudio va a ser el establecimiento de

métodos iterativos, vamos a comenzar con un análisis computacional del uso de algunas aproximaciones asintóticas para evaluar los nodos y pesos de las cuadraturas clásicas. Incluiremos también mención al caso de la cuadratura de Gauss-Jacobi. El uso de las aproximaciones asintóticas serán de utilidad, en otras cosas, como test complementario de la precisión de los algoritmos iterativos, pero también se espera que para orden suficientemente grande puedan servir como método eficiente de computación (de forma similar al caso Gauss-Legendre considerado en [2]).

3.2. Aspectos computacionales de las aproximaciones asintóticas a los nodos y pesos de las cuadraturas gaussianas

En el Apéndice A detallamos aproximaciones asintóticas para los polinomios de Hermite, Laguerre y Jacobi a partir de las cuales es posible derivar aproximaciones para los nodos de las cuadraturas que estamos considerando. Una vez obtenidos los nodos de las cuadraturas, la evaluación de los pesos (3.4), (3.5), (3.6) a partir de expansiones asintóticas la haremos usando las relaciones entre las derivadas de los polinomios ortogonales implicados y esos mismos polinomios con índices consecutivos, lo que proporciona:

$$\begin{aligned} w_i^H &= \frac{\sqrt{\pi}2^{n+1}n!}{[H_{n+1}(x_i)]^2}, \\ w_i^L &= \frac{x_i\Gamma(n+\alpha+1)}{n!(n+1)^2[L_{n+1}^{(\alpha)}(x_i)]^2}, \\ w_i^J &= \frac{(1-x_i^2)\widetilde{M}_{n,\alpha,\beta}}{[P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}(x_i)]^2}, \end{aligned} \tag{3.14}$$

donde

$$\widetilde{M}_{n,\alpha,\beta} = 2^{\alpha+\beta-1} \frac{(2n+\alpha+\beta+2)^2\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{(n+1)!(n+\alpha+\beta+1)(n+1)\Gamma(n+\alpha+\beta+2)}.$$

Resumimos a continuación las aproximaciones asintóticas que vamos a manejar para los nodos de las cuadraturas. Estas aproximaciones están detalladas en [25] e involucrarán (en casi todos los casos) ceros de otras funciones especiales (Airy $\text{Ai}(x)$ o Bessel $J_\nu(x)$). Nos centraremos posteriormente en los aspectos computacionales del uso de estas aproximaciones.

a) Aproximaciones asintóticas a los ceros de los polinomios de Hermite

A partir de las expansiones dadas en el Apéndice A, es posible obtener dos tipos de aproximaciones asintóticas a los ceros de los polinomios de Hermite: una de ellas

en términos de los ceros de las funciones de Airy y otra en término de funciones elementales.

La expansión en términos de los ceros de las funciones de Airy se obtiene en términos de la variable η definida en el Apéndice A: damos una primera aproximación del cero h_k de $H_n(x)$ de la forma $\eta_0 = \nu^{-\frac{2}{3}} a_k$ donde a_k es el k -ésimo cero de la función de Airy $\text{Ai}(x)$. Dada la simetría de los polinomios de Hermite, podemos asumir $1 < k < \frac{n}{2}$. Damos una expansión de η correspondiente al cero de $H_n(x)$ escribiendo

$$\eta = \eta_0 + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim \frac{\eta_1}{\nu} + \frac{\eta_2}{\nu^2} + \dots, \quad (3.15)$$

y calculamos los sucesivos valores $\eta_j, j \geq 1$. Reescribimos (A.2) usando la función $W(\eta)$

$$\begin{aligned} H_n(x) &= \frac{n!}{\nu^{\frac{1}{2}n + \frac{1}{3}}} e^{\nu A} \chi(\eta) W(\eta), \\ W(\eta) &= \text{Ai}\left(\eta \nu^{\frac{2}{3}}\right) A(\eta) - \nu^{-1} \text{Ai}'\left(\eta \nu^{\frac{2}{3}}\right) B(\eta), \end{aligned} \quad (3.16)$$

y expandimos $W(\eta)$ en η_0 usando $\eta = \eta_0 + \varepsilon$, obteniendo

$$W(\eta_0) + \frac{\varepsilon}{1!} W'(\eta_0) + \frac{\varepsilon^2}{2!} W''(\eta_0) + \dots = 0. \quad (3.17)$$

En esta última ecuación usamos la expansión (3.15), igualamos potencias de ν y obtenemos los sucesivos coeficientes $\eta_j, j \geq 1$ siendo los primeros

$$\begin{aligned} \eta_1 &= 0, \\ \eta_2 &= -B_1(\eta), \\ \eta_3 &= \eta_2 A_1(\eta) + B_2(\eta), \end{aligned} \quad (3.18)$$

y siendo las cantidades A_i, B_i los coeficientes de las expansiones (A.3). Una vez conocidos los coeficientes η_j , podemos obtener una aproximación de η y a partir de la inversión de (A.4), obtener una aproximación al cero h_k .

Una segunda expansión para los ceros de los polinomios de Hermite se puede obtener a partir de la expansión, detallada en el Apéndice A, en términos de funciones elementales para estos polinomios. Para obtener la expansión para los ceros se considera la función $W(\eta)$:

$$W(\eta) = \cos\left(\mu^2 \eta - \frac{1}{4}\pi\right) \mathcal{A}_\mu(t) - \sin\left(\mu^2 \eta - \frac{1}{4}\pi\right) \mathcal{B}_\mu(t), \quad (3.19)$$

donde $\mu^2 = 2n + 1$. Se toma η_0 de modo que el término en coseno se anule y η_0 y los valores correspondientes de t y x estén relacionados (en primer orden de aproximación) con el k -ésimo cero positivo de $H_n(x)$.

Se define:

$$\eta_0 = \frac{k_0 + \frac{3}{4}\pi}{\mu^2}, \quad k_0 = \begin{cases} \frac{1}{2}(n-1) - k, & n \text{ impar,} \\ \frac{1}{2}n - k, & n \text{ par.} \end{cases} \quad (3.20)$$

De este modo, $\cos(\mu^2\eta_0 - \frac{1}{4}\pi) = 0$. Se puede observar que cuando n es impar $k = 0$, y entonces $\eta_0 = \frac{1}{4}\pi$.

Se asume entonces que $W(\eta) = 0$ tiene una solución η que puede expandirse en la forma

$$\eta = \eta_0 + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim \frac{\eta_1}{\mu^2} + \frac{\eta_2}{\mu^4} + \frac{\eta_3}{\mu^6} + \frac{\eta_4}{\mu^8} + \dots \quad (3.21)$$

y esta aproximación es la que posteriormente se invierte para obtener la aproximación al cero del polinomio de Hermite.

Es posible comprobar que $\eta_{2k+1} = 0$, $k = 0, 1, 2, \dots$ y que los primeros coeficientes no nulos son

$$\begin{aligned} \eta_2 &= -\frac{t(t^2 - 6)}{24(1 - t^2)^{\frac{3}{2}}}, \\ \eta_4 &= -\frac{t(56t^8 - 252t^6 + 351t^4 + 2340t^2 + 3780)}{5760(1 - t^2)^{\frac{9}{2}}}, \\ \eta_6 &= -t(3968t^{14} - 29760t^{12} + 95544t^{10} - 173232t^8 + 231237t^6 - \\ &\quad 1890882t^4 - 6068580t^2 - 1690920) / (322560(1 - t^2)^{\frac{15}{2}}). \end{aligned} \quad (3.22)$$

b) Aproximaciones asintóticas a los ceros de los polinomios de Laguerre

Respecto a los polinomios de Laguerre $L_n^{(\alpha)}(x)$, es conveniente considerar las tres expansiones que se detallan en el Apéndice A (dos expansiones en términos de funciones de Bessel y una expansión en términos de funciones de Hermite) cuya eficiencia va a depender de la región del parámetro x considerada. Cada una de estas expansiones nos proporcionará un método correspondiente para obtener aproximaciones de las raíces del polinomio en las respectivas regiones de eficiencia.

Dado que la expansión (A.25) de la Sección A.2.1 es válida para valores acotados de x , podemos usar dicha expansión para hallar ceros de polinomios de Laguerre de valor pequeño en función de ceros de funciones de Bessel.

Una primera aproximación para el cero ℓ_k de $L_n^\alpha(x)$ se obtiene como

$$\ell_k = \frac{j_k^2}{4n}, \quad (3.23)$$

donde j_k es el k -ésimo cero de $J_\alpha(x)$. Mejoramos la aproximación considerando

$$\ell_k = \xi + \varepsilon, \quad \xi = \frac{1}{4n} j_k^2, \quad (3.24)$$

donde ε se puede obtener en términos de una expansión de la forma

$$\varepsilon \sim \frac{\xi_1}{n} + \frac{\xi_2}{n^2} + \frac{\xi_3}{n^3} + \dots \quad (3.25)$$

Siguiendo un proceso análogo al descrito para los ceros de los polinomios de Hermite, se obtienen los coeficientes de la expansión (3.25). Los primeros coeficientes son

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \frac{\xi}{12}(\xi - 6(\alpha + 1)), \\ \xi_2 &= \frac{\xi}{720}(150 - 90\xi + 11\xi^2 + 360\alpha + 210\alpha^2 - 90\xi\alpha), \\ \xi_3 &= \frac{\xi}{20160}(2121\xi - 770\xi^2 + 73\xi^3 - 6300\alpha - 8820\alpha^2 + \\ &\quad 5040\xi\alpha - 3780\alpha^3 - 770\xi^2\alpha + 2751\xi\alpha^2 - 1260), \end{aligned} \quad (3.26)$$

con ξ definido como en (3.24).

Vinculada a la expansión (A.30) para el polinomio $L_n^{(\alpha)}(2\nu x)$ en términos de funciones de Bessel descrita en el apéndice A, podemos obtener una segunda expansión asintótica para los ceros de los polinomios de Laguerre:

Se buscan aproximaciones a los ceros en términos de ζ de la forma

$$\zeta = \zeta_0 + \varepsilon, \quad \zeta_0 = \frac{j_k^2}{4\nu^2}, \quad (3.27)$$

donde j_k es cero de $J_\alpha(z)$ y ε se puede expandir de la forma

$$\varepsilon \sim \frac{\zeta_1}{\nu^2} + \frac{\zeta_2}{\nu^4} + \frac{\zeta_3}{\nu^6} + \dots \quad (3.28)$$

Como en casos anteriores, los ζ_i se pueden obtener en términos de los coeficientes de los polinomios ortogonales. Tenemos, por ejemplo, que $\zeta_1 = -B_0(\zeta)$ (ver (A.35)) y el siguiente coeficiente cumple

$$6\zeta\zeta_2 = 2B_0(\zeta)^3 - 3(\alpha + 1)B_0(\zeta)^2 + 6\zeta B_0(\zeta) (B_0'(\zeta) + A_1(\zeta)) - 6\zeta B_1(\zeta) \quad (3.29)$$

evaluado en $\zeta = \zeta_0$.

Por último y a partir de la expansión asintótica de los polinomios de Laguerre en términos de las funciones de Airy dada en el Apéndice A, podemos obtener una tercera expansión asintótica de los ceros ℓ_j de $L_n^\alpha(\nu x)$ en términos de los ceros a_k de la función de Airy $\text{Ai}(x)$. Para ello consideramos la función

$$W(\zeta) = \text{Ai}(\nu^{2/3}\zeta) A(\zeta) + \nu^{-4/3} \text{Ai}'(\nu^{2/3}\zeta) B(\zeta), \quad (3.30)$$

donde $A(\zeta)$ y $B(\zeta)$ están descritos en (A.37). Tendremos que a_1 se corresponderá con ℓ_n , a_2 con ℓ_{n-1} y así sucesivamente. Dado que la expansión (A.36) sólo es válida para valores altos de x , sólo la usaremos para hallar los ceros ℓ_j de mayor valor absoluto. Un cero de $L_n^\alpha(\nu x)$ es un cero de $W(\zeta)$ y se puede escribir en términos de ζ de la forma (ver (A.39))

$$\zeta = \zeta_0 + \varepsilon, \quad \zeta_0 = \nu^{-2/3} a_j, \quad (3.31)$$

y, nuevamente, asumimos una expansión de ε de la forma

$$\varepsilon \sim \frac{\zeta_1}{\nu^2} + \frac{\zeta_2}{\nu^4} + \frac{\zeta_3}{\nu^6} + \dots \quad (3.32)$$

Expandiendo $W(\zeta)$ alrededor de ζ_0 y sustituyendo (3.32), podemos obtener los coeficientes ζ_j . Los primeros coeficientes son

$$\zeta_1 = -\beta_1, \quad \zeta_2 = -\left(\beta_3 + \frac{1}{6}\zeta_0\zeta_1^3 + \zeta_1\alpha_2 + \zeta_1\frac{d}{d\zeta}\beta_1 + \frac{1}{2}\zeta_0\beta_3\zeta_1^2\right), \quad (3.33)$$

c) Aproximaciones asintóticas a los ceros de los polinomios de Jacobi

Podemos usar la expansión (A.46) del Apéndice A para obtener aproximaciones de los ceros positivos p_k de polinomios de Jacobi $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ en términos de los ceros j_k de la función de Bessel $J_\alpha(x)$. El cero p_n se corresponderá con j_1 , p_{n-1} con j_2 y así sucesivamente. Dado que (A.46) no se puede usar cuando $x \rightarrow -1$, sólo consideramos los ceros p_k no negativos. Para el resto de ceros podemos usar la relación de simetría

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(-x) = (-1)^n P_n^{(\beta,\alpha)}(x). \quad (3.34)$$

Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas

Un cero de $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ es un cero de la función $W(\theta)$ definida en (A.46) y podemos escribir un cero en términos de θ de la forma

$$\theta = \theta_0 + \varepsilon, \quad \theta_0 = j_k/\nu. \quad (3.35)$$

Si suponemos que ε tiene una expansión de la forma

$$\varepsilon \sim \frac{\theta_1}{\nu^2} + \frac{\theta_2}{\nu^4} + \frac{\theta_3}{\nu^6} + \dots, \quad (3.36)$$

expandiendo $W(\theta)$ alrededor de θ_0 como sigue

$$W(\theta_0) + \frac{\varepsilon}{1!}W'(\theta_0) + \frac{\varepsilon^2}{2!}W''(\theta_0) + \dots = 0. \quad (3.37)$$

y sustituyendo (3.36) en dicha expansión, podemos obtener los coeficientes θ_j . Los primeros coeficientes son $\theta_1 = T_0(\theta_0) = A_1(\theta_0)$ y

$$6\theta\theta_2 = 6\theta T_1(\theta) + 6\theta(T_0'(\theta) - S_1(\theta))T_0(\theta) - 3(1 + 2\alpha)T_0(\theta)^2 - 2\theta T_0(\theta)^3, \quad (3.38)$$

evaluado en $\theta = \theta_0$. Estos coeficientes pueden ser representados con la expansión

$$\theta_k = \theta \chi^{2k-1} \sum_{j=0}^{\infty} t_{jk} \theta^{2j}, \quad k \geq 1, \quad (3.39)$$

evaluada en θ_0 . Los primeros coeficientes t_{jk} son

$$\begin{aligned} t_{0,2} &= \frac{1}{2}(2T_{0,1} + T_{0,0}^2 - 2\alpha T_{0,0}^2), \\ t_{1,2} &= \frac{1}{12}(-4T_{0,0}^3 + 12T_{1,1} - 12T_{0,0}S_{0,1} - 24\alpha T_{0,0}T_{1,0} + 36T_{0,0}T_{1,0} + 3T_{0,0}^2 + 2\alpha T_{0,0}^2), \\ t_{0,3} &= \frac{1}{12}(12T_{0,2} + 12T_{0,0}T_{0,1} + 2T_{0,0}^3 - 12\alpha T_{0,0}^3 - 24\alpha T_{0,0}T_{0,1} + 16\alpha^2 T_{0,0}^3). \end{aligned} \quad (3.40)$$

Comenzando con las aproximaciones asintóticas para los nodos de la cuadratura de Gauss-Hermite, su implementación computacional requiere, en primer lugar, escoger un método de resolución de las ecuaciones no lineales implicadas. Esta elección es de gran importancia en el coste computacional del algoritmo resultante, por lo que conviene analizar con detalle las características de la función a invertir. En todos los casos la opción escogida ha sido el método de Newton, partiendo de valores iniciales cuidadosamente escogidos y evitando cancelaciones en las expresiones implicadas.

Como ejemplo y en el caso de las aproximaciones en términos de funciones elementales para los ceros de los polinomios de Hermite, conviene escribir la ecuación no lineal a invertir como

$$f(t) = -\arcsin t - t\sqrt{1-t^2} + \left(\frac{\pi}{2} - 2\eta\right) = 0, \quad (3.41)$$

siendo η la misma variable de la ecuación (3.19). Escogeremos como valor inicial para iterar el método de Newton $t_0 = \lambda + \frac{1}{6}\lambda^3$ (que es más precisa cuanto más pequeño es λ),

$$\lambda = \begin{cases} \frac{\pi k}{2n+1}, & n \text{ impar,} \\ \pi \left(k - \frac{1}{2}\right) \\ \frac{-}{2n+1}, & n \text{ par,} \end{cases} \quad (3.42)$$

y k el orden del cero que se quiere determinar.

De este modo, evitamos pérdida de precisión por cancelaciones y se consigue convergencia al valor de la raíz en doble precisión con sólo 2 o 3 iteraciones en todos los casos.

Por otra parte, el uso de la expansión para los ceros del polinomio de Hermite en términos de los ceros de la función de Airy $\text{Ai}(x)$ (Eq. (3.15)) requiere un esquema de computación para estos ceros. Esto no supone ningún problema ya que su evaluación se puede hacer de manera muy sencilla y eficiente utilizando la relación para los ceros a_k de la función de Airy $\text{Ai}(x)$ $a_k = -T\left(\frac{3}{8}\pi(4k-1)\right)$, teniendo la función $T(t)$ la expansión de tipo Poincaré

$$T(t) \sim t^{2/3} \left(1 + \frac{5}{48}t^{-2} - \frac{5}{36}t^{-4} + \frac{77125}{82944}t^{-6} - \frac{108056875}{6967296}t^{-8} + \dots\right). \quad (3.43)$$

Esta expansión es válida para valores de k moderados/grandes. En nuestra implementación computacional utilizaremos valores pre-computados de los primeros 5 ceros de la función de Airy y la expansión mencionada para los siguientes ceros.

La precisión alcanzada con las aproximaciones asintóticas para los nodos de la cuadratura de Gauss-Hermite puede ser cercana a doble precisión en esquemas computacionales implementados en precisión finita, aunque se han de combinar las dos aproximaciones descritas (en términos de funciones elementales y en términos de ceros de la función de Airy $\text{Ai}(x)$) para conseguir esto: la aproximación en términos de funciones elementales pierde precisión para los nodos grandes de la cuadratura, mientras que la aproximación en términos de ceros de funciones de Airy lo hace cuando los nodos más pequeños de la cuadratura están muy próximos al origen.

Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas

Esto puede apreciarse en la Figura 3.1, donde se compara para $n = 100$ la precisión alcanzada con las dos aproximaciones mencionadas para el cálculo de los nodos de la cuadratura de Gauss-Hermite con los resultados proporcionados por el método iterativo que describiremos más adelante (la precisión alcanzada por el método iterativo es doble precisión en todo el rango). Comparaciones para valores de n más grandes se proporcionan en las Figuras 3.2 y 3.3, donde mostramos el comportamiento para los 1000 primeros ceros de las expansiones en términos de funciones elementales y en términos de ceros de funciones de Airy, respectivamente. El cálculo de los pesos de la cuadratura de Gauss-Hermite a partir de las expansiones del Apéndice A presenta un comportamiento análogo, por lo que es necesario utilizar las dos expansiones para obtener una buena aproximación en todo el intervalo.

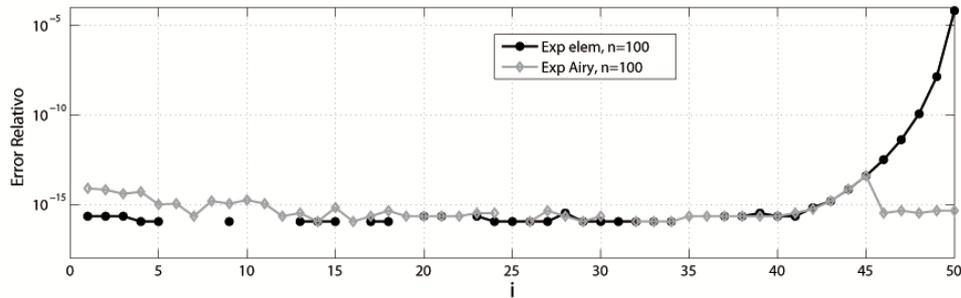


Figura 3.1: Variación, en función del número del nodo i , de la precisión alcanzada con la expansión asintótica uniforme en términos de funciones elementales y en términos de ceros de funciones de Airy para el cálculo de los nodos de la cuadratura de Gauss-Hermite para $n = 100$.

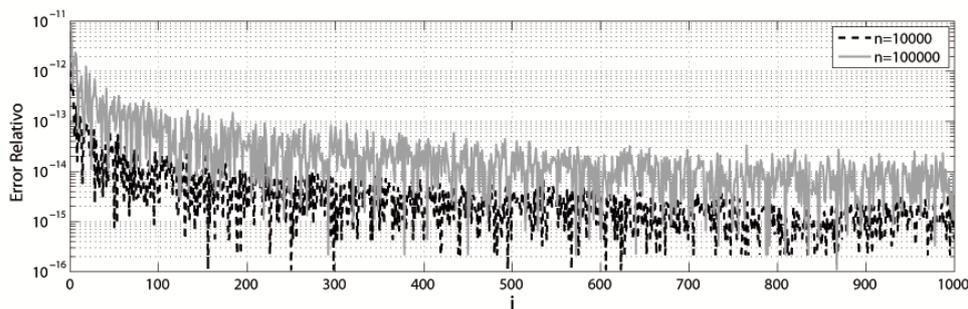


Figura 3.2: Variación, en función del número del nodo i , de la precisión alcanzada con la expansión asintótica en términos de ceros de funciones de Airy para el cálculo de los nodos de la cuadratura de Gauss-Hermite para $n = 10000, 100000$. Mostramos los 1000 primeros ceros para mayor claridad.

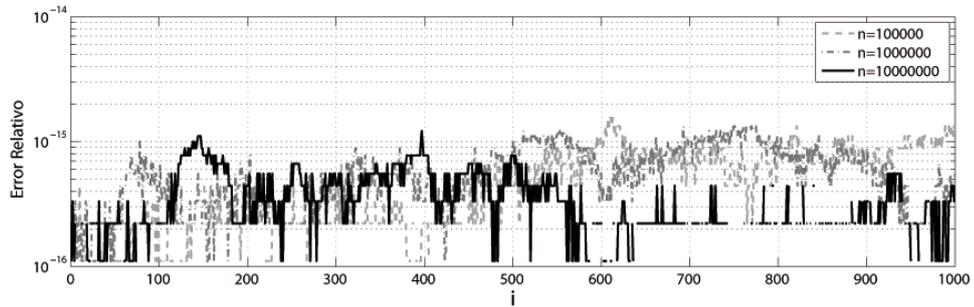


Figura 3.3: Variación, en función del número del nodo i , de la precisión alcanzada con la expansión asintótica en términos de funciones elementales para el cálculo de los nodos de la cuadratura de Gauss-Hermite para tres valores distintos de n . Mostramos los 1000 primeros ceros para mayor claridad.

Como ejemplo, en la Figura 3.4 se muestra la precisión alcanzada para evaluar los polinomios de Hermite utilizando la expansión de estos polinomios en términos de funciones de Airy. En la figura se aprecia la pérdida de precisión alcanzada con el uso de la expansión para valores del argumento próximos al origen.

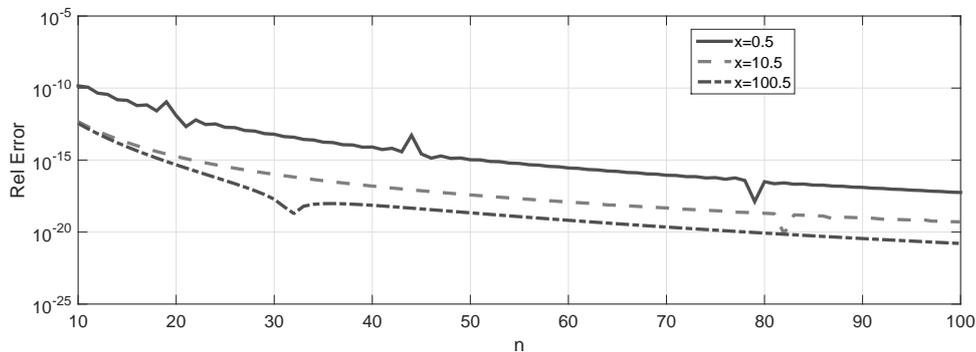


Figura 3.4: Variación, en función de n , de la precisión alcanzada con la expansión asintótica uniforme en términos de funciones de Airy del Apéndice A para el cálculo de los polinomios de Hermite $H_n(x)$ para tres valores distintos del argumento x . El error relativo se ha obtenido comparando con el valor obtenido con Maple con un número elevado de dígitos en el cálculo. En el cálculo de la expansión se han utilizado 7 coeficientes.

Por lo que respecta a la cuadratura de Gauss-Laguerre, la evaluación de los nodos utilizando las dos primeras aproximaciones asintóticas para este caso mencionadas anteriormente involucra el cálculo de los ceros de la función de Bessel $J_\alpha(x)$. Para esto, existen esquemas eficientes en la literatura (ver, por ejemplo, los métodos y ejemplos descritos en

el Capítulo 7 de [21] dedicado a la evaluación de ceros de funciones especiales). En nuestro algoritmo de test utilizaremos el mencionado en la referencia [19] basado únicamente en el uso de una fracción continua para las funciones de Bessel $J_\alpha(x)$ ¹. Un ejemplo de la precisión alcanzada con la primera de las aproximaciones para los nodos de la cuadratura de Gauss-Laguerre para $n = 900$ en términos de ceros de funciones de Bessel se muestra en la Figura 3.5. El valor del parámetro α se ha fijado a $1/3$. Se han utilizado 4 términos para la evaluación de la aproximación asintótica. Se puede apreciar que la aproximación funciona bien para los primeros nodos pero el error se degrada rápidamente. Esto es de esperar, ya que la aproximación asintótica para los polinomios de Laguerre a partir de la cual se ha derivado la expansión para los ceros es apropiada sólo cerca del origen [26]. Las dos expansiones restantes para la cuadratura de Gauss-Laguerre (otra en términos de funciones de Bessel y una tercera en términos de ceros de funciones de Airy) presentan, igualmente, un comportamiento en consonancia con lo descrito en [26]. En todos los casos su dominio de validez se restringe a valores pequeños del parámetro α .

Por último, respecto a la evaluación de los pesos para los casos de las cuadraturas de Gauss-Laguerre y Gauss-Jacobi utilizando las expansiones asintóticas del Apéndice A, éstas proporcionan, en general, una buena base para esquemas computacionales muy eficientes para la evaluación de los polinomios implicados para valores grandes del grado n aunque, como ya hemos comentado, su validez está limitada para valores pequeños de los parámetros adicionales de los que dependen los polinomios de Laguerre (ver por ejemplo [26]) y Jacobi. Un ejemplo de la precisión alcanzada para evaluar los polinomios de Jacobi utilizando la expansión para estos polinomios del Apéndice A se muestra en la Figura 3.6.

Observación 3.1 *Las pruebas preliminares de tiempos CPU de los algoritmos que hemos desarrollado muestran que el método iterativo en el que profundizaremos a continuación, es muy competitivo incluso para órdenes muy elevados de las cuadraturas en comparación con las aproximaciones asintóticas. En el caso de Hermite es de esperar, sin embargo, que el uso de las aproximaciones asintóticas mejoren la eficiencia del método iterativo en implementaciones optimizadas de las expansiones a partir de $n = 10000$. Esto no tiene por qué ser así en el caso de Laguerre ya que las aproximaciones van a depender del cálculo de los ceros de funciones de Bessel o de Airy (en el caso de los nodos) y del cálculo de las propias funciones de Bessel o de Airy (en el caso de los pesos). Además, el rango de validez de las expansiones descritas anteriormente y en el Apéndice A está restringido por el valor del parámetro α , siendo admisibles sólo valores pequeños del parámetro.*

¹El algoritmo para evaluación de ceros de la función de Bessel está disponible en <http://personales.unican.es/segura,jj/besselJZ.f.txt>

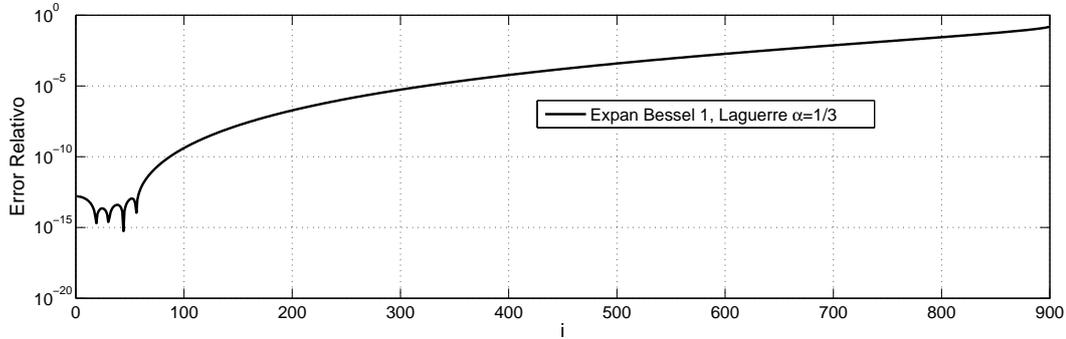


Figura 3.5: Variación, en función del número del nodo i , de la precisión alcanzada con la primera de las expansiones asintóticas en términos de ceros de funciones de Bessel para el cálculo de los nodos de la cuadratura de Gauss-Laguerre para $n = 900$ y $\alpha = 1/3$.

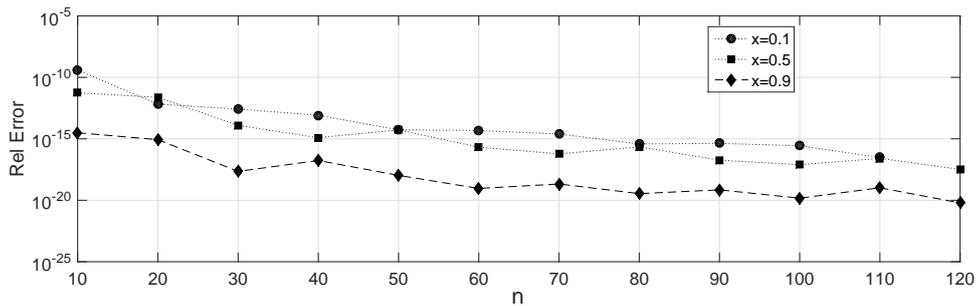


Figura 3.6: Variación, en función de n , de la precisión alcanzada con la expansión asintótica uniforme proporcionada en el Apéndice A para el cálculo del polinomio de Jacobi $P_n^{(1/3,1/4)}(x)$ para tres valores distintos del argumento x .

3.3. Métodos iterativos para el cálculo de cuadraturas gaussianas

Como ya se mencionó al principio del capítulo, se pueden utilizar métodos iterativos para hallar los nodos y los pesos de las cuadraturas gaussianas. El método más usado a este fin es el método de Newton. Sin embargo, para el caso de las soluciones de EDOs de segundo orden, como los polinomios ortogonales clásicos que hemos descrito, se pueden obtener métodos iterativos más específicos que son más eficaces que el caso genérico del método de Newton.

En particular, en [46] se propone un método iterativo válido, en particular, para los casos de los polinomios de Hermite, Laguerre y Jacobi y que presenta una serie de ventajas respecto al método de Newton. En primer lugar, tiene orden de convergencia cuatro, duplicando así el orden de convergencia habitual del método de Newton.

Otra ventaja de este método es su convergencia global que garantiza que el método converge independientemente del punto de partida de la iteración, al contrario que el método de Newton en el que la elección de un punto de partida condiciona su convergencia.

Por último, en ciertos casos el método mejora asintóticamente haciéndose exacto (proporciona la siguiente raíz exacta del proceso iterativo en un paso) a medida que el grado tiende a infinito. Este comportamiento asintótico depende de la elección adecuada de la variable de la función implicada en el proceso. Una elección de variable adecuada también afecta a la evaluación de los pesos de las cuadraturas, puesto que es más estable numéricamente cuanto más uniformemente distribuidos estén los nodos correspondientes.

A continuación vamos a describir de forma general el método propuesto en [46] para posteriormente adaptarlo a los casos de las cuadraturas de Gauss-Hermite, Gauss-Laguerre y Gauss-Jacobi, describiendo además cambios de variable adecuados para mejorar su efectividad.

3.3.1. Descripción general del método iterativo

El método descrito en [46] es un método iterativo de cuatro orden que permite calcular todos los ceros de cualquier solución de una EDO de segundo orden expresada en forma normal $y''(x) + A(x)y(x) = 0$ (es decir, el coeficiente asociado a la derivada primera es 0). Para aplicar el método, se requiere que $A(x)$ sea continua y se conozca su monotonía en el intervalo de aplicación de dicho método.

Este método se puede extender a cualquier EDO de segundo orden

$$w''(x) + b(x)w'(x) + a(x)w(x) = 0, \quad (3.44)$$

con $b(x)$ diferenciable puesto que se puede utilizar un cambio de función o un cambio de variable $z = z(x)$ para obtener una forma normal equivalente.

Este método se puede entender como una consecuencia del teorema de Sturm:

Teorema 3.2 Sean $y(x)$ y $v(x)$ soluciones de $y''(x) + A_y(x)y(x) = 0$ y $v''(x) + A_v(x)v(x) = 0$ respectivamente, con $A_v(x) > A_y(x)$. Si $y(x^{(0)})v'(x^{(0)}) - y'(x^{(0)})v(x^{(0)}) = 0$ y x_y y x_v son los ceros reales de $y(x)$ y $v(x)$ más próximos a $x^{(0)}$ y mayores (o menores) que $x^{(0)}$, entonces $x_v < x_y$ (o $x_v > x_y$).

Este teorema se puede probar de forma sencilla y se puede interpretar geoméricamente en el sentido de que la velocidad de oscilación de las soluciones de una EDO es mayor cuanto mayor es su coeficiente $A(x)$ (ver [23]).

El método que vamos a describir calcula los ceros de las soluciones de una EDO $y''(x) + A(x)y(x) = 0$ en orden creciente (decreciente) si $A(x)$ es decreciente (creciente) y positiva (si es negativa en algún intervalo, sólo hay un único cero de las soluciones en dicho intervalo). Dado un valor inicial $x^{(0)}$, el cero más cercano de $y(x)$ a $x^{(0)}$ se calcula de la siguiente forma.

Algoritmo 3.3 Sea $x^{(0)} < \alpha (> \alpha)$ con $y(\alpha) = 0$ y tal que entre $x^{(0)}$ y α no hay ceros de $y(x)$, supongamos que $A(x)$ es decreciente (creciente). Empezando por $x^{(0)}$ calcular la iteración $x^{(n+1)}$ a partir de $x^{(n)}$ calculando una solución no trivial de la ecuación $w''(x) + A(x^{(n)})w(x) = 0$ tal que $y(x^{(n)})w'(x^{(n)}) - y'(x^{(n)})w(x^{(n)}) = 0$. Tomar $x^{(n+1)}$ el cero de $w(x)$ más próximo a $x^{(n)}$ y mayor (menor) que $x^{(n)}$. Se tiene que la sucesión $\{x^{(n)}\}$ converge de forma de monótona a α .

Aplicando este algoritmo sucesivamente se pueden obtener sucesiones de ceros de las funciones implicadas.

Algoritmo 3.4 Sean α_1, α_2 raíces consecutivas de $y(x)$ con $\alpha_1 < \alpha_2$.

Si el coeficiente $A(x)$ es decreciente y α_1 conocido, se puede hallar α_2 usando el Algoritmo 3.3 tomando como valor inicial $x^{(0)} = \alpha_1$ (siendo la primera iteración $x^{(1)} = \alpha_1 + \pi/\sqrt{A(\alpha_1)}$).

Si el coeficiente $A(x)$ es creciente y α_2 conocido, se puede hallar α_1 usando el Algoritmo 3.3 tomando como valor inicial $x^{(0)} = \alpha_2$ (siendo la primera iteración $x^{(1)} = \alpha_2 - \pi/\sqrt{A(\alpha_2)}$).

El paso iterativo del Algoritmo 3.3 se puede escribir de forma explícita como:

$$T_j(x) = x - \frac{1}{\sqrt{A(x)}} \arctan_j(\sqrt{A(x)}h(x)), \quad (3.45)$$

con $h(x) = y(x)/y'(x)$, $j = \text{sign}(A'(x))$ y

$$\arctan_j(\zeta) = \begin{cases} \arctan(\zeta) & \text{si } j\zeta > 0, \\ \arctan(\zeta) + j\pi & \text{si } j\zeta \leq 0, \\ j\pi/2 & \text{si } \zeta = \pm\infty. \end{cases} \quad (3.46)$$

Observamos que estamos describiendo un método de punto fijo puesto que los únicos fijos de $T_j(x)$ son los ceros de $y(x)$. Recordamos que este método requiere solamente conocer la monotonía del coeficiente $A(x)$ en el intervalo de cálculo de los ceros donde $A(x)$ sea positivo. Sin embargo, aunque no sean necesarias estimaciones iniciales de las raíces, es conveniente disponer de cotas de los ceros extremos a fin de disponer de un criterio de parada más ajustado.

Notemos que de la propia construcción del método se puede observar que para $A(x)$ constante, el método es exacto. Por lo tanto, si para un determinado límite el coeficiente $A(x)$ tiende a un valor constante, tendremos que el método es asintóticamente exacto, como habíamos mencionado al inicio de esta sección.

3.3.2. Transformaciones de Liouville de las ecuaciones diferenciales

Los polinomios de Hermite, Laguerre y Jacobi satisfacen ecuaciones diferenciales de la forma (3.44) con $a(x)$ y $b(x)$ coeficientes racionales. Podemos utilizar transformaciones de Liouville para obtener una forma normal de dichas EDOs. Este análisis se detalla en [8] y [9].

De forma general, dada una función $w(x)$ que sea solución de (3.44) y un cambio de variable $z = z(x)$, se cumple que la función $y(z)$ tal que

$$y(z(x)) = \sqrt{z'(x)} \exp\left(\frac{1}{2} \int^x B(x)\right) w(x), \quad (3.47)$$

cumple la ecuación

$$\ddot{y}(z) + \Omega(z)y(z) = 0, \quad (3.48)$$

donde los puntos representan la derivada respecto de la variable z y

$$\Omega(z) = \dot{x}^2 \tilde{A}(x(z)) + \frac{1}{2} \{x, z\}, \quad \tilde{A}(x) = A - B'/2 - B^2/4, \quad (3.49)$$

donde $\{x, z\}$ es la derivada schwarziana de $x(z)$ con respecto a z . Como función de la variable x se puede escribir

$$\begin{aligned} \Omega(x) \equiv \Omega(z(x)) &= \frac{1}{z'(x)^2} (\tilde{A}(x) - \frac{1}{2} \{z, x\}) \\ &= \frac{1}{d(x)^2} \left(A(x) - \frac{B'(x)}{2} - \frac{B(x)^2}{4} + \frac{3d'(x)^2}{4d(x)^2} - \frac{d''(x)}{2d(x)} \right). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Vamos a describir a continuación los casos de los polinomios de Hermite, Laguerre y Jacobi, detallando cambios de variable útiles para aplicar al método iterativo que estamos estudiando.

Polinomios de Hermite

Dado $w(x) = H_n(x)$, se cumple la ecuación

$$w''(x) - 2xw'(x) + 2nw(x) = 0. \quad (3.51)$$

Sin utilizar cambio de variable, aplicamos la correspondiente transformación de Liouville $y(x) = e^{-x^2/2}H_n(x)$ para obtener la forma normal

$$y''(x) + (2n + 1 - x^2)y(x) = 0. \quad (3.52)$$

El coeficiente $A(x) = 2n + 1 - x^2$ es sencillo de analizar, por lo que no es necesario aplicar un cambio de variable. Además, cuando n tiende a infinito y x es pequeño, el coeficiente se vuelve constante, por lo que la velocidad de convergencia del método aumenta a medida que n crece. Como habíamos visto, esto quiere decir que el método es asintóticamente exacto.

Dado que los polinomios de Hermite son simétricos, basta hallar los ceros positivos del polinomio. Empezando por $x = 0$ calculamos los ceros del polinomio en orden creciente ($A(x)$ es decreciente) y por este motivo, no es necesario disponer de cotas de los ceros para establecer un criterio de parada. El método finaliza cuando se han calculado $\lfloor n/2 \rfloor$ raíces positivas.

Polinomios de Laguerre

Dado $w(x) = L_n^{(\alpha)}(x)$, se cumple la ecuación

$$w''(x) + \left(\frac{\alpha + 1}{x} - 1 \right) w'(x) + \frac{n}{x} w(x) = 0. \quad (3.53)$$

La transformación de Liouville sin cambio de variable

$$y(x) = x^{(\alpha+1)/2} e^{-x/2} w(x) \quad (3.54)$$

nos proporciona la ecuación en forma normal

$$y''(x) + A(x)y(x) = 0, \quad A(x) = \frac{1}{4} \left[-1 + \frac{2L}{x} + \frac{1 - \alpha^2}{x^2} \right], \quad (3.55)$$

donde $L = 2n + \alpha + 1$. El coeficiente es decreciente cuando $|\alpha| < 1$ y tiene un máximo en $(\alpha^2 - 1)/L$ si $\alpha > 1$.

Como se muestra en [9], los cambios de la forma $z(x) = \frac{1}{m}x^m$ para $m \neq 0$ y $z(x) = \log(x)$ dan transformaciones de Liouville que también generan formas normales de la EDO y cuyo coeficiente tiene un extremo (salvo para ciertos casos en que $m \in (0, 1/2)$). La ecuación diferencial resultante

$$\ddot{y}(z) + A(z)y(z) = 0 \quad (3.56)$$

tiene por coeficiente

$$A(x) \equiv A(z(x)) = \frac{1}{4}x^{-2m}(-x^2 + 2Lx + m^2 - \alpha^2), \quad (3.57)$$

donde el caso $m = 0$ se corresponde con el cambio $z(x) = \log(x)$. De entre todos los posibles valores de m , es interesante el caso $m = 1/2$ dado que el coeficiente $A(x)$ tiende a un comportamiento constante en la mayor parte de su intervalo de definición cuando n tiende a infinito, al igual que en el caso Hermite. Por lo tanto, para $m = 1/2$ utilizaremos la transformación de Liouville

$$y(z) = z^{\alpha+1/2}e^{-z^2/2}L_n^{(\alpha)}(z^2), \quad (3.58)$$

que proporciona la ecuación diferencial $\ddot{y}(z) + A(z)y(z) = 0$ con

$$A(x) = A(z(x)) = -x + 2L + \frac{\frac{1}{4} - \alpha^2}{x}, \quad (3.59)$$

que es decreciente para x positivo si $|\alpha| < 1/2$ y tiene un extremo en $x_e = \sqrt{\alpha^2 - 1/4}$ si $|\alpha| > 1/2$.

En este caso, es conveniente disponer de cotas para los ceros extremos para tener un buen criterio de parada del método. Si $|\alpha| < 1/2$, podemos empezar el proceso tomando z la raíz de la cota inferior de los ceros que aparece en [10][Ec. (1.2)]. Si $|\alpha| > 1/2$, empezamos el proceso iterativo en z_e el máximo de $A(z)$ y calculamos ceros en orden decreciente hasta rebasar la cota inferior de los ceros. Por último, volvemos a empezar desde z_e y calculamos los ceros en orden creciente hasta completar el cálculo de los n ceros del polinomio.

3.3.3. Comportamiento asintótico de los pesos

Para el caso de Hermite, el comportamiento asintótico de los pesos cuando n tiende a infinito nos da la aproximación

$$w_i \sim \frac{\pi}{\sqrt{2n}}e^{-x_i^2}, \quad (3.60)$$

la cual funciona bien para los ceros pequeños. Con esta estimación, y usando además que

$\sum_{i=1}^n w_i = \sqrt{\pi}$, tenemos que

$$\sum_{i=1}^n e^{-x_i^2} \sim \sqrt{\frac{2n}{\pi}}. \quad (3.61)$$

Si consideramos la solución $y(x) = e^{-x^2/2}H_n(x)$ de la forma normal (3.52) tenemos que

$$w_i = \frac{\sqrt{\pi}2^{n+1}n!}{[y'(x_i)]^2}e^{-x_i^2}. \quad (3.62)$$

Dado que para n grande el coeficiente de la EDO en forma normal es prácticamente constante en el intervalo de oscilación, tenemos que $|y'(x)|$ no varía mucho. Por lo que los nodos dependen del factor $e^{-x_i^2}$ como podíamos observar en (3.60). Podemos considerar los pesos escalados

$$\omega_i = \frac{\sqrt{\pi}2^{n+1}n!}{[y'(x_i)]^2}. \quad (3.63)$$

De forma equivalente, si consideramos la función $u(x) = (\sqrt{\pi}2^{n+1}n!)^{-1/2}e^{-x^2/2}H_n(x)$, que es solución de (3.52), los pesos escalados se pueden escribir

$$\omega_i = [u'(x_i)]^{-2}. \quad (3.64)$$

Esta normalización, evita posibles problemas de *underflow/overflow* en el cálculo de $u'(x_i)$ para todo n , dejando como única fuente de este tipo de problemas el factor $e^{-x_i^2}$.

En el caso de Laguerre, repetimos el análisis y, cuando n tiende a infinito tenemos la estimación de sus pesos

$$w_i \sim \pi \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!} n^{-\alpha - \frac{1}{2}} x_i^{\alpha + \frac{1}{2}} e^{-x_i} \sim \pi n^{-1/2} x_i^{\alpha + \frac{1}{2}} e^{-x_i}, \quad (3.65)$$

que funciona mejor para los ceros pequeños. A partir de esta estimación y dado que $\sum_{i=1}^n w_i = \Gamma(\alpha + 1)$ tenemos que

$$\sum_{i=1}^n x_i^{\alpha + 1/2} e^{-x_i} \sim \frac{\sqrt{n}}{\pi} \Gamma(\alpha + 1). \quad (3.66)$$

Considerando la función dada en (3.58) tenemos que

$$w_i = \frac{4\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!(\dot{y}(z_i))^2} x_i^{\alpha + 1/2} e^{-x_i}, \quad (3.67)$$

donde el punto significa derivada respecto de la variable $z = \sqrt{x}$.

Al igual que antes, el coeficiente de la EDO en forma normal que estamos considerando tiene un comportamiento constante cuando n tiende a infinito, razón por la cual $(\dot{y}(z_i))^2$ es prácticamente constante. Por lo tanto, la mayor dependencia de los pesos reside en

Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas

el factor $x_i^{\alpha+1/2}e^{-x_i}$ como sugería (3.65). Por esta razón, es conveniente tomar los pesos escalados

$$\omega_i = \frac{4\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!(y(z_i))^2}. \quad (3.68)$$

De forma equivalente, podemos considerar la función

$$u(z) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{n!}{\Gamma(n + \alpha + 1)}} z^{\alpha+1/2} e^{-z^2/2} L_n^{(\alpha)}(z^2), \quad (3.69)$$

que satisface la ecuación $\ddot{u}(z) + A(z)u(z) = 0$ con $A(z)$ dado en (3.59), $z = \sqrt{x}$ y los pesos escalados cumplen

$$\omega_i = |\dot{u}(z_i)|^{-2}. \quad (3.70)$$

Nuevamente, evitamos problemas de *underflow/overflow*, siendo la única posible fuente de este problema los factores $x_i^{\alpha+1/2}e^{-x_i}$.

A partir de la discusión sobre el comportamiento asintótico de los pesos de las cuadraturas y los esquemas numéricos de evaluación de los nodos de cuadratura, observamos que los primeros nodos calculados se corresponden con los pesos de mayor valor y que dichos nodos son calculados en la dirección decreciente de los pesos; esto es cierto en el caso de en que se toman transformaciones de Liouville para las que los métodos son asintóticamente exactos cuando $n \rightarrow \infty$.

En el caso de Hermite, hemos observado que los pesos decrecen de forma exponencial (3.60) a medida que se calculan los nodos y que dichos nodos son calculados en orden creciente. De igual modo, en el caso de Laguerre cualquiera de las fórmulas (3.65), (3.67) muestran que los pesos dependen, como función de los nodos, de un factor $g(x) = \sqrt{\pi}w(x)$, con $w(x) = x^\alpha e^{-x}$. Esto indica que los pesos más grandes son aquellos para los que el valor de x está próximo a x_m con $g'(x_m) = 0$, es decir, $x_m = \alpha + 1/2$ (es máximo si $\alpha > -1/2$); dicho valor está bastante próximo al punto inicial del método $x_e = \sqrt{\alpha^2 - 1/4}$ para $|\alpha| > 1/2$. De este modo, a medida que nos alejamos del valor $x_e = \sqrt{\alpha^2 - 1/4}$, el valor de los pesos decrece.

Así, los métodos que hemos propuesto son naturales en dos sentidos: en primer lugar, porque son asintóticamente exactos cuando $n \rightarrow \infty$; en segundo lugar, porque los nodos son calculados en la dirección decreciente del valor de los pesos. Esta propiedad permite fijar el grado de significancia de los nodos y pesos a calcular, y se puede elegir calcular sólo los nodos y pesos tales que los pesos cumplan $w_i/\text{text}_j w_j < \epsilon$ para un determinado $0 < \epsilon < 1$. Esto también es importante en términos de estabilidad, dado que los nodos y los pesos se calculan en orden de significancia.

Además, los pesos escalados definidos en (3.64) y (3.70) no dependen del valor del nodo. Si tomamos, por ejemplo, el caso (3.64) (el análisis es el mismo para el otro caso),

tenemos que la función del peso escalado $\tilde{W}(x) = u'(x)^{-2}$ cumple que $\tilde{W}'(x_i) = 0$ para todo nodo x_i , dado que $u''(x_i) = 0$ si $u(x_i) = 0$ (puesto que $u(x)$ satisface una EDO de segundo orden en forma normal (3.52)). Esto es favorable en términos de estabilidad del cálculo de los pesos escalados, como se explica en [59]. Para el cálculo de pesos no escalados, una fuente adicional de error es el factor añadido dependiente de x_i ($e^{-x_i^2}$ en el caso de Hermite), que es creciente mientras que los pesos decrecen; se espera entonces, que la pérdida de precisión sea más importante para los pesos menos significativos.

3.3.4. Algoritmo para calcular la cuadratura de Gauss-Hermite

Los polinomios de Hermite poseen la ventaja de no tener singularidades en la ecuación diferencial que los define. Esto permite calcular cuadraturas de Gauss-Hermite utilizando series de Taylor locales para evaluar los polinomios asociados. De hecho, en este caso las series de Taylor funcionan muy bien porque se aplican en la misma dirección que el método iterativo, empezando en $x = 0$ y calculando ceros en orden creciente.

Los sucesivos valores de los polinomios de Hermite, o de sus versiones escaladas, y sus derivadas pueden calcularse mediante expansiones de Taylor

$$y(x+h) = \sum_{i=0}^N \frac{y^{(i)}(x)}{i!} h^i, \quad y'(x+h) = \sum_{i=0}^N \frac{y^{(i+1)}(x)}{i!} h^i, \quad (3.71)$$

donde h es menor que la distancia entre ceros consecutivos. Las derivadas sucesivas de los polinomios se pueden calcular usando la relación de recurrencia

$$y^{(k+2)}(x) + (2n+1-x^2)y^{(k)}(x) - 2kxy^{(k-1)}(x) - k(k-1)y^{(k-2)}(x) = 0. \quad (3.72)$$

obtenida derivando de forma sucesiva la EDO descrita en (3.52). Podemos tomar como punto de partida $x = 0$ teniendo en cuenta que

1. Si n es par, $H_n(0) = (-2)^{n/2}(n-1)!!$, $H'_n(0) = 0$.
2. Si n es impar, $H_n(0) = 0$, $H'_n(0) = -(-2)^{(n+1)/2}n!!$.

Un análisis del condicionamiento de las soluciones de la relación de recurrencia (3.72) mediante el teorema de Perron-Kreuser no permitir determinar la presencia de soluciones recesivas, pero indica que todas las soluciones cumplen $\limsup_{k \rightarrow +\infty} (|y^{(k)}|/(k!)^{2/3})^{1/k} = 1$. Esto indica que el radio de convergencia de las series de Taylor es infinito, como podíamos esperar de la ausencia de singularidades en la EDO que define los polinomios de Hermite. Por otro lado, dado que todas las soluciones de la recurrencia tienen este comportamiento, se deduce que ninguna de ellas va a ser exponencialmente mayor que el resto cuando n

tienda a infinito. Aunque este argumento no garantice la estabilidad del cálculo directo de la recurrencia, sí sugiere que el cálculo puede ser estable, como se observa de forma experimental.

Ahora podemos aplicar el Algoritmo 3.4 empezando por $x = 0$. Cada nodo x_{j+1} se calcula tomando $x^{(0)} = x_j$ y considerando la sucesión creciente $x^{(k+1)} = T_{-1}(x^{(k)})$ que converge a x_{j+1} . En cada paso, para calcular $T_{-1}(x^{(k)})$ necesitamos hallar $y_n(x^{(k)})$ y $y'_n(x^{(k)})$, que se pueden calcular usando series de Taylor centradas en $x^{(k-1)}$ con $h = x^{(k)} - x^{(k-1)}$. El primer paso es

$$x^{(1)} = T_{-1}(0) = \begin{cases} \frac{\pi}{\sqrt{2n+1}}, \\ \frac{\pi}{2\sqrt{2n+1}}. \end{cases} \quad (3.73)$$

También es posible tomar una normalización arbitraria inicial y reescalar los resultados al final del proceso, como hemos hecho en nuestro algoritmo. Partiendo así de

1. $\bar{y}(0) = 1, \bar{y}'(0) = 0$ si n es par.
2. $\bar{y}(0) = 0, \bar{y}'(0) = 1$ si n es impar.

evitamos manipular funciones gamma en el proceso. Con respecto a los pesos, durante el proceso obtenemos a partir de series de Taylor los sucesivos valores de $\bar{y}'(x_j)$ y tenemos que los pesos ω_j asociados a la función $y(x)$ están relacionados con los pesos $\bar{\omega}_j$ asociados a $\bar{y}(x)$ por la relación $\bar{\omega}_i = C\omega_i$, donde C es una constante que puede determinarse calculando uno de los momentos de la cuadratura.

Por ejemplo, dados $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots$ los nodos positivos y w_1, w_2, \dots sus pesos correspondientes, tenemos

$$\mu_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\pi} = 2 \sum_{j=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} w_j \alpha_j^2. \quad (3.74)$$

De los valores $\bar{\omega}_i$ obtenidos, podemos calcular $\bar{w}_i = \bar{\omega}_i e^{-\alpha_i^2}$ y obtenemos

$$\bar{\mu}_1 = 2 \sum_{j=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} \bar{w}_j \alpha_j^2 = C\mu_1 = C\sqrt{\pi}, \quad (3.75)$$

de donde podemos despejar C , permitiendo así obtener los pesos $w_i = \bar{w}_i/C$. Notemos que basta tomar unos pocos términos en el sumatorio dado el decaimiento exponencial de los pesos.

Resultados numéricos

El algoritmo obtenido para calcular la cuadratura de Gauss-Hermite es simple dado que sólo se requiere aplicar el método de punto fijo que hemos descrito, expansiones de Taylor truncadas y la normalización (3.74). Al contrario que otros algoritmos propuestos como [27, 56], el método que proponemos no tiene pérdida de precisión en la evaluación de los nodos y se alcanza precisión completa. En la Figura 3.7 se calcula el máximo error relativo cometido en el cálculo de los nodos para polinomios de Hermite de orden menor que 10^5 . El error se calcula comparando los nodos obtenidos mediante un cálculo de doble precisión (programado en Fortran) frente al mismo proceso en cuádruple precisión.

En cuanto a los pesos, la pérdida de precisión es moderada como se observa en la Figura 3.8. Sin embargo, los errores más grandes se corresponden con los pesos asociados a los ceros mayores, es decir, son los pesos menos significativos. Por lo tanto, si sólo calculamos los pesos mayores que un cierto valor fijo (por ejemplo 10^{-30}) podemos reducir el error como se observa en la Figura 3.8. Para calcular los pesos no escalados, tenemos que multiplicar por un factor exponencial, que añade un error adicional, como vemos en la Figura 3.9.

Comparado con el algoritmo propuesto en [27], el que proponemos tiene una serie de ventajas. En primer lugar, en [27] se utiliza el método de Runge-Kutta para obtener aproximaciones iniciales de los ceros que posteriormente se refinan utilizando el método de Newton. En nuestro caso, en cada paso del método se genera automáticamente una aproximación inicial para poder calcular el siguiente cero y estas son más precisas cuanto mayor es el orden de la cuadratura.

En segundo lugar, ya habíamos mencionado que el orden de convergencia del método es 4. Esto permite reducir el número de iteraciones en cada paso del método haciendo una simple observación: si por ejemplo queremos calcular un nodo con precisión 10^{-16} , es suficiente establecer un criterio de parada del tipo $|1 - x^{(k+1)}/x^{(k)}| < 10^{-5}$, puesto que un orden de convergencia 4 implica que la siguiente iteración comete un error de aproximación del orden de 10^{-20} . Aplicando este criterio, podemos observar que sólo son necesarias 1 o 2 iteraciones por raíz para $n = 100$ y solamente una para $n > 1000$. Para órdenes menores que 100 a veces es necesario hacer 3 iteraciones.

En la Figura 3.10 podemos ver los tiempos de CPU empleados en calcular cuadraturas de Gauss-Hermite para orden menor que 1000. El tiempo se divide por n para representar el tiempo empleado en calcular un nodo y su correspondiente peso. Podemos observar que la gráfica se acerca a una determinada asíntota, como se podía esperar del proceso, puesto que a medida que el orden de la cuadratura aumenta, el proceso iterativo tiende a volverse exacto.

Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas

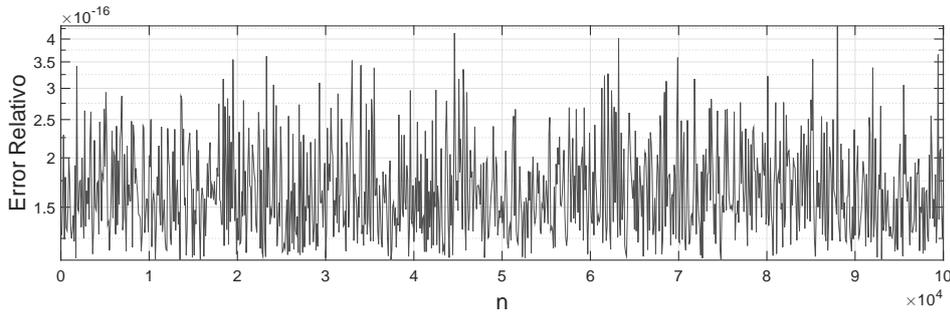


Figura 3.7: Error relativo del cálculo de los nodos de la cuadratura de Gauss-Hermite de orden n . Para cada n , se representa el valor máx $|1 - x_i^{(d)}/x_i^{(q)}|$, donde $x_i^{(d)}$ son los nodos calculados en doble precisión y $x_i^{(q)}$ son los nodos calculados en cuádruple precisión (el cero trivial $x = 0$ se excluye para grado impar).

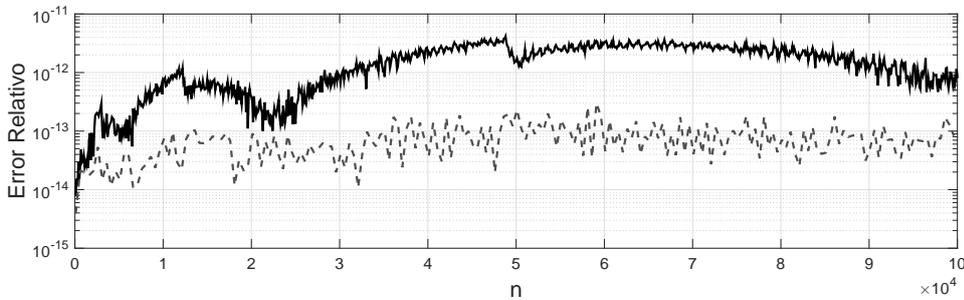


Figura 3.8: Error relativo del cálculo de los pesos de la cuadratura de Gauss-Hermite de orden n . La línea continua representa los valores máx $|1 - \omega_i^{(d)}/\omega_i^{(q)}|$, donde $\omega_i^{(d)}$ son los pesos escalados calculados en doble precisión y $\omega_i^{(q)}$ son los pesos escalados calculados en cuádruple precisión. La línea discontinua es similar, pero el error máximo se calcula sólo para los nodos para los que los pesos no escalados w_i son mayores que 10^{-30} .

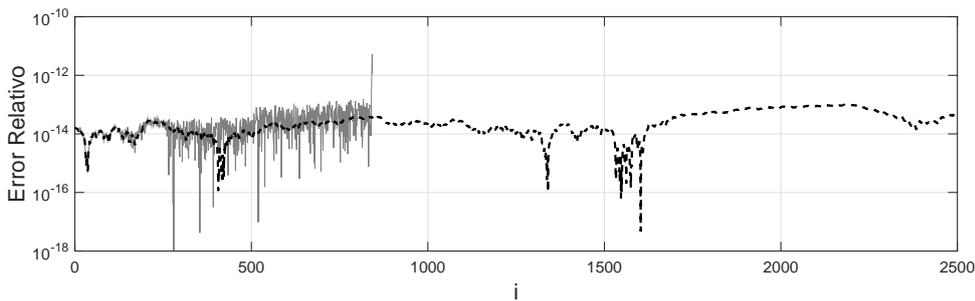


Figura 3.9: Error relativo en el cálculo de los pesos para una cuadratura de Gauss-Hermite de 5000 nodos como función de i , con i numerando los nodos en orden creciente. La línea discontinua se corresponde con el error asociado a los pesos escalados y la línea continua se corresponde con el error de los pesos no escalados.

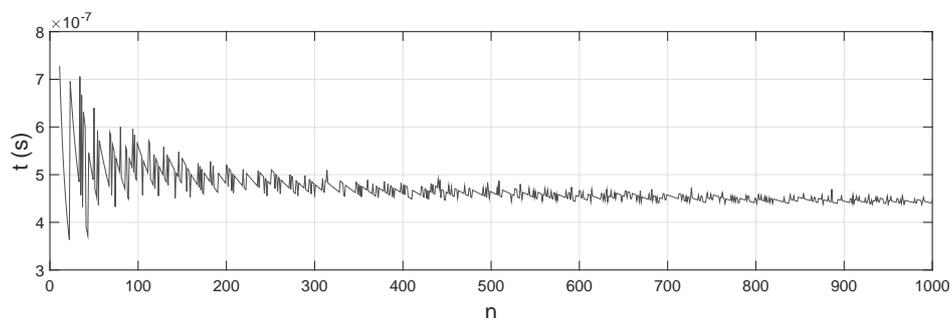


Figura 3.10: Tiempo de CPU unitario utilizado para calcular cuadraturas de Gauss-Hermite como función de n , con n el orden de la cuadratura.

3.3.5. Algoritmo para calcular la cuadratura de Gauss-Laguerre

En esta sección vamos a describir algoritmos correspondientes a la transformación de Liouville con cambio de variable $z = \sqrt{x}$ de la ecuación que define los polinomios de Laguerre. Procediendo del mismo modo que en el caso de Hermite, podríamos describir un algoritmo que utilice el método iterativo y series de Taylor para calcular cuadraturas de Gauss-Laguerre, sin embargo existen algunas diferencias importante.

En primer lugar, dado que la ecuación diferencial asociada posee una singularidad en $x = 0$, no podemos basar el cálculo de los polinomios de Laguerre solamente en el uso de series de Taylor. Por otro lado, como hemos visto en secciones anteriores, hay que considerar dos casos según sea $|\alpha| > 1/2$ o no.

Usaremos series de Taylor como principal método para hallar los valores de la función $y(x)$ de (3.58), o una adecuada versión escalada para evitar problemas de *underflow/overflow*. Sin embargo, dada la singularidad que hemos mencionado antes, no siempre es posible usar series de Taylor de forma estable.

En su lugar, usaremos una combinación de relaciones de recurrencia y una fracción continua para calcular cocientes de polinomios de Laguerre, en lugar de los polinomios directamente. Este método alternativo es necesario para calcular el primer nodo y algunos adicionales si α es pequeño (pero no más de dos). Es decir, proponemos calcular el primer nodo con el método alternativo propuesto y calcular los siguientes utilizando series de Taylor sobre este primer valor obtenido.

En caso de necesitar calcular más de un nodo mediante el método alternativo, habrá que utilizar series de Taylor posteriormente para asegurar que todos los nodos y pesos estén normalizados de la misma manera.

Vamos a describir a continuación cada uno de los métodos involucrados en el algoritmo del caso de Gauss-Laguerre.

Relaciones de recurrencia

Dada la relación de recurrencia de la forma (3.8) cumplida por los polinomios de Laguerre, la expresamos en términos de cocientes de polinomios $R_k(x) = L_{k+1}^{(\alpha)}(x)/L_k^{(\alpha)}(x)$, con $R_0(x) = \alpha + 1 - x$ y

$$R_k(x) = \frac{1}{k+1} \left[(2k + \alpha + 1 - x) - \frac{k + \alpha}{R_{k-1}(x)} \right].$$

Usando ahora la relación $xL_n^{(\alpha)'}(x) = nL_n^{(\alpha-1)}(x) - (n + \alpha)L_n^{(\alpha)}(x)$ y la definición (3.69), tenemos

$$\frac{\dot{u}(z)}{u(z)} = \frac{2n + \alpha + 1/2}{z} - z - \frac{2(n + \alpha)}{zR_{n-1}(z^2)}. \quad (3.76)$$

Esta relación de recurrencia no está mal condicionada. Sin embargo, no debe utilizarse para grados altos dado que no es eficiente y existe cierta degradación de la solución cuando se consideran grados altos. La usamos para $n < 80$.

Fracción continua

Considerando la relación entre los polinomios de Laguerre y la función de Kummer

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{(\alpha + 1)_n}{n!} M(-n, \alpha + 1, x) \quad (3.77)$$

y dado que la función de Kummer cumple una relación de recurrencia sobre términos consecutivos en α para la que M es la solución recesiva de dicha recurrencia (ver [48]), deducimos que $L_n^{(\alpha)}(x)$ es recesiva respecto a la relación de recurrencia cuando α tiende a infinito. Por lo que $L_n^{(\alpha)}(x)$ es la solución recesiva de

$$\begin{aligned} L_n^{(\alpha+1)}(x) + b_\alpha L_n^{(\alpha)}(x) - a_\alpha L_n^{(\alpha-1)}(x) &= 0, \\ b_\alpha &= -(1 + \alpha/x), \quad a_\alpha = -(n + \alpha)/x \end{aligned} \quad (3.78)$$

cuando α tiende a infinito. En términos de cocientes $r^{(\alpha)} = L_n^{(\alpha)}(x)/L_n^{(\alpha-1)}(x)$ tenemos

$$r^{(\alpha)} = \frac{a_\alpha}{b_\alpha + r^{(\alpha+1)}}, \quad (3.79)$$

y el teorema de Pincherle garantiza que la fracción continua resultante de iterar (3.79) es convergente y que converge a $L_n^{(\alpha)}(x)/L_n^{(\alpha-1)}(x)$, luego

$$r^{(\alpha)}(x) = \frac{L_n^{(\alpha)}(x)}{L_n^{(\alpha-1)}(x)} = \frac{a_\alpha}{b_\alpha + \frac{a_{\alpha+1}}{b_{\alpha+1} + \dots}} \quad (3.80)$$

y usando la relación $xL_n^{(\alpha)'}(x) = nL_n^{(\alpha-1)}(x) - (n+\alpha)L_n^{(\alpha)}(x)$ y la definición (3.69), tenemos

$$\frac{\dot{u}(z)}{u(z)} = \frac{1/2 - \alpha}{z} - z + \frac{2(n+\alpha)}{zr^{(\alpha)}(z^2)}. \quad (3.81)$$

Cálculo de series de Taylor

La función $u(z)$ (ver (3.59)) cumple

$$P(z)u^{(2)}(z) + Q(z)u(z) = 0 \quad (3.82)$$

con

$$P(z) = z^2, \quad Q(z) = -z^4 + 2Lz^2 + \frac{1}{4} - \alpha^2. \quad (3.83)$$

Tomando derivadas sucesivas y teniendo en cuenta que $P^{(n)}(z) = 0$, $n > 2$ y $Q^{(n)}(z) = 0$, $n > 4$, obtenemos la siguiente relación de recurrencia para las derivadas respecto de z :

$$\sum_{m=0}^2 \binom{j}{m} P^{(m)} u^{(j+2-m)} + \sum_{m=0}^4 \binom{j}{m} Q^{(m)} u^{(j-m)} = 0. \quad (3.84)$$

Esta ecuación es una relación de recurrencia a siete términos y, aplicando el teorema de Perron-Kreuser, tenemos que las soluciones de esta recurrencia están en dos subespacios: un subespacio de soluciones de dimensión dos que cumplen

$$\limsup_{n \rightarrow +\infty} |u^{(n)}/n!|^{1/n} = |1/x|,$$

y otro subespacio de soluciones de dimensión cuatro que cumplen

$$\limsup_{n \rightarrow +\infty} |u^{(n)}/\sqrt{n!}|^{1/n} = 1.$$

Las soluciones del primer subespacio son dominantes sobre las del segundo. Este subespacio de soluciones dominantes se corresponde con las derivadas de las soluciones de (3.82) y las funciones que contiene poseen expansiones en series de Taylor centradas en x de radio $R = |x|$. La dominancia de estas soluciones garantiza que el cálculo de las derivadas en la dirección creciente de la recurrencia está bien condicionado.

Cálculo de los nodos de la cuadratura

Como ya hemos mencionado anteriormente, al considerar el cambio de variable $z = \sqrt{x}$, es necesario distinguir entre los casos $|\alpha| \leq 1/2$ y $|\alpha| > 1/2$.

Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas

Para el caso $|\alpha| \leq 1/2$, dado que el coeficiente (3.59) es decreciente para x positivo, podemos empezar el proceso en $z = z_l = \sqrt{x_l}$ donde x_l es una cota inferior de los ceros, y calculamos todos los ceros en orden creciente hasta alcanzar n ceros calculados.

Para el caso $|\alpha| > 1/2$, empezamos en $z_e = (\alpha^2 - 1/4)^{1/4}$ y calculamos los ceros mayores que z_e en orden creciente hasta alcanzar la cota superior dada en [10]. Por último, calculamos el resto de ceros en orden decreciente empezando nuevamente desde z_e . Las cotas para los ceros de los polinomios de Laguerre dadas en [10] se pueden escribir de la forma

$$x_u = \frac{2n^2 + n(\alpha - 1) + 2(\alpha + 1) + 2(n - 1)\sqrt{n^2 + (n + 2)(\alpha + 1)}}{n + 2}, \quad (3.85)$$

$$x_l = P/x_u, \quad P = \frac{(\alpha + 1)(n(\alpha + 5) + 2(\alpha - 1))}{n + 2}.$$

Observamos que $A(x)$ es positiva en el intervalo (x_1, x_2) donde $x_1 = (\alpha^2 - 1/4)/x_2$ y $x_2 = L + \sqrt{L^2 - \alpha^2 + 1/4}$. Si $\alpha > -7/8$ tenemos que $(x_l, x_u) \subset (x_1, x_2)$ y por tanto $A(x)$ es positiva en un intervalo que contiene a todos los nodos. Sin embargo, cuando $\alpha < -7/8$ se puede ver que el cero más pequeño está en una región tal que $A(x) < 0$ y sólo el cero más pequeño, dado que sólo puede haber un cero en el intervalo $(0, x_1]$ donde el coeficiente $A(x)$ es negativo. En [46] se especifica una modificación del método iterativo descrito para obtener convergencia de orden cuatro a un nodo que esté en una región donde $A(x) < 0$. En nuestro caso, en lugar de usar el paso iterativo habitual para $A(x) > 0$

$$T_{\pm 1}(z) = z - \frac{1}{\sqrt{-A(z)}} \arctan_{\pm 1} \left(\sqrt{-A(z)} h(z) \right) \quad (3.86)$$

calculamos $z^{(n+1)} = T(z^{(n)})$ donde

$$T(z) = z - \frac{1}{\sqrt{-A(z)}} \operatorname{atanh} \left(\sqrt{-A(z)} h(z) \right), \quad h(z) = y(z)/\dot{y}(z). \quad (3.87)$$

Con respecto a la evaluación de polinomios de Laguerre (o funciones relacionadas), también distinguimos dos casos. Si $|\alpha| > 1/2$ y n suficientemente grande, el número de ceros menores que z_e es del orden de $\mathcal{O}(\sqrt{n})$. En este caso, se puede usar series de Taylor para evaluar los polinomios de Laguerre salvo para hallar su valor en el punto de partida z_e . No existe peligro de exceder el radio de convergencia de las series.

Sin embargo, para $|\alpha| \leq 1/2$ la situación es diferente. Cuando $|\alpha| \leq 1/2$, dado que $z = 0$ es cero de $y(z)$, si consideramos $z_1 < z_2$ los dos ceros más pequeños positivos, se cumple $z_1 - 0 < z_2 - z_1$. Esto indica que z_2 no está en la zona de convergencia de las series de Taylor centradas en z_1 , con lo que no podemos usarlas para iterar desde z_1 hasta

z_2 . En este caso, necesitamos la relación de recurrencia o la fracción continua para hallar ambos. Este mismo caso se da cuando α es moderadamente grande y n pequeño.

En la práctica, cuando $\alpha \geq 2$ usamos una sola vez la fracción continua o la relación de recurrencia, mientras que para $-1 < \alpha < 2$, aunque no siempre sea necesario, usamos dos veces este tipo de métodos para evaluar los dos primeros nodos mayores que z_e .

Cálculo de los pesos de la cuadratura

Dependiendo del número de nodos calculados usando la fracción continua o la recurrencia aplicamos un método diferente para hallar los pesos de la cuadratura.

- Para una sola evaluación de la fracción continua, tenemos el caso más simple en el cual podemos calcular todos los nodos mayores que z_e usando series de Taylor y sus correspondientes pesos.

Comenzamos tomando $z = z_e$ calculando $h = u/\dot{u}$ con fracción continua o recurrencia. A continuación, tomamos como valores iniciales $\bar{u}(z_e) = h(z_e)$ y $\dot{\bar{u}}(z_e) = 1$, donde \bar{u} es una solución de la EDO proporcional a $u(z)$, y hacemos el resto de pasos del proceso iterativo usando series de Taylor.

Dado que durante el cálculo de los nodos z_i también obtenemos aproximaciones numéricas de $\dot{\bar{u}}(z_i)$, podemos calcular los pesos escalados ω_i en (3.70) ya que para un cierto factor γ

$$|\dot{\bar{u}}(z_i)|^{-2} = \gamma |\dot{u}(z_i)|^{-2} = \omega_i. \quad (3.88)$$

Este factor γ se puede determinar con el primer momento de la cuadratura, es decir,

$$\mu_0 = \sum_{j=0}^n w_j = \int_0^{+\infty} x^\alpha e^{-x} dx = \Gamma(\alpha + 1), \quad (3.89)$$

donde

$$w_i = \omega_i x_i^{\alpha+1/2} e^{-x_i}, \quad x_i = \sqrt{z_i}, \quad (3.90)$$

según (3.67) y (3.68).

La normalización (3.89) puede causar problemas de *overflow* si el parámetro α es elevado. Por este motivo, es preferible calcular los pesos \hat{w}_i normalizados a uno, es decir, $\sum_{i=1}^n \hat{w}_i = 1$ o, de forma equivalente, tomamos $\hat{w}_i = w_i/\Gamma(\alpha + 1)$ con pesos escalados $\hat{\omega}_i = \omega_i/\Gamma(\alpha + 1)$.

- Cuando se requiere más de una evaluación de la fracción continua o de la recurrencia, que ya hemos mencionado antes que se corresponde con el caso en que $-1 < \alpha < 2$, lo

hacemos sobre los dos primeros nodos mayores que z_e . Sean estos nodos z_k y z_{k+1} , tras calcular z_{k+1} , el resto de nodos se pueden calcular usando series de Taylor, usando como valores iniciales $\bar{u}(z_{k+1}) = 0$ y $\dot{\bar{u}}(z_{k+1}) = 1$. Así, para todos los nodos z_j con $j \geq k + 1$, la normalización de los pesos escalados \bar{w}_j es consistente, porque hemos usado series de Taylor para hallarlos. El peso \bar{w}_k no es consistente con dicha normalización, pero se puede corregir usando series de Taylor centradas en z_{k+1} para hallar $\dot{\bar{u}}(z_k)$. Tras este paso, podemos hallar $\bar{u}(z_e)$ y $\dot{\bar{u}}(z_e)$ usando series de Taylor centradas en x_k y continuar el proceso para hallar los nodos menores que z_e . El proceso para calcular pesos es similar al que hemos descrito en el punto anterior.

- Cuando α es negativo y muy cercano a -1, no es conveniente usar series de Taylor para hallar el primer nodo y su correspondiente peso porque dicho nodo está muy cerca de $x = 0$. En este caso, el primer peso se puede calcular de forma estable usando los dos primeros momentos de la cuadratura.

Primero calculamos los pesos escalados \bar{w}_i y los pesos no escalados w_i para $i > 1$ como hemos descrito anteriormente. Ahora, dado que $\mu_0 = \sum_{j=1}^n w_j = \Gamma(\alpha + 1)$ y $\mu_1 = \sum_{j=1}^n x_j w_j = \Gamma(\alpha + 2)$, tenemos

$$\begin{aligned} \hat{w}_1 + \lambda S_0 &= 1, \\ x_1 \hat{w}_1 + \lambda S_1 &= \alpha + 1, \end{aligned} \quad (3.91)$$

donde

$$S_0 = \sum_{j=2}^n \bar{w}_j, \quad S_1 = \sum_{j=2}^n x_j \bar{w}_j. \quad (3.92)$$

De aquí, podemos obtener

$$\begin{aligned} \hat{w}_1 &= \frac{S_1 - (\alpha + 1)S_0}{S_1 - x_1 S_0}, \\ \hat{w}_j &= \lambda \bar{w}_j, \quad j \geq 2; \quad \lambda = \frac{\alpha + 1 - x_1}{S_1 - x_1 S_0}. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Dado que $|\alpha|$ es pequeño, no existen problemas de *overflow* para hallar w_1 .

Resultados numéricos

Hemos implementado nuestro algoritmo para calcular cuadraturas de Gauss-Laguerre en una rutina Fortran de doble precisión y la hemos comparado con una misma versión en precisión cuádruple. Además, también hemos comparado el algoritmo con una implementación de nuestro algoritmo en Maple.

Al contrario que en el caso de Hermite, existe una pérdida de precisión en el cálculo de los nodos y, nuevamente, observamos una pérdida de precisión moderada en el cálculo de los pesos. El origen del error está en el uso de la fracción continua o la recurrencia para obtener una aproximación inicial, el cual se propaga al aplicar series de Taylor. Sin embargo, dado que el algoritmo calcula los pesos en orden decreciente y el error es menor para los pesos asociados a los primeros nodos calculados, podemos reducir el error de igual forma que hicimos en el caso de Hermite. En la Figura 3.11 mostramos el comportamiento decreciente de los pesos no escalados \hat{w}_i , observando como era de esperar, que el valor más alto se alcanza cerca del punto inicial $x_e = \sqrt{\alpha^2 - 1/4}$.

Por otro lado, la variación de los pesos escalados $\hat{\omega}_i$ es menos abrupta y llega a ser aproximadamente constante para n grande. En la Figura 3.12 se muestra dicho comportamiento y podemos observar también que la dependencia del parámetro α es apenas perceptible.

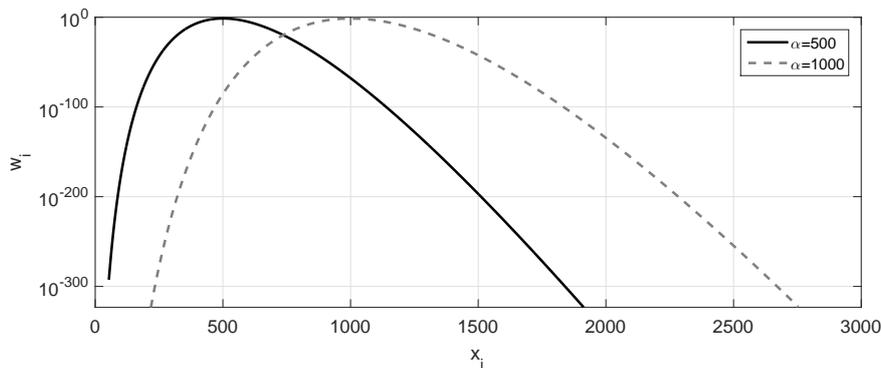


Figura 3.11: Pesos no escalados \hat{w}_i como función de los nodos x_i de la cuadratura de Gauss-Laguerre de orden $n = 1000$ y de parámetros $\alpha = 500$ y $\alpha = 1000$.

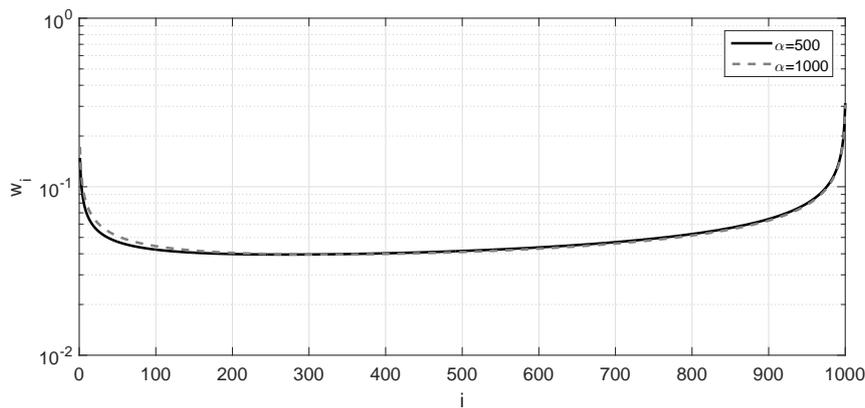


Figura 3.12: Pesos escalados $\hat{\omega}_i$ como función del número de nodo i de la cuadratura de Gauss-Laguerre de orden $n = 1000$ y de parámetros $\alpha = 500$ y $\alpha = 1000$.

Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas

Como hemos comentado, el error tanto en el cálculo de los nodos como en el de los pesos es mayor cuando más nos alejamos de x_e . En la Figura 3.13 se muestra el error relativo máximo al calcular los nodos en función del número del orden n de la cuadratura. Nuevamente, dado el rápido decaimiento del valor de los pesos a medida que calculamos nodos mayores, hemos considerado calcular el error relativo cometido al calcular todos los pesos no escalados \bar{w}_i y, por otro lado, calcular el error relativo cometido al considerar únicamente aquellos pesos mayores que 10^{-30} .

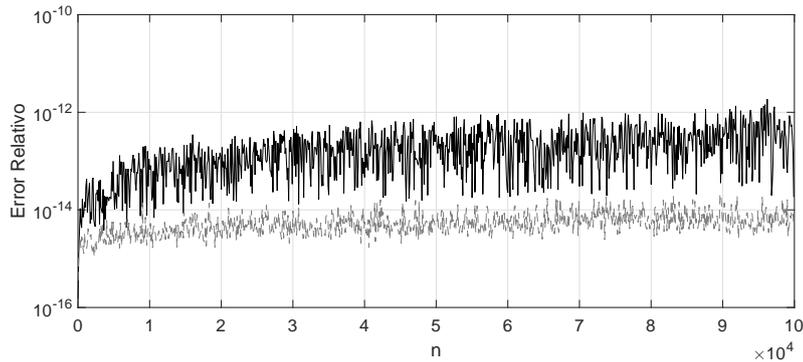


Figura 3.13: Máximo error relativo cometido al calcular los nodos de la cuadratura de Gauss-Laguerre de orden n con $\alpha = 0$. La línea continua representa los valores máx $|1 - x_i^{(d)}/x_i^{(q)}|$, donde $x_i^{(d)}$ son los nodos calculados en doble precisión y $x_i^{(q)}$ son los mismos nodos calculados en precisión cuádruple. También se muestra el máximo error relativo cometido al evaluar sólo los nodos correspondientes a pesos no escalados w_i mayores que 10^{-30} .

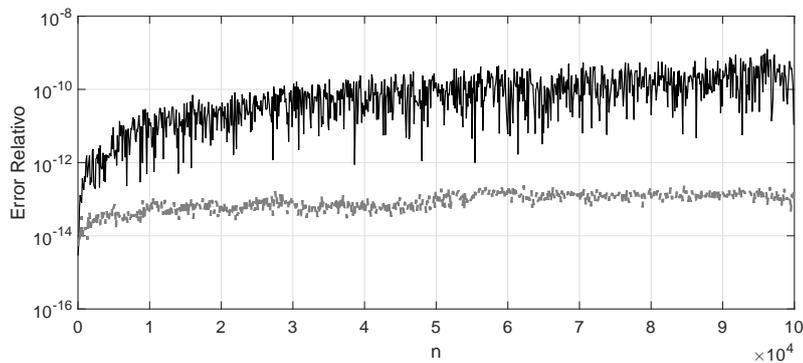


Figura 3.14: Máximo error relativo cometido al calcular los pesos no escalados de la cuadratura de Gauss-Laguerre de orden n con $\alpha = 0$. La línea continua representa los valores máx $|1 - \hat{w}_i^{(d)}/\hat{w}_i^{(q)}|$, donde $\hat{w}_i^{(d)}$ son los pesos calculados en doble precisión y $\hat{w}_i^{(q)}$ son los mismos pesos calculados en precisión cuádruple. También se muestra el máximo error relativo cometido al evaluar sólo con los nodos para los cuales los pesos no escalados w_i son mayores que 10^{-30} .

Aunque mostramos los resultados para el caso $\alpha = 0$, la situación es similar para otros valores de α . En la Figura 3.14 mostramos resultados análogos para el caso de los pesos no escalados $\hat{\omega}_i$.

En la Figura 3.15 se muestra los tiempos de computación unitarios en función de n al calcular cuadraturas de Gauss-Laguerre de orden n . Observamos que el algoritmo es muy eficiente, aunque no tanto como en el caso de Hermite.

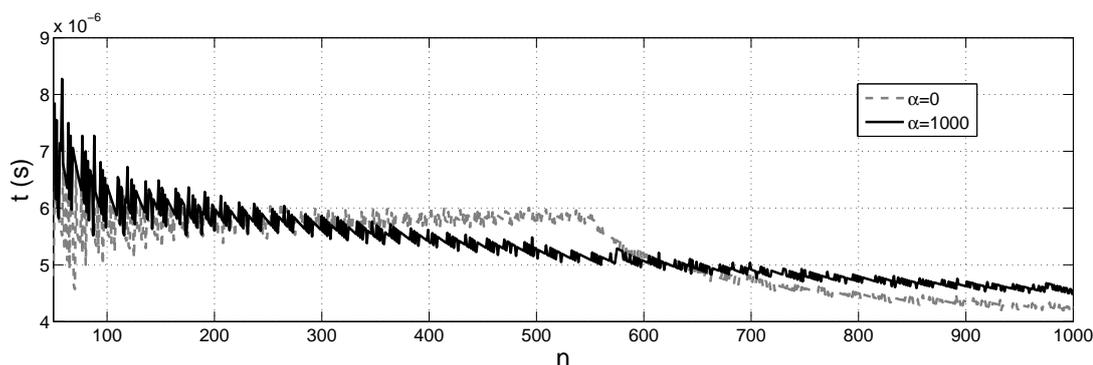


Figura 3.15: Tiempo de CPU unitario utilizado para calcular las cuadraturas de Gauss-Laguerre como función de n , con n el orden de la cuadratura y considerando los casos $\alpha = 0$ y $\alpha = 1000$.

3.3.6. Cuadratura de Gauss-Jacobi: elementos básicos

En el caso de la cuadratura de Gauss-Jacobi podríamos hacer un análisis similar al que hemos realizado para los casos de Gauss-Hermite y Gauss-Laguerre y obtener métodos para su cálculo a partir del método de punto fijo que hemos descrito. Sin embargo, existen una serie de diferencias con respecto a los casos que ya hemos estudiado.

En primer lugar, sea la ecuación en forma normal $y''(x) + A(x)y(x) = 0$ cumplida por los polinomios de Jacobi, tenemos

$$4A(x) = \frac{L^2 - \alpha^2 - \beta^2 + 1}{x(1-x)} + \frac{1 - \alpha^2}{x^2} + \frac{1 - \beta^2}{(1-x)^2}, \quad (3.94)$$

donde $L = 2n + \alpha + \beta + 1$.

El análisis de la monotonía del coeficiente $A(x)$ requiere resolver una ecuación cúbica dependiente de tres parámetros. Aunque es posible hacerlo, el esquema de evaluación de la cuadratura gaussiana asociada se complica dado que podemos tener hasta tres extremos relativos posibles para $A(x)$ (ver [9]).

Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas

En la variable original x , podemos calcular series de Taylor de los polinomios de Jacobi, obteniendo las sucesivas derivadas mediante relaciones de recurrencia como hicimos en los otros casos. Por lo tanto, parece posible construir un método iterativo para calcular cuadraturas de Gauss-Jacobi.

Sin embargo, la variable x no es la variable canónica como pasaba en el caso de Gauss-Laguerre. En su lugar, la variable canónica de los polinomios de Gauss-Jacobi es θ donde $x = \cos \theta$. En esta variable, el coeficiente $A(x(\theta))$ de la forma normal de la ecuación correspondiente es

$$A(x(\theta)) \equiv A(x) = L^2 - \frac{\alpha^2 - 1/4}{2(1-x)} - \frac{\beta^2 - 1/4}{2(1+x)}, \quad (3.95)$$

donde $L = 2n + \alpha + \beta + 1$.

Dicho coeficiente se hace aproximadamente constante para n grande y el estudio de su monotonía es más sencillo. Además, esta variable produce mejores resultados en términos de estabilidad dado que los ceros de los polinomios de Jacobi tienden a juntarse en los extremos del intervalo $(-1, 1)$ en el que están definidos y el cambio de variable $x = \cos \theta$ consigue distribuirlos de forma prácticamente equiespaciada, como se explica en [49].

Otra ventaja de la variable canónica es que se eliminan problemas de *overflow* en la evaluación de las correspondientes expansiones de Taylor, lo que parece indicar que en esta variable podemos obtener algoritmos de evaluación sin restricciones en los parámetros del polinomio.

El problema de considerar la variable θ reside en el cálculo de las series de Taylor, dado que ya no podemos utilizar que las derivadas de la función satisfacen una relación de recurrencia. Se podría considerar la posibilidad de calcular las series de Taylor para la variable original x y realizar el resto del proceso en la nueva variable θ , sin embargo, este proceso impondría una restricción en la región de aplicabilidad del algoritmo debido a los problemas de *overflow* que hemos mencionado. Por esta razón y también por los motivos de estabilidad mencionados en [49], es preferible realizar los cálculos en la variable canónica.

El análisis del coeficiente $A(x(\theta))$ indica que la función puede tener un máximo o un mínimo relativo (dependiendo de los parámetros del polinomio) y, en caso de no haber extremo, la función puede ser creciente o decreciente. Para cada una de estas situaciones hay que establecer un esquema de computación de los nodos distinto, dado que el método de punto fijo que hemos descrito calcula nodos en la dirección decreciente del coeficiente. El caso de la cuadratura de Gauss-Jacobi será objeto de próximo estudio.

3.3.7. Comentarios finales

Recapitemos aquí las principales características de los métodos iterativos que hemos descrito para las cuadraturas de Gauss-Hermite y Gauss-Laguerre.

1. El método iterativo empleado converge con certidumbre y es de cuarto orden. Es exacto en el caso trivial de soluciones de EDOs en forma normal con coeficiente constante.
2. El problema se resuelve en términos de la que hemos llamado variable canónica, que es la variable en la cual (previa transformación de Liouville) la ecuación diferencial está en forma normal con un coeficiente que, cuando el orden n es alto, es aproximadamente constante en gran parte del intervalo de oscilación. En consecuencia, el coste computacional por nodo tiende a ser menor según crece n .

Ventajas adicionales de trabajar con la variable canónica son:

- a) El cálculo de los pesos a partir de los nodos está bien condicionado.
 - b) Los pesos se calculan en orden decreciente, empezando por el más significativo. Esto implica que los pesos mayores son los más precisos.
 - c) Se eliminan por completo los posibles problemas de *overflow*, en particular cuando se evalúan las soluciones de la ecuación diferencial mediante series de Taylor locales.
3. Para la cuadratura de Gauss-Hermite el algoritmo resultante permite obtener todos los nodos sin pérdida alguna de precisión, mientras que la pérdida de precisión para los pesos es moderada, especialmente para los nodos escalados. Es, en cualquier caso, más preciso que anteriores métodos.
 4. En el caso Gauss-Laguerre, los nodos sufren una moderada pérdida de precisión, así como los pesos, pero el método se muestra tan preciso o más que el resto de métodos. El algoritmo se puede aplicar sin restricción aparente en los valores de n y α , lo que es una característica única del método.
 5. Los métodos son rápidos y todo parece indicar que superiores a algoritmos previos. Un test riguroso de eficiencia necesitará la implementación de todos los métodos en un mismo lenguaje de programación y con idénticos niveles de optimización.

Apéndices

A

Expansiones Asintóticas para Polinomios de Hermite, Laguerre y Jacobi

A continuación describimos las expansiones que se han utilizado para las aproximaciones asintóticas de los pesos de las cuadraturas de Gauss-Hermite, Gauss-Laguerre y Gauss-Jacobi y que son el punto de partida de las aproximaciones asintóticas a los nodos de estas cuadraturas. La discusión de un esquema computacional para los polinomios de Laguerre basado en el uso de expansiones asintóticas que se describen en este apéndice está recogido en detalle en la referencia [26].

A.1. Polinomios de Hermite

Los polinomios de Hermite son soluciones de la ecuación diferencial

$$y'' - 2zy' + 2ny = 0. \quad (\text{A.1})$$

Para estos polinomios disponemos de la representación en términos de la función de Airy (ver [53]):

$$H_n(x) = \frac{n!}{\nu^{\frac{1}{2}n + \frac{1}{3}}} e^{\nu A} \chi(\eta) \left(\text{Ai} \left(\eta \nu^{\frac{2}{3}} \right) A(\eta) - \nu^{-\frac{1}{3}} \text{Ai}' \left(\eta \nu^{\frac{2}{3}} \right) B(\eta) \right), \quad (\text{A.2})$$

donde $A(\eta)$ y $B(\eta)$ cumplen

$$A(\eta) \sim \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{A_k(\eta)}{\nu^k}, \quad B(\eta) \sim \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{B_k(\eta)}{\nu^k}, \quad \nu \rightarrow \infty, \quad (\text{A.3})$$

siendo $\nu = 2n+1$ y $\xi = x/\sqrt{\nu}$. Las expansiones son uniformemente válidas para $\xi > \delta > 0$. Para los valores η y A disponemos de las fórmulas

$$\begin{aligned} \frac{4}{3}\eta^{\frac{3}{2}} &= \xi \sqrt{\xi^2 - 1} - \text{arccosh } \xi, \xi \geq 1, \\ \frac{4}{3}(-\eta)^{\frac{3}{2}} &= \text{arc cos } \xi - \xi \sqrt{1 - \xi^2}, 0 \leq \xi \leq 1, \\ A &= \frac{1}{2}\xi^2 + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \ln 2, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas

y la función $\chi(\eta)$ definida por

$$\chi(\eta) = \left(\frac{\eta}{\xi^2 - 1} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (\text{A.5})$$

Se verifica que η es analítica en un entorno de $\xi = 1$. Además, se satisface la ecuación diferencial

$$\eta \left(\frac{d\eta}{d\xi} \right)^2 = \xi^2 - 1, \quad (\text{A.6})$$

por lo que para valores pequeños de $|\xi - 1|$ es posible obtener la expansión

$$\eta = 2^{\frac{1}{3}}(\xi - 1) \left(1 + \frac{1}{10}(\xi - 1) - \frac{2}{175}(\xi - 1)^2 + \mathcal{O}((\xi - 1)^3) \right). \quad (\text{A.7})$$

Los primeros coeficientes de las expansiones vienen dados por las fórmulas:

$$\begin{aligned} A_0(\eta) &= 1, & B_0(\eta) &= 0, & A_1(\eta) &= -\frac{1}{24}, \\ B_1(\eta) &= -\frac{2\xi(\xi^2 - 6)\chi^6 + 5}{48\eta^2}, \\ A_2(\eta) &= \frac{(8\xi^6 - 60\xi^4 + 1020\xi^2 + 572)\chi^{12} - 28\xi(\xi^2 - 6)\chi^6 - 455}{4608\eta^3}, \\ B_2(\eta) &= -\frac{1}{24}B_1(\eta), \\ A_3(\eta) &= \frac{a_{12}\chi^{12} + 420\xi(\xi^2 - 6)\chi^6 + 6825}{1658880\eta^3}, \\ a_{12} &= 16048\xi^6 - 47604\xi^4 + 33204\xi^2 - 24748, \\ B_3(\eta) &= \frac{b_{18}\chi^{18} + b_{12}\chi^{12} - 11550\xi(\xi^2 - 6)\chi^6 - 425425}{3317760\eta^5}, \\ b_{18} &= 8\xi(4012\xi^8 - 17919\xi^6 + 27657\xi^4 + 152565\xi^2 + 259110), \\ b_{12} &= -600\xi^6 + 4500\xi^4 - 76500\xi^2 - 42900. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

donde $\chi = \chi(\eta)$ viene descrito en (A.5). Para evitar cancelaciones cuando η es pequeño se pueden expandir los coeficientes, que son analíticos en $\eta = 0$, en potencias de η .

Otra expansión de utilidad para los polinomios de Hermite es la dada por Olver [40] para las funciones del cilindro parabólico:

La relación entre la función del cilindro parabólico $U(a, z)$ y el polinomio de Hermite $H_n(z)$ es

$$U\left(-n - \frac{1}{2}, z\right) = 2^{-n/2} e^{-\frac{1}{4}z^2} H_n\left(z/\sqrt{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.9})$$

Utilizamos la notación

$$\mu = \sqrt{2n+1}, \quad t = x/\mu, \quad \eta(t) = \frac{1}{2} \arccos t - \frac{1}{2} t \sqrt{1-t^2}, \quad (\text{A.10})$$

y tenemos la representación asintótica

$$H_n(x) = \frac{2^{\frac{1}{2}n+1} e^{\frac{1}{2}x^2} g(\mu)}{(1-t^2)^{\frac{1}{4}}} \times \left(\cos\left(\mu^2\eta - \frac{1}{4}\pi\right) \mathcal{A}_\mu(t) - \sin\left(\mu^2\eta - \frac{1}{4}\pi\right) \mathcal{B}_\mu(t) \right), \quad (\text{A.11})$$

con expansiones

$$\mathcal{A}_\mu(t) \sim \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s u_{2s}(t)}{(1-t^2)^{3s} \mu^{4s}}, \quad \mathcal{B}_\mu(t) \sim \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s u_{2s+1}(t)}{(1-t^2)^{3s+\frac{3}{2}} \mu^{4s+2}}, \quad (\text{A.12})$$

uniformemente para $-1 + \delta \leq t \leq 1 - \delta$, donde δ es un número pequeño positivo.

Los primeros coeficientes son

$$u_0(t) = 1, \quad u_1(t) = \frac{t(t^2-6)}{24}, \quad u_2(t) = \frac{-9t^4 + 249t^2 + 145}{1152}, \quad (\text{A.13})$$

y se pueden obtener más $u_s(t)$ a partir de la relación de recurrencia

$$(t^2-1)u'_s(t) - 3stu_s(t) = r_{s-1}(t), \quad (\text{A.14})$$

$$8r_s(t) = (3t^2+2)u_s(t) - 12(s+1)tr_{s-1}(t) + 4(t^2-1)r'_{s-1}(t).$$

La cantidad $g(\mu)$ se conoce sólo en forma de una expansión asintótica

$$g(\mu) \sim h(\mu) \left(1 + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\gamma_k}{\left(\frac{1}{2}\mu^2\right)^k} \right), \quad (\text{A.15})$$

donde los coeficientes γ_k están definidos por

$$\Gamma\left(\frac{1}{2} + z\right) \sim \sqrt{2\pi} e^{-z} z^z \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\gamma_k}{z^k}, \quad z \rightarrow \infty. \quad (\text{A.16})$$

Los primeros son

$$\gamma_0 = 1, \quad \gamma_1 = -\frac{1}{24}, \quad \gamma_2 = \frac{1}{1152}, \quad \gamma_3 = \frac{1003}{414720}, \quad \gamma_4 = -\frac{4027}{39813120}. \quad (\text{A.17})$$

Para $h(\mu)$ tenemos

$$h(\mu) = 2^{-\frac{1}{4}\mu^2 - \frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{4}\mu^2} \mu^{\frac{1}{2}\mu^2 - \frac{1}{2}} = 2^{-\frac{1}{2}} \left(n + \frac{1}{2}\right)^{\frac{1}{2}n} e^{-\frac{1}{2}n - \frac{1}{4}}. \quad (\text{A.18})$$

A.2. Polinomios de Laguerre

Los polinomios de Laguerre son soluciones de la ecuación diferencial

$$zy'' + (\alpha + 1 - z)y' + ny = 0. \quad (\text{A.19})$$

Estos polinomios tienen una región de comportamiento oscilatorio y otra de comportamiento monótono. El comportamiento oscilatorio (resp. monótono) se da en la región $0 < z/\nu < 1$ (resp. $z/\nu > 1$) donde

$$\nu = 4 \left(n + \frac{1}{2}(\alpha + 1) \right). \quad (\text{A.20})$$

A continuación se proporcionan expansiones asintóticas de los polinomios de Laguerre en términos de funciones de Airy y Bessel.

A.2.1. Una primera expansión en términos de funciones de Bessel

Los polinomios de Laguerre están relacionados con las función de Kummer ${}_1F_1(a; c; x)$ mediante la fórmula

$$L_n^{(\alpha)}(z) = \binom{n + \alpha}{n} {}_1F_1 \left(\begin{matrix} -n \\ \alpha + 1 \end{matrix}; z \right). \quad (\text{A.21})$$

Para valores de a negativos y de gran valor absoluto tenemos (ver [53][Eq. 10.3.4]),

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Gamma(c)} {}_1F_1 \left(\begin{matrix} -a \\ c \end{matrix}; z \right) &\sim \left(\frac{z}{a} \right)^{\frac{1}{2}(1-c)} \frac{\Gamma(1+a)e^{\frac{1}{2}z}}{\Gamma(a+c)} \times \\ &\left(J_{c-1}(2\sqrt{az}) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_k(z)}{(-a)^k} - \sqrt{\frac{z}{a}} J_c(2\sqrt{az}) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{b_k(z)}{(-a)^k} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Esta expansión de ${}_1F_1(-a; c; x)$ es válida para valores acotados de z y c , con $a \rightarrow \infty$ dentro del sector $\arg(a) \leq |\pi - \delta|$, δ arbitrariamente pequeño. Esto nos proporciona la siguiente representación de los polinomios de Laguerre

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \left(\frac{x}{n} \right)^{-\frac{1}{2}\alpha} e^{\frac{1}{2}x} \left(J_\alpha(2\sqrt{nx}) A(x) - \sqrt{\frac{x}{n}} J_{\alpha+1}(2\sqrt{nx}) B(x) \right), \quad (\text{A.23})$$

donde $A(x)$ y $B(x)$ tienen expansiones

$$A(x) \sim \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{a_k(x)}{n^k}, \quad B(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{b_k(x)}{n^k} \quad n \rightarrow \infty, \quad (\text{A.24})$$

que son válidas para valores acotados de x y α . Los coeficientes $a_k(x)$ y $b_k(x)$ se obtienen a partir de la expansión de la función $f(z, s)$

$$f(z, s) = e^{xg(s)} \left(\frac{s}{1 - e^{-s}} \right)^{\alpha+1}, \quad g(s) = \frac{1}{s} - \frac{1}{e^s - 1} - \frac{1}{2}. \quad (\text{A.25})$$

La función f es analítica en la banda $|Im(s)| < 2\pi$ y se puede expandir para $|s| < 2\pi$ de la siguiente manera

$$f(x, s) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(x) s^k. \quad (\text{A.26})$$

Los coeficientes $c_k(x)$ son combinaciones de números y polinomios de Bernoulli, siendo los primeros (para $c = \alpha + 1$)

$$\begin{aligned} c_0(x) &= 1, & c_1(x) &= \frac{1}{12} (6c - x), \\ c_2(x) &= \frac{1}{288} (-12c + 36c^2 - 12xc + x^2), \\ c_3(x) &= \frac{1}{51840} (-5x^3 + 90x^2c + (-540c^2 + 180c + 72)x + 1080c^2(c - 1)). \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

De esta forma, los coeficientes $a_k(x)$ y $b_k(x)$ se pueden describir en términos de los coeficientes $c_k(x)$

$$\begin{aligned} a_k(x) &= \sum_{m=0}^k \binom{k}{m} (m + 1 - c)_{k-m} x^m c_{k+m}(x), \\ b_k(x) &= \sum_{m=0}^k \binom{k}{m} (m + 2 - c)_{k-m} x^m c_{k+m+1}(x), \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

para $k = 0, 1, 2, \dots$, siendo los primeros (nuevamente para $c = \alpha + 1$)

$$\begin{aligned} a_0(x) &= c_0(x) = 1, & b_0(x) &= c_1(x), \\ a_1(x) &= (1 - c)c_1(x) + xc_2(x), & b_1(x) &= (2 - c)c_2(x) + xc_3(x), \\ a_2(x) &= (c^2 - 3c + 2)c_2(x) + (4x - 2xc)c_3(x) + x^2c_4(x), \\ b_2(x) &= (c^2 - 5c + 6)c_3(x) + (6x - 2xc)c_4(x) + x^2c_5(x). \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

A.2.2. Otra expansión en términos de funciones de Bessel

Otra expansión involucrando funciones de Bessel viene dada por

$$L_n^{(\alpha)}(2\nu x) = \frac{e^{\nu x} \chi(\zeta)}{2^\alpha \zeta^{\frac{1}{2}\alpha}} \left(J_\alpha(2\nu\sqrt{\zeta}) A(\zeta) - \frac{1}{\nu\sqrt{\zeta}} J_{\alpha+1}(2\nu\sqrt{\zeta}) B(\zeta) \right), \quad (\text{A.30})$$

Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas

donde la expansiones para los coeficientes

$$A(\zeta) \sim \sum_{j=0}^{\infty} \frac{A_j(\zeta)}{\nu^{2j}}, \quad B(\zeta) \sim \sum_{j=0}^{\infty} \frac{B_j(\zeta)}{\nu^{2j}}, \quad \nu \rightarrow \infty, \quad (\text{A.31})$$

son válidas uniformemente para $x \leq 1 - \delta$, siendo $\delta \in (0, 1)$ un número fijo. Tenemos,

$$\nu = 2n + \alpha + 1, \quad \chi(\zeta) = (1 - x)^{-\frac{1}{4}} \left(\frac{\zeta}{x} \right)^{\frac{1}{2}\alpha + \frac{1}{4}}, \quad x < 1, \quad (\text{A.32})$$

con ζ dado por

$$\begin{cases} \sqrt{-\zeta} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{x^2 - x} + \operatorname{arcsinh} \sqrt{-x} \right), & \text{si } x \leq 0, \\ \sqrt{\zeta} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{x - x^2} + \operatorname{arcsin} \sqrt{x} \right), & \text{si } 0 \leq x < 1, \end{cases} \quad (\text{A.33})$$

y cumpliéndose que

$$\frac{1}{\zeta^{\frac{1}{2}}} \frac{d\zeta}{dx} = \sqrt{\frac{1-x}{x}}, \quad x < 1. \quad (\text{A.34})$$

Los primeros coeficientes en (A.31) vienen dados por

$$\begin{aligned} A_0(\zeta) &= 1, \\ B_0(\zeta) &= \frac{1 - 4\alpha^2}{16} + \frac{\sqrt{\zeta}}{8\sqrt{\xi}} \left(\frac{4\alpha^2 - 1}{2} + \xi + \frac{5}{6}\xi^2 \right), \quad \xi = \frac{x}{1-x}. \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

A.2.3. Expansión en funciones de Airy

Consideramos la expansión

$$L_n^{(\alpha)}(\nu x) = (-1)^n \frac{e^{\frac{1}{2}\nu x} \chi(\zeta)}{2^\alpha \nu^{\frac{1}{3}}} \left(\operatorname{Ai}(\nu^{2/3}\zeta) A(\zeta) + \nu^{-\frac{4}{3}} \operatorname{Ai}'(\nu^{2/3}\zeta) B(\zeta) \right) \quad (\text{A.36})$$

donde las expansiones para los coeficientes

$$A(\zeta) \sim \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\alpha_{2j}}{\nu^{2j}}, \quad B(\zeta) \sim \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\beta_{2j+1}}{\nu^{2j}}, \quad n \rightarrow \infty, \quad (\text{A.37})$$

están acotadas uniformemente para α y $x \in (x_0, \infty]$, siendo $x_0 \in (0, 1)$ un número fijo. Tenemos que

$$\nu = 4\kappa, \quad \kappa = n + \frac{1}{2}(\alpha + 1), \quad \chi(\zeta) = 2^{\frac{1}{2}} x^{-\frac{1}{4} - \frac{1}{2}\alpha} \left(\frac{\zeta}{x-1} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad (\text{A.38})$$

así como

$$\begin{cases} \frac{2}{3}(-\zeta)^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{2} \left(\arccos \sqrt{x} - \sqrt{x-x^2} \right) & \text{si } 0 < x \leq 1, \\ \frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{x^2-x} - \operatorname{arccosh} \sqrt{x} \right) & \text{si } x \geq 1, \end{cases} \quad (\text{A.39})$$

y, finalmente, la relación

$$\zeta^{\frac{1}{2}} \frac{d\zeta}{dx} = \frac{\sqrt{x-1}}{2\sqrt{x}}. \quad (\text{A.40})$$

Los primeros coeficientes de las expansiones (A.37) son

$$\alpha_0 = 1, \quad \beta_1 = -\frac{1}{4b^3} (f_1 - bf_2), \quad (\text{A.41})$$

donde $b = \sqrt{\zeta}$ si $\zeta \geq 0$ y $b = i\sqrt{-\zeta}$ cuando $\zeta \leq 0$, y

$$\begin{aligned} f_1 &= i \frac{(x + 3\alpha(x-1))x^2a_1^3 - 2}{3a_1^2x\sqrt{x(1-x)}}, \\ f_2 &= \frac{-4 - 8x^2(x + 3x\alpha - 3\alpha)a_1^3 + x^4(12x - 3 - 4x^2 + 12\alpha^2(x-1)^2)a_1^6}{12x^3a_1^4(x-1)}, \\ a_1 &= \left(\frac{4\zeta}{x^3(x-1)} \right)^{\frac{1}{4}}. \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

A.3. Polinomios de Jacobi

Los polinomios de Jacobi son soluciones de la ecuación diferencial

$$(1-z^2)y'' + [\beta - \alpha - (\alpha + \beta + 2)z]y' + n(n + \alpha + \beta + 1)y = 0. \quad (\text{A.43})$$

Para los polinomios de Jacobi podemos considerar la expansión en términos de funciones de Bessel

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(\cos \theta) \sim \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \left(\sin \frac{1}{2}\theta \right)^\alpha \left(\cos \frac{1}{2}\theta \right)^\beta} \sqrt{\frac{\theta}{\sin \theta}} \sum_{k=0}^{\infty} A_k(\theta) \frac{J_{\alpha+k}(\nu\theta)}{\nu^{\alpha+k}}, \quad (\text{A.44})$$

donde $\theta \in (0, \pi)$ y

$$\nu = n + \frac{1}{2}(\alpha + \beta + 1). \quad (\text{A.45})$$

Evaluación numérica de cuadraturas gaussianas clásicas

La expansión es uniformemente válida para $\theta \in [0, \pi - \delta]$, con δ un número positivo pequeño y arbitrario. Transformamos esta expansión en

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(\cos \theta) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \nu^\alpha \left(\sin \frac{1}{2}\theta\right)^\alpha \left(\cos \frac{1}{2}\theta\right)^\beta} \sqrt{\frac{\theta}{\sin \theta}} W(\theta), \quad (\text{A.46})$$

$$W(\theta) = J_\alpha(\nu\theta) S(\theta) + \frac{1}{\nu} J_{\alpha+1}(\nu\theta) T(\theta),$$

donde $S(\theta)$ y $T(\theta)$ se expresan de la forma

$$S(\theta) \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{S_k(\theta)}{\nu^{2k}}, \quad T(\theta) \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{T_k(\theta)}{\nu^{2k}}, \quad \nu \rightarrow \infty, \quad (\text{A.47})$$

con $S_0(\theta) = A_0(\theta)$, $T_0(\theta) = A_1(\theta)$, y para $k = 1, 2, 3, \dots$

$$S_k(\theta) = -\frac{1}{\theta^{k-1}} \sum_{j=0}^{k-1} \binom{k-1}{j} A_{j+k+1}(\theta) (-\theta)^j 2^{k-1-j} (\alpha + 2 + j)_{k-j-1},$$

$$T_k(\theta) = \frac{1}{\theta^k} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} A_{j+k+1}(\theta) (-\theta)^j 2^{k-j} (\alpha + 1 + j)_{k-j}. \quad (\text{A.48})$$

Los coeficientes $A_k(\theta)$ son funciones analíticas para $0 \leq \theta \leq \pi$. Para describirlos, usaremos la función

$$b_j(\theta) = \frac{(-1)^j \left(\frac{1}{2}\alpha + \frac{1}{2}\beta\right)_j \left(\frac{1}{2}\alpha - \frac{1}{2}\beta\right)_j}{j! \left(\alpha + \frac{1}{2}\right)_j (1 + \cos \theta)_j}, \quad j = 0, 1, 2, \dots, \quad (\text{A.49})$$

y las funciones $\psi_{j,k}(\theta)$ definidas por las funciones

$$\left(\frac{2\theta(\cos \phi - \cos \theta)}{\sin \theta (\theta^2 - \phi^2)}\right)^{k+\alpha-\frac{1}{2}} = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \psi_{j,k}(\theta) (\phi^2 - \theta^2)^j, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.50})$$

Así, tendremos que

$$A_k(\theta) = (2\theta)^k \left(\alpha + \frac{1}{2}\right)_k \sum_{j=0}^k b_j(\theta) \left(\frac{\sin \theta}{2\theta}\right)^j \psi_{k-j,j}(\theta). \quad (\text{A.51})$$

Los primeros coeficientes son $A_0(\theta) = 0$ y

$$A_1(\theta) = \frac{(4\alpha^2 - 1)(\sin \theta - \theta \cos \theta) + 2\theta(\alpha^2 - \beta^2)(\cos \theta - 1)}{8\theta \sin \theta}. \quad (\text{A.52})$$

Para calcular los coeficientes $A_k(\theta)$ para valores pequeños de θ de forma estable, necesitamos usar expansiones. Podemos utilizar

$$A_k(\theta) = \chi^k \theta^k \sum_{j=0}^{\infty} A_{jk} \theta^{2j}, \quad \chi = \frac{\theta}{\sin \theta}, \quad (\text{A.53})$$

donde las series representan funciones enteras de θ . Los primeros términos $A_{j,k}$ son

$$\begin{aligned} A_{0,1} &= \frac{1}{24} (\alpha^2 + 3\beta^2 - 1), \\ A_{1,1} &= \frac{1}{480} (-3\alpha^2 - 5\beta^2 + 2), \\ A_{0,2} &= \frac{1}{5760} (-16\alpha - 14\alpha^2 - 90\beta^2 + 5\alpha^4 + 4\alpha^3 + 45\beta^4 + 30\beta^2\alpha^2 + 60\beta^2\alpha + 21). \end{aligned} \quad (\text{A.54})$$

Bibliografía

Bibliografía

- [1] P. AMORE, *Asymptotic and exact series representations for the incomplete gamma function*, Europhys. Lett., 71 (2005), pp. 1–7.
- [2] I. BOGAERT, *Iteration-free computation of Gauss-Legendre quadrature nodes and weights*, SIAM J. Sci. Comput., 36 (2014), pp. A1008–A1026.
- [3] I. BOGAERT, B. MICHIELS, AND J. FOSTIER, *$O(1)$ computation of Legendre polynomials and Gauss-Legendre nodes and weights for parallel computing*, SIAM J. Sci. Comput., 34 (2012), pp. C83–C101.
- [4] G. COLLINS, *Fundamentals of Stellar Astrophysics*, W H Freeman and Co, 1989.
- [5] A. CUYT, V. B. PETERSEN, B. VERDONK, H. WADELAND, AND W. B. JONES, *Handbook of continued fractions for special functions*, Springer, New York, NY, 2008.
- [6] P. J. DAVIS AND P. RABINOWITZ, *Some geometrical theorems for abscissas and weights of Gauss type*, J. Math. Anal. Appl., 2 (1961), pp. 428–437.
- [7] A. DEAÑO AND J. SEGURA, *Transitory minimal solutions of hypergeometric recursions and pseudoconvergence of associated continued fractions*, Math. Comp., 76 (2007), pp. 879–901.
- [8] A. DEAÑO, A. GIL, AND J. SEGURA, *New inequalities from classical Sturm theorems*, J. Approx. Theory, 131 (2004), pp. 208–230.
- [9] A. DEAÑO AND J. SEGURA, *Global Sturm inequalities for the real zeros of the solutions of the Gauss hypergeometric differential equation*, J. Approx. Theory, 148 (2007), pp. 92–110.
- [10] D. K. DIMITROV AND G. P. NIKOLOV, *Sharp bounds for the extreme zeros of classical orthogonal polynomials*, J. Approx. Theory, 162 (2010), pp. 1793–1804.

- [11] C. FERREIRA, J. LÓPEZ, AND E. PÉREZ SINUSÍA, *Incomplete gamma functions for large values of their variables*, Adv. Appl. Math., 34 (2005), pp. 467–485.
- [12] C. L. FRENZEN AND R. WONG, *A uniform asymptotic expansion of the Jacobi polynomials with error bounds*, Canad. J. Math., 37 (1985), pp. 979–1007.
- [13] L. GATTESCHI, *Asymptotics and bounds for the zeros of Laguerre polynomials: a survey*, J. Comput. Appl. Math., 144 (2002), pp. 7–27.
- [14] L. GATTESCHI AND G. PITTALUGA, *An asymptotic expansion for the zeros of Jacobi polynomials*, in Mathematical analysis, vol. 79 of Teubner-Texte Math., Teubner, Leipzig, 1985, pp. 70–86.
- [15] W. GAUTSCHI, *A computational procedure for incomplete gamma functions*, ACM Trans. Math. Software, 5 (1979), pp. 466–481.
- [16] W. GAUTSCHI, *Orthogonal polynomials: computation and approximation*, Numerical Mathematics and Scientific Computation, Oxford University Press, New York, 2004. Oxford Science Publications.
- [17] G. GIGANTE, M. POZZOLI, AND C. VERGARA, *Optimized Schwarz methods for the diffusion-reaction problem with cylindrical interfaces*, SIAM J. Numer. Anal., 191 (2013), pp. 3402–3430.
- [18] A. GIL, D. RUIZ-ANTOLÍN, J. SEGURA, AND N. M. TEMME, *Computation of the incomplete gamma function for negative values of the argument*, ACM Trans. Math. Softw., 43 (2016), p. Artículo 26.
- [19] A. GIL AND J. SEGURA, *Computing the real zeros of cylinder functions and the roots of the equation $x\mathcal{C}'_\nu + \gamma\mathcal{C}_\nu(x) = 0$* , Comput. Math. Appl., 64 (2012), pp. 11–21.
- [20] A. GIL, J. SEGURA, AND N. M. TEMME, *Algorithm 850: real parabolic cylinder functions $U(a, x)$, $V(a, x)$* , ACM Trans. Math. Software, 32 (2006), pp. 102–112.
- [21] —, *Numerical methods for special functions*, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2007.
- [22] —, *Efficient and accurate algorithms for the computation and inversion of the incomplete gamma function ratios*, SIAM J. Sci. Comput., 34 (2012), pp. 2965–2981.
- [23] —, *Recent software developments for special functions in the Santander-Amsterdam project*, Sci. Comput. Program., 90A (2014), pp. 42–54.

-
- [24] —, *Gammachi: a package for the inversion and computation of the gamma and chi-square cumulative distribution functions (central and noncentral)*, *Comput. Phys. Commun.*, 191 (2015), pp. 132–139.
- [25] —, *Asymptotic approximations to the nodes and weights of classical gaussian quadratures*, en estado de revisión. (2017).
- [26] —, *Efficient computation of Laguerre polynomials*, *Comput. Phys. Commun.*, 210 (2017), pp. 124–131.
- [27] A. GLASER, X. LIU, AND V. ROKHLIN, *A fast algorithm for the calculation of the roots of special functions*, *SIAM J. Sci. Comput.*, 29 (2007), pp. 1420–1438.
- [28] G. H. GOLUB AND J. H. WELSCH, *Calculation of Gauss quadrature rules*, *Math. Comp.*, 23 (1969), pp. 221–230.
- [29] I. GUSEINOV AND B. MAMEDOV, *Evaluation of incomplete gamma functions using downward recursion and analytical relations*, *J. Math. Chem.*, 36 (2004), pp. 341–346.
- [30] N. HALE AND A. TOWNSEND, *Fast and accurate computation of Gauss–Legendre and Gauss–Jacobi quadrature nodes and weights*, *SIAM J Sci Comput*, 35 (2013), pp. A652–A674.
- [31] Z. HEITMAN, J. BREMER, AND V. ROKHLIN, *On the existence of nonoscillatory phase functions for second order ordinary differential equations in the high-frequency regime*, *J. Comput. Phys.*, 290 (2015), pp. 1–27.
- [32] G. IGARASHI AND Y. KAKIAWA, *Re-formulation of inverse Gaussian, reciprocal inverse Gaussian, and Birnbaum-Saunders kernel estimators*, *Statist. Probab. Lett.*, 84 (2014), pp. 235–246.
- [33] W. B. JONES AND W. J. THRON, *On the computation of incomplete gamma functions in the complex domain*, *J. Comput. Appl. Math.*, 12&13 (1985), pp. 401–407.
- [34] V. KOWALENKO, *The modes of an ultra-cold strongly magnetized charged Bose gas*, *Eur. Phys. B*, 1 (1998), pp. 161–168.
- [35] V. KOWALENKO AND N. E. FRANKEL, *Asymptotics for the Kummer function of Bose plasmas*, *J. Math. Phys.*, 35 (1994), pp. 6178–6198.
- [36] K. KRISHNAMOORTHY, *Handbook of Statistical Distributions with Applications*, *Statistics: A Series of Textbooks and Monographs (Book 188)*, Chapman and Hall/CRC, 2006.

- [37] C. M. LINTON, *Lattice sums for the Helmholtz equation*, SIAM Rev., 52 (2010), pp. 630–674.
- [38] A. N. LOWAN, N. DAVIDS, AND A. LEVENSON, *Table of the zeros of the Legendre polynomials of order 1–16 and the weight coefficients for Gauss’ mechanical quadrature formula*, Bull. Amer. Math. Soc., 48 (1942), pp. 739–743.
- [39] A. MOROZ, *Quasi-periodic Green’s functions of the Helmholtz and Laplace equations*, J. Phys. A: Math. Gen., 39 (2006), pp. 11247–11282.
- [40] F. W. J. OLVER, *Uniform asymptotic expansions for Weber parabolic cylinder functions of large orders*, J. Res. Nat. Bur. Standards Sect. B, 63B (1959), pp. 131–169.
- [41] F. W. J. OLVER, D. W. LOZIER, R. F. BOISVERT, AND C. W. CLARK, *NIST Handbook of Mathematical Functions*, Cambridge University Press, New York, NY, 2010.
- [42] S. PAL AND K. KHARE, *Geometric ergodicity for Bayesian shrinkage models*, Electron. J. Statist., 8 (2014), pp. 604–645.
- [43] R. PARIS, *A uniform asymptotic expansion for the incomplete gamma function*, J. Comput. Appl. Math., 148 (2002), pp. 323–339.
- [44] K. PETRAS, *On the computation of the Gauss-Legendre quadrature formula with a given precision*, J. Comput. Appl. Math., 112 (1999), pp. 253–267. Numerical evaluation of integrals.
- [45] D. RUIZ-ANTOLÍN AND J. SEGURA, *A new type of sharp bounds for ratios of modified Bessel functions*, Math. Anal. Appl., 443 (2016), pp. 1232–1246.
- [46] J. SEGURA, *Reliable computation of the zeros of solutions of second order linear ODEs using a fourth order method*, SIAM J. Numer. Anal., 48 (2010), pp. 452–469.
- [47] —, *Bounds for ratios of modified Bessel functions and associated Turán-type inequalities*, J. Math. Anal. Appl., 374 (2011), pp. 516–528.
- [48] J. SEGURA AND N. M. TEMME, *Numerically satisfactory solutions of Kummer recurrence relations*, Numer. Math., 111 (2008), pp. 109–119.
- [49] P. N. SWARZTRAUBER, *On computing the points and weights for Gauss-Legendre quadrature*, SIAM J. Sci. Comput., 24 (2002), pp. 945–954 (electronic).

-
- [50] H. TAKAHASI AND M. MORI, *Double exponential formulas for numerical integration*, Publ. RIMS, 9 (1974), pp. 721–741.
- [51] N. M. TEMME, *Special Functions : An Introduction to the Classical Functions of Mathematical Physics*, John Wiley & Sons, New York, NY, 1996.
- [52] —, *Uniform asymptotics for the incomplete gamma functions starting from negative values of the parameters*, Methods Appl. Anal., 3 (1996), pp. 335–344.
- [53] —, *Asymptotic Methods for Integrals*, vol. 6 of Series in Analysis, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Hackensack, NJ, 2015.
- [54] I. THOMPSON, *Algorithm 926: Incomplete gamma functions with negative arguments*, ACM Trans. Math. Software, 39 (2013), p. Artículo 14.
- [55] A. TOWNSEND, *The race for high order Gauss-Legendre quadrature*, SIAM News, Marzo 2015.
- [56] A. TOWNSEND, T. TROGDON, AND S. OLVER, *Fast computation of Gauss quadrature nodes and weights on the whole real line*, IMA J Numer Anal, 36 (2016), pp. 337–358.
- [57] F. TRICOMI, *Sul comportamento asintotico dell' n -esimo polinomio di Laguerre nell'intorno dell'ascissa $4n$* , Comment. Math. Helv., 22 (1949), pp. 150–167.
- [58] J. WIMP, *Computation with Recurrence Relations*, Pitman (Advanced Publishing Program), Boston, MA, 1984.
- [59] E. YAKIMIW, *Accurate computation of weights in classical Gauss-Christoffel quadrature rules*, J. Comput. Phys., 129 (1996), pp. 406–430.