OBTENCION DE FORMULAS DE CUBATURA PARA EL TETRAEDRO

E. Sainz de la Maza y J.I. Maeztu

Departamento de Matemática Aplicada y Estadística, Universidad del País Vasco, Apartado 644, 48080-Bilbao, Spain.

Sea T_3 un simplex tridimensional o tetraedro en el espacio euclídeo $\mathbb{R}^3$. Por simplicidad, supondremos que está centrado en el origen.
En [3] se presentan condiciones de consistencia y estructuras óptimas consistentes para el simplex n-dimensional T_n y en [2] se da un listado de estructuras cuasi-óptimas. En [1] y [5] se presenta un resumen de las fórmulas conocidas para el tetraedro, donde aparecen fórmulas de grado de precisión hasta $d = 9$.
En este trabajo describimos una técnica que permite partir los sistemas de los momentos en subsistemas de menor dimensión usando las condiciones de consistencia dadas en [3]. Siguiendo este método utilizamos estructuras consistentes, en el caso 3-dimensional, para buscar fórmulas de integración de mayor grado que las conocidas hasta el momento. De esta manera obtenemos nuevas fórmulas de grado $d = 11$ con 28 parámetros y 87 nodos (ver [4]). Vemos así mismo la importancia que tiene la nueva base de polinomios invariantes, introducida en [3], para poder resolver el sistema de los momentos como sistemas de menor dimensión.
Sea $\mathcal{P}$ el espacio de polinomios en 3 variables x_1, x_2, x_3. Denotamos por $\mathcal{P}_d$ el espacio de polinomios de grado menor o igual que d y por $\mathcal{H}_d$ el de los homogéneos de grado d. Sea $\mathcal{G}_3$ el grupo de simetría de T_3 , es decir, el conjunto de transformaciones afines $\boldsymbol{s} : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ que dejan T_3 invariante (permutaciones de las coordenadas baricéntricas).
Un polinomio $p \in \mathcal{P}$ se dice *invariante* si

$$p(\boldsymbol{s}(\boldsymbol{x})) = p(\boldsymbol{x}) \quad \forall \boldsymbol{s} \in \mathcal{G}_3 \ , \quad \forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3 . \tag{1}$$

Denotemos como $\mathcal{P}^*$ el espacio de polinomios invariantes y sea $\mathcal{P}^*_d = \mathcal{P}^* \cap \mathcal{P}_d$ y $\mathcal{H}^*_d = \mathcal{P}^* \cap \mathcal{H}_d$.
Definimos la integral

$$I(f) = \frac{1}{vol(T_3)} \int_{T_3} f(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} \tag{2}$$

y el problema de encontrar una fórmula de cuadratura

$$Q(f) = \sum_{i=1}^{\nu(Q)} W_i f(\boldsymbol{x}_i) \tag{3}$$

invariante y que aproxima $I(f)$ con un grado de precisión d, es decir, verificando

$$Q(f \circ \boldsymbol{s}) = Q(f) \quad \forall \boldsymbol{s} \in \mathcal{G}_3 \ , \tag{4}$$

TABLA 1. Clases o tipos para dimensión $n = 3$.

n	Clase (Tipo)	r_i+1	ν_i
3	$\mathcal{C}_0 = [4]$	1	1
3	$\mathcal{C}_1 = [3,1]$	2	4
3	$\mathcal{C}_2 = [2,2]$	2	6
3	$\mathcal{C}_3 = [2,1,1]$	3	12
3	$\mathcal{C}_4 = [1,1,1,1]$	4	24

$$Q(p) = I(p) \quad \forall p \in \mathcal{P}_d \,. \tag{5}$$

Naturalmente, se trata de buscar fórmulas con un número de nodos $\nu(Q)$ lo menor posible. Un enfoque clásico de este problema es considerar algunas coordenadas de los nodos $\boldsymbol{x}_i$ y pesos W_i como incógnitas del sistema de los momentos (5) aplicado a una base de $\mathcal{P}_d^*$.
Si $\boldsymbol{v}_0, \ldots, \boldsymbol{v}_n$ son los 4 vértices de T_3, se definen las coordenadas baricéntricas $\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x})$ de un punto $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3$ como

$$\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_0, \ldots, \lambda_n) : \sum_{j=0}^{n} \lambda_j = 1 \,, \quad \sum_{j=0}^{n} \lambda_j \boldsymbol{v}_j = \boldsymbol{x} \,. \tag{6}$$

Sean r y $m_0, \ldots, m_r$ enteros no negativos tales que

$$m_0 \geq m_1 \geq \cdots \geq m_r \geq 1 \,, \quad \sum_{j=0}^{r} m_j = 4 \,. \tag{7}$$

Se define una *clase* $[m_0, m_1, \ldots, m_r]$ como el conjunto de puntos $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3$ tales que para alguna simetría $\boldsymbol{s} \in \mathcal{G}_3$ la representación en coordenadas baricéntricas de $\boldsymbol{s}(\boldsymbol{x})$ tiene la forma:

$$\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{s}(\boldsymbol{x})) = (\overbrace{a_0, \ldots, a_0}^{m_0 \text{ veces}}, \overbrace{a_1, \ldots, a_1}^{m_1 \text{ veces}}, \ldots, \overbrace{a_r, \ldots, a_r}^{m_r \text{ veces}}) \,, \tag{8}$$

con

$$\sum_{j=0}^{r} m_j a_j = 1 \,. \tag{9}$$

Si $\mathcal{C}_i = [m_0, m_1, \ldots, m_{r_i}]$, cada nodo generador de clase (tipo) $\mathcal{C}_i$ aporta a una fórmula de cuadratura invariante r_i parámetros libres y un número de nodos ν_i dado por

$$\nu_i = \frac{4!}{m_0!\, m_1! \cdots m_{r_i}!} \,. \tag{10}$$

En la Tabla 1 se muestran los distintos tipos de clases de nodos para el tetraedro.
Se define la estructura de una fórmula de cuadratura invariante como $(K_0, K_1, K_2, K_3, K_4)$, donde los números K_i indican cuantos nodos generadores de cada clase intervienen en la

fórmula. Por consiguiente, el número total de nodos que intervienen en una fórmula con la estructura anterior es

$$\nu(Q) = \sum_{i=0}^{4} \nu_i K_i \tag{11}$$

y el número de incógnitas a determinar con las ecuaciones de los momentos viene dado por

$$N_P(Q) = \sum_{i=0}^{4} (r_i + 1) K_i \,. \tag{12}$$

En [3] se desarrollan condiciones de consistencia (condiciones necesarias) para la existencia de fórmulas invariantes. En el caso del tetraedro T_3 éstas son las siguientes:

$$\begin{aligned} K_0 + 2K_1 + 2K_2 + 3K_3 + 4K_4 &\geq dim\mathcal{P}_d^* \\ 2K_1 + 2K_2 + 3K_3 + 4K_4 &\geq dim\mathcal{P}_d^*(0) \\ 2K_2 + 3K_3 + 4K_4 &\geq dim\mathcal{P}_d^*(0,1) \\ 2K_1 + 3K_3 + 4K_4 &\geq dim\mathcal{P}_d^*(0,2) \\ 3K_3 + 4K_4 &\geq dim\mathcal{P}_d^*(0,1,2) \\ 4K_4 &\geq dim\mathcal{P}_d^*(0,1,2,3)\,, \end{aligned} \tag{13}$$

donde $\mathcal{P}_d^*(i_1, \ldots, i_j)$ indica el espacio de polinomios invariantes de grado menor o igual de d que se anulan en todos los puntos de los tipos o clases $\mathcal{C}_{i_1}, \ldots, \mathcal{C}_{i_j}$. En ese trabajo también se describe como calcular computacionalmente las dimensiones de dichos espacios y, de esta manera, comprobar si una determinada estructura es o no consistente.
Por otra parte, la primera desigualdad de (13) indica el número de incógnitas y ecuaciones en el sistema de las ecuaciones de los momentos. Además, si para alguna de las restantes inecuaciones de (13) encontramos una base del correspondiente espacio de polinomios $\mathcal{P}_d^*(i_1, \ldots, i_j)$, entonces tendremos un subsistema de menor tamaño que el anterior en el que sólo intervienen algunas de las incógnitas. Una vez resuelto, podremos sustituir los valores obtenidos en los demás subsistemas para reducir la dimensión de los mismos.
Esta técnica es de gran utilidad práctica por varias razones. En primer lugar, la resolución de sistemas no lineales es un problema numéricamente difícil y esta dificultad aumenta mucho con la dimensión del problema. En segundo lugar si uno de los subsistemas no tiene solución, podemos eliminar de la búsqueda de fórmulas todas aquellas estructuras que tengan ese mismo subsistema, ahorrando mucho trabajo y dirigiendo la búsqueda de soluciones de forma mas eficaz. Describimos a continuación un ejemplo que ilustra mejor esta situación.
Para el grado $d = 11$ la estructura consistente óptima es la $(1, 5, 2, 4, 0)$ que daría lugar a fórmulas con 81 nodos. En este caso las condiciones de consistencia son: $27 \geq 27$, $26 \geq 26$, $16 \geq 16$, $22 \geq 21$, $12 \geq 12$ y $0 \geq 0$. La igualdad $12 = 12$, correspondiente a la quinta inecuación de (13), nos muestra que debe existir un subsistema de 12 ecuaciones con 12 incógnitas que son los coeficientes y coordenadas de los 4 nodos generadores de tipo $\mathcal{C}_3$. Si este subsistema tuviera solución, sustituiríamos los valores obtenidos en las demás ecuaciones. Una vez hecho esto, la igualdad $16 = 16$ de la tercera inecuación de (13) nos indica que tendremos un subsistema de $16 - 12 = 4$ ecuaciones con las 4 incógnitas relativas a los 2 nodos generadores de tipo $\mathcal{C}_2$. Así mismo, tendremos un subsistema de dimensión

10 con las incógnitas de los 5 nodos de tipo $\mathcal{C}_1$ y una sóla ecuación con el coeficiente del nodo de tipo $\mathcal{C}_0$.

Para esta estructura en particular no existe solución en el primer subsistema de dimensión 12. Esto nos permite eliminar de la búsqueda de fórmulas de grado de precisión $d = 11$ todas aquellas estructuras que vayan a dar lugar a ese mismo subsistema, como son las primeras estructuras cuasi-óptimas $(*, *, 2, 4, 0)$ con 84, 85 y 88 nodos que se dan en [2].

Además, esta técnica nos ha permitido obtener, para la estructura $(1, 5, 1, 5, 0)$, una familia uniparamétrica de fórmulas de grado de precisión $d = 11$ con 87 nodos (ver [4]). A pesar de que en este caso el sistema de ecuaciones de los momentos tiene un total de 27 ecuaciones y 28 incógnitas, únicamente hemos necesitado resolver un subsistema de 16 ecuaciones con 17 incógnitas, dependiente de un parámetro libre, y otro de 11 ecuaciones con 11 incógnitas.

Por otra parte, la nueva base de polinomios invariantes que utilizamos (ver [3]) conserva las partes homogéneas y ello reduce considerablemente el esfuerzo requerido para calcular las bases de los espacios $\mathcal{P}_d^*(i_1, \dots, i_j)$, necesarias para partir el sistema de las ecuaciones de los momentos, lo que facilita la obtención de fórmulas de cuadratura invariantes.

Finalmente, debemos señalar que la hipótesis de que el tetraedro esté centrado en el origen no representa ninguna restricción en la aplicabilidad de las fórmulas obtenidas, que en realidad son válidas para cualquier tetraedro. Este hecho sólo se usa para poder trabajar con una base de polinomios invariantes que conserve las partes homogéneas, facilitando y simplificando los cálculos intermedios.

Bibliografía

[1] R. Cools and P. Rabinowitz, *Monomial cubature rules since Stroud: a compilation*, J. Comp. Appl. Math. **48** (1993), 309–326.

[2] J. I. Maeztu and E. Sainz de la Maza, *Quasi-optimal consistent structures of invariant quadrature rules for the n-simplex*, Tech. Report NA 94-7, Universidad del País Vasco, Dept. of Appl. Math. and Stat., Apdo. 644, 48080-Bilbao, Spain, 1994.

[3] J. I. Maeztu and E. Sainz de la Maza, *Consistent structures of invariant quadrature rules for the n-simplex*, Math. Comp. (aparecerá) (1995).

[4] E. Sainz de la Maza and J. I. Maeztu, *An invariant quadrature rule of degree 11 for the tetrahedron*, (en proceso de publicación) (1995).

[5] A. H. Stroud, *Approximate calculation of multiple integrals*, Prentice-Hall, New Jersey, 1971.