



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO  
TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS  
Diretoria de Pesquisa e Pós-Graduação

Programa de Pós-Graduação em Modelagem  
Matemática e Computacional

# QUADRATURA DE GAUSS ITERATIVA COM BASE NOS POLINÔMIOS ORTOGONAIS CLÁSSICOS

Dissertação de Mestrado, submetida ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática e Computacional.

**Aluno:** Lourenço de Lima Peixoto (Licenciado em Matemática - UFU)

**Orientador:** Prof. Dr. João Francisco de Almeida Vitor (CEFET-MG)

**Co-Orientador:** Prof. Dr. Frederico Ferreira Campos, filho (UFMG)

Belo Horizonte, 9 de dezembro, 2008.

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

# *Agradecimentos*

Primeiramente a Deus, pela oportunidade de realizar este trabalho.

Aos meus queridos pais Antônio Carlos e Márcia, ao Geraldinho e à Melina. Sem vocês eu nada seria.

À minha tia Marta pelo apoio desde os tempos da faculdade.

Aos demais familiares e amigos que, de perto ou de longe, também acompanharam-me nos momentos difíceis.

Agradeço pela compreensão de todos vocês durante os muitos períodos de minha ausência em virtude deste trabalho.

Ao caro professor João Francisco pelo estímulo e por acreditar em mim desde o começo. Especialmente, por permitir que minha pesquisa percorresse o campo da Análise Numérica, assunto que despertou-me interesse desde a graduação.

Ao estimado professor Frederico pela amizade, por todo incentivo desde o primeiro instante, pela dedicação, pela sintonia, pela força e por tudo mais que me fez crescer. A ele, toda minha gratidão.

Aos meus colegas Neila, Tatiane, José Hélio, Emerson, Sinaide, José Sérgio, Bruno, Marta e outros.

À vida por ter colocado todas essas pessoas no meu caminho.

A todos, meu sinceros agradecimentos.

À CAPES pelo auxílio financeiro.

*"Os nossos problemas  
não podem ser resolvidos no mesmo  
nível de pensamento com os quais os criamos."*

*Albert Einstein*

# *Resumo*

Freqüentemente as integrais definidas são usadas como ferramentas essenciais na resolução de problemas de natureza matemática, física, computacional, dentre outras. No entanto, é comum deparar-se com integrais de funções que não possuem antiderivada explícita ou cuja antiderivada não é simples de se obter. Nestas situações é conveniente fazer uso das quadraturas. A quadratura de Gauss utiliza os zeros dos polinômios ortogonais como sendo os pontos do somatório e os coeficientes deste último são obtidos por resultados relacionados aos polinômios. Neste trabalho, são apresentados os polinômios ortogonais clássicos e as quadraturas de Gauss com base sobre estes: Gauss-Legendre, Gauss-Laguerre, Gauss-Laguerre generalizada, Gauss-Hermite, Gauss-Jacobi, Gauss-Chebyshev de 1<sup>a</sup> e de 2<sup>a</sup> espécies e Gauss-Gegenbauer. São desenvolvidos os algoritmos para as quadraturas e suas respectivas implementações. Para a obtenção dos zeros e dos coeficientes são apresentadas duas classes de algoritmos, as quais têm eficiências comparadas em cada uma das quadraturas. Elabora-se um método que identifica a quadratura com os respectivos algoritmos mais eficientes. Fundamentado num esquema de integração iterativo e não-adaptativo proposto por Campos (2007), apresenta-se a quadratura iterativa de Gauss: uma regra de integração que fornece o resultado de uma quadratura com uma tolerância predefinida para o erro. Sobre a quadratura iterativa são realizados vários cálculos de integrais com diversos tipos de funções.

**Palavras-chave:** polinômios ortogonais, quadratura de Gauss, integração iterativa.

# *Abstract*

Frequently the definite integrals are used like essential tools in the resolution of problems of mathematical, physical, computational nature, among others. Although, it is common to come across integrals of functions that have not explicit antiderivative or whose antiderivative is not simple to be obtained. In these situations it is convenient the use of the quadratures. The Gaussian quadrature uses the zeros of the orthogonal polynomials like being the points of the sum and the coefficients of this last are obtained by results related to the polynomials. This work presents the classical orthogonal polynomials and then Gaussian quadrature based on these: Gauss-Legendre, Gauss-Laguerre, generalized Gauss-Laguerre, Gauss-Hermite, Gauss-Jacobi, Gauss-Chebyshev of 1<sup>st</sup> and of 2<sup>nd</sup> kinds and Gauss-Gegenbauer. The algorithms are developed for the quadratures and it's respective implementations. For the attainment of zeros and of the coefficients two classes of algorithms are presented, and they have efficiencies compared in each one of quadratures. It elaborates a method that identifies the quadrature in respect with a more efficient algorithms. Based on a scheme of integration iterative and nonadaptive introduced by Campos (2007), it presents the iterative Gaussian quadrature: a rule of integration that supplies the result of a quadrature with one tolerance predefined for the error. Upon the iterative quadrature several calculations of integrals are carried out with several types of functions.

**Keywords:** orthogonal polynomials, Gaussian quadrature, iterative integration.

# *Sumário*

<b>Lista de Figuras</b>	p. ix
<b>Lista de Tabelas</b>	p. xiii
<b>1 Introdução</b>	p. 1
1.1 A quadratura numérica . . . . .	p. 1
1.2 A relação entre polinômios ortogonais e quadratura de Gauss . . . . .	p. 3
1.2.1 Diferentes algoritmos para zeros e coeficientes . . . . .	p. 3
1.3 O erro de uma quadratura . . . . .	p. 4
1.4 Descrição dos próximos capítulos . . . . .	p. 5
<b>2 Polinômios ortogonais</b>	p. 6
2.1 Propriedades . . . . .	p. 6
2.2 Polinômios de Legendre . . . . .	p. 23
2.3 Polinômios de Laguerre generalizados . . . . .	p. 28
2.4 Polinômios de Laguerre . . . . .	p. 32
2.5 Polinômios de Hermite . . . . .	p. 34
2.6 Polinômios de Jacobi . . . . .	p. 37
2.7 Polinômios de Chebyshev de 1 <sup>a</sup> espécie . . . . .	p. 41
2.8 Polinômios de Chebyshev de 2 <sup>a</sup> espécie . . . . .	p. 46
2.9 Polinômios de Gegenbauer . . . . .	p. 50
<b>3 Interpolação e quadratura de Hermite</b>	p. 54

3.1	Interpolação de Hermite . . . . .	p. 54
3.2	Quadratura de Hermite . . . . .	p. 58
<b>4</b>	<b>Quadratura de Gauss</b>	<b>p. 60</b>
4.1	Teoremas . . . . .	p. 60
4.2	Quadratura de Gauss-Legendre . . . . .	p. 68
4.3	Quadratura de Gauss-Laguerre generalizada . . . . .	p. 69
4.4	Quadratura de Gauss-Laguerre . . . . .	p. 70
4.5	Quadratura de Gauss-Hermite . . . . .	p. 71
4.6	Quadratura de Gauss-Jacobi . . . . .	p. 72
4.7	Quadratura de Gauss-Chebyshev de 1 <sup>a</sup> espécie . . . . .	p. 73
4.8	Quadratura de Gauss-Chebyshev de 2 <sup>a</sup> espécie . . . . .	p. 75
4.9	Quadratura de Gauss-Gegenbauer . . . . .	p. 77
<b>5</b>	<b>Algoritmos e implementações da quadratura de Gauss</b>	<b>p. 80</b>
5.1	Algoritmos para zeros $x_i$ e coeficientes $H_i$ . . . . .	p. 80
5.2	Transferência de intervalos . . . . .	p. 89
5.2.1	Quadraturas de Gauss no intervalo $[c, d]$ . . . . .	p. 89
5.2.2	Quadratura de Gauss no intervalo $[c, \infty)$ . . . . .	p. 91
5.3	Algoritmos para integração numérica . . . . .	p. 92
5.4	Implementações . . . . .	p. 96
5.4.1	Algumas considerações sobre o erro . . . . .	p. 96
5.4.2	Gauss-Legendre . . . . .	p. 97
5.4.3	Gauss-Laguerre generalizada . . . . .	p. 98
5.4.4	Gauss-Laguerre . . . . .	p. 99
5.4.5	Gauss-Hermite . . . . .	p. 100
5.4.6	Gauss-Jacobi . . . . .	p. 101

5.4.7	Gauss-Chebyshev de 1ª espécie . . . . .	p. 102
5.4.8	Gauss-Chebyshev de 2ª espécie . . . . .	p. 103
5.4.9	Gauss-Gegenbauer . . . . .	p. 104
5.5	Algoritmos e implementações via matriz de Jacobi . . . . .	p. 105
5.5.1	Implementações . . . . .	p. 109
5.6	Validação dos algoritmos para zeros e coeficientes . . . . .	p. 113
5.7	A escolha do método mais eficiente . . . . .	p. 116
5.7.1	Método mais eficiente para integração numérica . . . . .	p. 118
5.7.2	Casos especiais de integrando no infinito . . . . .	p. 119
<b>6</b>	<b>Quadratura iterativa</b> . . . . .	p. 121
6.1	Algoritmo <b>gauss_iterativo</b> . . . . .	p. 121
6.2	Programa QUAD_ITER . . . . .	p. 126
6.2.1	Um caso especial . . . . .	p. 131
<b>7</b>	<b>Conclusões gerais e futuros trabalhos</b> . . . . .	p. 133
7.1	Contribuição da quadratura iterativa . . . . .	p. 133
7.2	Contribuições práticas deste trabalho . . . . .	p. 134
7.3	Zeros e coeficientes da quadratura de Gauss . . . . .	p. 135
7.4	Comparações entre quadraturas . . . . .	p. 136
7.5	Trabalhos futuros . . . . .	p. 137
	<b>Referências</b> . . . . .	p. 140

## *Lista de Figuras*

1	$\int_a^b f(x) dx = \text{área.}$ . . . . .	p. 2
2	Aproximação da integral por retângulos de base $H_i$ e altura $f(x_i)$ . . . . .	p. 3
3	Polinômios de Legendre de grau até 5. . . . .	p. 25
4	Polinômios de Laguerre generalizados de grau até 5 com $\alpha = 1$ . . . . .	p. 30
5	Polinômios de Laguerre de grau até 5. . . . .	p. 33
6	Polinômios de Hermite de grau até 4. . . . .	p. 35
7	Polinômios de Chebyshev de 1ª espécie de grau até 5. . . . .	p. 42
8	Polinômios de Chebyshev de 2ª espécie de grau até 5. . . . .	p. 47
9	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Legendre. . . . .	p. 82
10	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Laguerre generalizada. . . . .	p. 83
11	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Laguerre. . . . .	p. 84
12	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Hermite. . . . .	p. 85
13	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Jacobi. . . . .	p. 86
14	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Chebyshev de 1ª espécie. . . . .	p. 87
15	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Chebyshev de 2ª espécie. . . . .	p. 87
16	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Gegenbauer. . . . .	p. 88
17	Transferência do intervalo $[c, d]$ para $[-1, 1]$ onde $x = \frac{2t - c - d}{d - c}$ . . . . .	p. 89
18	Transferência do intervalo $[c, \infty)$ para $[0, \infty)$ onde $x = t - c$ . . . . .	p. 92
19	Algoritmo para quadratura de Gauss-Legendre. . . . .	p. 93
20	Algoritmo para quadratura de Gauss-Laguerre generalizada. . . . .	p. 93
21	Algoritmo para quadratura de Gauss-Laguerre. . . . .	p. 93

22	Algoritmo para quadratura de Gauss-Hermite. . . . .	p.94
23	Algoritmo para quadratura de Gauss-Jacobi. . . . .	p.94
24	Algoritmo para quadratura de Gauss-Chebyshev de 1ª espécie. . . . .	p.94
25	Algoritmo para quadratura de Gauss-Chebyshev de 2ª espécie. . . . .	p.95
26	Algoritmo para quadratura de Gauss-Gegenbauer. . . . .	p.95
27	$\int_0^{2\pi} t \operatorname{sen}(t) dt$ via Gauss-Legendre. . . . .	p.97
28	$\int_0^{2\pi} t \operatorname{sen}(15t) dt$ via Gauss-Legendre. . . . .	p.97
29	$\int_0^{\infty} e^{-t} t \operatorname{sen}(t) dt$ via Gauss-Laguerre generalizada. . . . .	p.98
30	$\int_0^{\infty} e^{-t} t \operatorname{sen}(3t) dt$ via Gauss-Laguerre generalizada. . . . .	p.98
31	$\int_{\pi}^{\infty} e^{-t} \cos(t) dt$ via Gauss-Laguerre. . . . .	p.99
32	$\int_{\pi}^{\infty} e^{-t} \cos(3t) dt$ via Gauss-Laguerre. . . . .	p.99
33	$\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^3(t) dt$ via Gauss-Hermite. . . . .	p.100
34	$\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^4(t) dt$ via Gauss-Hermite. . . . .	p.100
35	$\int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt$ via Gauss-Jacobi. . . . .	p.101
36	$\int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt$ via Gauss-Jacobi. . . . .	p.101
37	$\int_0^1 \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{(1-t)t}} dt$ via Gauss-Chebyshev de 1ª espécie. . . . .	p.102
38	$\int_0^1 \frac{t^{\frac{9}{2}}}{\sqrt{(1-t)t}} dt$ via Gauss-Chebyshev de 1ª espécie. . . . .	p.102
39	$\int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{7}{2}} dt$ via Gauss-Chebyshev de 2ª espécie. . . . .	p.103
40	$\int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{9}{2}} dt$ via Gauss-Chebyshev de 2ª espécie. . . . .	p.103

41	$\int_0^1 ((1-t)t)^{\frac{3}{2}} t^{\frac{7}{2}} dt$ via Gauss-Gegenbauer. . . . .	p.104
42	$\int_0^1 ((1-t)t)^2 t^{\frac{5}{3}} dt$ via Gauss-Gegenbauer. . . . .	p.104
43	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Legendre pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p.105
44	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Laguerre generalizada pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p.106
45	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Laguerre pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p.106
46	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Hermite pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p.106
47	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Jacobi pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p.107
48	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Chebyshev de 1ª espécie pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p.107
49	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Chebyshev de 2ª espécie pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p.108
50	Algoritmo para $x_i$ e $H_i$ de Gauss-Gegenbauer pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p.108
51	Percentual de zeros com precisão $10^{-15}$ e $10^{-14}$ em <code>zero_h_hermite</code> . . . . .	p.114
52	Percentual de zeros com precisão $10^{-15}$ a $10^{-12}$ em <code>zero_h_laguerre</code> . . . . .	p.115
53	Procedimento para escolha do método mais eficiente. . . . .	p.119
54	Diferença e erro relativos em Gauss-Legendre. . . . .	p.122
55	Diferença e erro relativos em Gauss-Laguerre generalizada. . . . .	p.122
56	Diferença e erro relativos em Gauss-Laguerre. . . . .	p.123
57	Diferença e erro relativos em Gauss-Hermite. . . . .	p.123
58	Diferença e erro relativos em Gauss-Jacobi. . . . .	p.123
59	Diferença e erro relativos em Gauss-Chebyshev de 1ª espécie. . . . .	p.124
60	Diferença e erro relativos em Gauss-Chebyshev de 2ª espécie. . . . .	p.124
61	Diferença e erro relativos em Gauss-Gegenbauer. . . . .	p.124
62	Algoritmo para quadratura iterativa. . . . .	p.126
63	$\int_0^{10} e^{-t^2} dt$ via Gauss-Legendre. . . . .	p.128
64	$\int_{-3}^4 \frac{(4-t)\text{sen}(e^{2t})}{\sqrt{t+3}} dt$ via Gauss-Jacobi. . . . .	p.128

65	$\int_{-2}^{10} \frac{\cos(t^3) \operatorname{sen}(3t^2)}{\sqrt{(10-t)(t+2)}} dt$ via Gauss-Chebyshev de 1ª espécie. . . . .	p. 129
66	$\int_0^9 \sqrt{(9-t)t} \cos(e^t) dt$ via Gauss-Chebyshev de 2ª espécie. . . . .	p. 129
67	$\int_{-1}^8 \frac{e^{\operatorname{sen}(5t^2)}}{\sqrt[5]{(8-t)(t+1)}} dt$ via Gauss-Gegenbauer. . . . .	p. 130
68	$\int_2^\infty \frac{2e^{-t^2}}{\sqrt{\pi}} dt$ via Gauss-Laguerre. . . . .	p. 130
69	$\int_{-\infty}^\infty e^{-t^2(t^2+1)} t^4 dt$ via Gauss-Hermite. . . . .	p. 131
70	Integral nula via QUAD_ITER. . . . .	p. 131
71	1/3 de Simpson composta $\times$ Gauss-Legendre. . . . .	p. 136
72	Comparações entre convergências. . . . .	p. 137

# *Lista de Tabelas*

1	Quadraturas de Gauss. . . . .	p. 90
2	Erro $E_{r,g}$ das quadraturas de Gauss. . . . .	p. 91
3	$\int_0^{2\pi} t \operatorname{sen}(t) dt$ via Gauss-Legendre pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 109
4	$\int_0^{2\pi} t \operatorname{sen}(15t) dt$ via Gauss-Legendre pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 109
5	$\int_0^{\infty} e^{-t} t \operatorname{sen}(t) dt$ via Gauss-Laguerre generalizada pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 109
6	$\int_0^{\infty} e^{-t} t \operatorname{sen}(3t) dt$ via Gauss-Laguerre generalizada pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 110
7	$\int_{\pi}^{\infty} e^{-t} \cos(t) dt$ via Gauss-Laguerre pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 110
8	$\int_{\pi}^{\infty} e^{-t} \cos(3t) dt$ via Gauss-Laguerre pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 110
9	$\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^3(t) dt$ via Gauss-Hermite pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 110
10	$\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^4(t) dt$ via Gauss-Hermite pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 110
11	$\int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt$ via Gauss-Jacobi pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 111
12	$\int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt$ via Gauss-Jacobi pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 111
13	$\int_0^1 \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{(1-t)t}} dt$ via Gauss-Chebyshev de 1ª espécie pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 111
14	$\int_0^1 \frac{t^{\frac{9}{2}}}{\sqrt{(1-t)t}} dt$ via Gauss-Chebyshev de 1ª espécie pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 111
15	$\int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{7}{2}} dt$ via Gauss-Chebyshev de 2ª espécie pela matriz $\mathbf{J}_r$ . . . . .	p. 112

16	$\int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{9}{2}} dt$ via Gauss-Chebyshev de 2ª espécie pela matriz $\mathbf{J}_r$ .	p. 112
17	$\int_0^1 ((1-t)t)^{\frac{3}{2}} t^{\frac{7}{2}} dt$ via Gauss-Gegenbauer pela matriz $\mathbf{J}_r$ .	p. 112
18	$\int_0^1 ((1-t)t)^2 t^{\frac{5}{3}} dt$ via Gauss-Gegenbauer pela matriz $\mathbf{J}_r$ .	p. 112
19	$w(t)$ em cada intervalo de integração.	p. 116
20	$w(t)$ do tipo Jacobi.	p. 117
21	Comparação entre diferença e erro relativos.	p. 121
22	Diferença e erro relativos com valores de $r$ não consecutivos.	p. 125

# 1 *Introdução*

O objetivo deste trabalho é versar sobre os seguintes aspectos relacionados às quadraturas de Gauss: as principais ferramentas teóricas (definições, teoremas, corolários etc.) envolvidos neste método; a aplicabilidade no cálculo de integrais com intervalos finitos, semi-infinitos e duplamente infinitos, incluindo integrais com singularidades nos extremos de integração; os algoritmos e implementações para a integração; a comparação entre as eficiências de dois algoritmos e o erro cometido pela quadratura. Por fim, é apresentada a quadratura iterativa de Gauss – um esquema de integração iterativo e não-adaptativo que objetiva fornecer o resultado da quadratura com uma tolerância predefinida para o erro.

Neste capítulo são apresentados um resumo sobre a origem das quadraturas além da relação entre a quadratura de Gauss e os polinômios ortogonais. A questão do erro cometido pela aproximação também é apresentada. A Seção 1.4 apresenta os conteúdos que serão tratados nos próximos capítulos.

## 1.1 A quadratura numérica

Os problemas de quadratura consistem em aproximar a área de uma figura dada construindo outra figura geométrica de mesma área. Estes problemas já eram de interesse desde os tempos do matemático grego Arquimedes (287-212 a.C.). Inscrevendo e circunscrevendo polígonos regulares com cada vez mais lados em um círculo, Arquimedes chegou à conclusão de que  $\pi$  estava entre  $\frac{223}{71}$  e  $\frac{22}{7}$  ou que, até a segunda casa decimal,  $\pi$  era dado por 3,14. Por meio de aproximações como esta os antigos calculavam áreas de figuras planas. Ao longo dos séculos, especialmente no século XVII, com o advento do cálculo diferencial e integral, por Isaac Newton e Gottfried Wilhelm Leibniz, o cálculo de comprimentos, áreas e volumes foi recebendo um tratamento mais refinado (Eves, 2004).

Um dos principais conceitos do cálculo integral, a integral definida  $\int_a^b f(x) dx$ , é dada

pelas medidas das áreas entre a curva  $f(x)$  e o eixo  $x$ , acima deste (Figura 1), menos as áreas entre a curva  $f(x)$  e o eixo  $x$ , abaixo deste, em  $[a, b]$ .

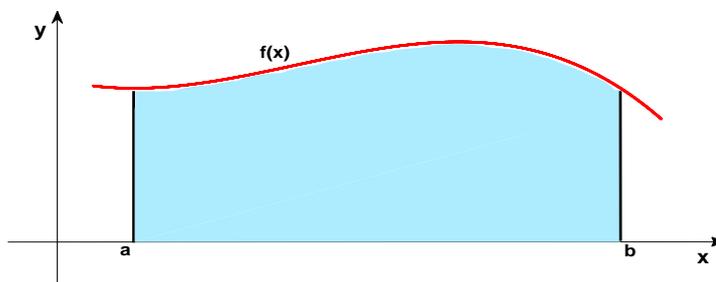


Figura 1:  $\int_a^b f(x) dx = \text{área.}$

Do *Teorema Fundamental do Cálculo* tem-se que o valor da integral definida é dado por

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a),$$

onde  $F(x)$  é a primitiva (ou antiderivada) de  $f(x)$ . Se a antiderivada é prontamente obtida e suficientemente simples, o cálculo da integral está resolvido. Este processo de resolução é chamado de processo analítico e envolve uma série de regras normalmente estudadas nos cursos de Cálculo. Por outro lado,  $F(x)$  pode ser de difícil obtenção e requerer muitas operações sucessivas, ou ainda, a primitiva pode não ser expressa por uma combinação finita de outras funções algébricas, logarítmicas ou exponenciais, como no caso em que  $f(x) = e^{-x^2}$ . Nestas situações, é indispensável recorrer a métodos de aproximação.

Os métodos que tratam de aproximar integrais envolvem uma combinação linear<sup>1</sup> de avaliações do integrando

$$\int_a^b f(x) dx \approx H_1 f(x_1) + H_2 f(x_2) + \dots + H_r f(x_r), \quad -\infty \leq a < b \leq \infty. \quad (1.1)$$

Os valores  $x_1, x_2, \dots, x_r$  são chamados de nós ou abscissas e os números reais  $H_1, H_2, \dots, H_r$  são os respectivos coeficientes. O somatório na equação (1.1) consiste em aproximar a integral pela soma das áreas<sup>2</sup> de retângulos de base  $H_i$  e altura  $f(x_i)$ . Num sentido mais amplo, este somatório é uma quadratura (Figura 2).

Segundo Davis e Rabinowitz (1984), integração numérica é o estudo de como o valor numérico de uma integral pode ser encontrado. Assim, a expressão no lado direito de (1.1) é uma integração numérica, também chamada de *regra de integração, quadratura*

<sup>1</sup>Combinações não lineares ocorrem ocasionalmente.

<sup>2</sup>Assumindo a existência de áreas negativas caso  $f(x_i) < 0$ .

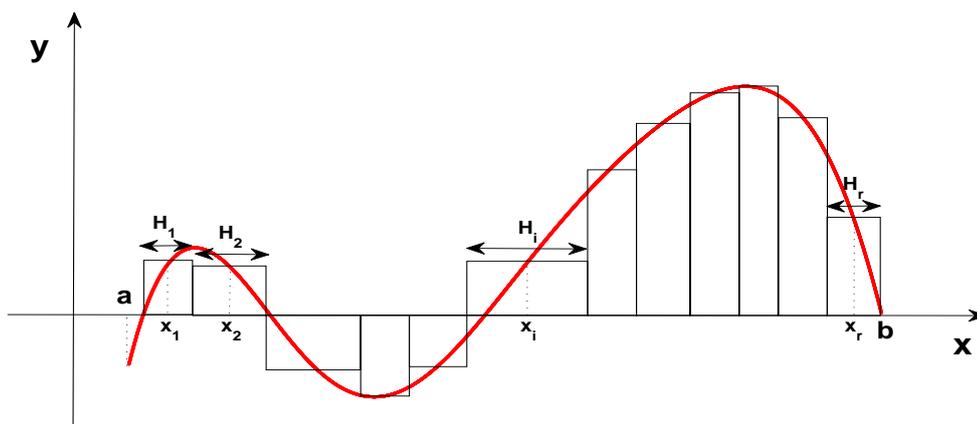


Figura 2: Aproximação da integral por retângulos de base  $H_i$  e altura  $f(x_i)$ .

*mecânica* ou *quadratura numérica*, como será tratada neste trabalho.

## 1.2 A relação entre polinômios ortogonais e quadratura de Gauss

Na quadratura de Gauss, as abscissas  $x_i$  do somatório são tomadas como sendo os zeros de um polinômio ortogonal. Uma seqüência de polinômios ortogonais é definida com uma função peso (também denominada por *medida*)  $w(x)$  sobre um intervalo real  $[a, b]$ . Os polinômios ortogonais que serão apresentados neste trabalho são: os polinômios de Jacobi (incluindo casos particulares de Legendre, de Chebyshev<sup>3</sup> de 1ª e de 2ª espécies e de Gegenbauer), de Hermite e de Laguerre generalizados.

A quadratura de Gauss está diretamente associada a esses polinômios pela função peso  $w(x)$  e pelo intervalo de integração  $[a, b]$  da seguinte forma:

$$\int_a^b w(x)f(x) dx \approx H_1f(x_1) + H_2f(x_2) + \dots + H_rf(x_r), \quad -\infty \leq a < b \leq \infty.$$

### 1.2.1 Diferentes algoritmos para zeros e coeficientes

Este trabalho apresenta dois métodos diferentes que são usados freqüentemente na obtenção dos zeros  $x_i$  e coeficientes  $H_i$ : um é baseado no método de Newton e o outro no cálculo de autovalores e autovetores. Serão comparadas as eficiências de ambos os métodos para as quadraturas de Gauss tratadas neste trabalho.

<sup>3</sup>Adota-se esta versão inglesa do nome russo, há também a versão Tschebyscheff, do alemão.

## 1.3 O erro de uma quadratura

Como em toda aproximação, o erro cometido é sempre um parâmetro cobijado. O erro  $E_r$  cometido numa quadratura surge do fato de que o somatório é aproximadamente igual à integral:

$$\int_a^b w(x)f(x) dx = \sum_{i=1}^r H_i f(x_i) + E_r.$$

É por intermédio de uma estimativa de  $E_r$  que o cálculo da quadratura torna-se significativo. Sem este parâmetro não é possível estabelecer um grau de confiança no resultado. O erro também é utilizado na comparação da precisão de diferentes métodos.

A fórmula de  $E_r$  da quadratura de Gauss é um parâmetro de difícil tratamento em virtude do cálculo da derivada de alta ordem. É possível estimar este parâmetro por meio da teoria de diferenças divididas ou por meio de integrais de funções analíticas no plano complexo, todavia, persistirão os cálculos e operações excessivas.

Por outro lado, numa quadratura convergente qualquer, existe uma forma mais prática para se estimar o erro  $E_r$  cometido na aproximação com  $r$  abscissas, através do cálculo do módulo da diferença entre os resultados da quadratura com  $r$  e  $s$  abscissas, sendo  $s > r$ :

$$E_r \approx \left| \sum_{j=1}^s H_j f(x_j) - \sum_{i=1}^r H_i f(x_i) \right|, \quad s > r. \quad (1.2)$$

Usualmente, as estimativas para o erro nos esquemas de integração têm fundamento na aproximação (1.2). Um esquema de integração pode ser classificado como adaptativo ou não-adaptativo e iterativo ou não-iterativo. Num esquema adaptativo, a quantidade de abscissas do somatório e a localização delas no eixo real está condicionada à natureza do integrando, enquanto que, no esquema não-adaptativo, as abscissas independem de sua natureza. Num esquema iterativo são obtidas aproximações sucessivas para a integral até que a tolerância especificada seja satisfeita. No esquema não-iterativo uma primeira aproximação é usada para produzir uma segunda que, por sua vez, é dada como o resultado final (Davis e Rabinowitz, 1984).

Segundo Berntsen e Espelid (1991), desde que o primeiro algoritmo de integração automática<sup>4</sup> foi concebido, em 1963, por McKeeman<sup>5</sup>, muitos novos e sofisticados algoritmos

<sup>4</sup>Um programa de integração automática calcula uma integral sendo fornecidos os limites de integração, a rotina para avaliar a função  $f(x)$ , uma tolerância  $\epsilon$  para o erro e o limite máximo de iterações. O parâmetro de saída é o valor da integral quando a tolerância  $\epsilon$  for satisfeita ou quando o número máximo de iterações for atingido.

<sup>5</sup>McKeeman, W. M. Certification of algorithm 145. Adaptive numerical integration by Simpson's rule. *Commun. ACM* 6 (1963), 167-168.

de tais integrações, dentre adaptativos e não-adaptativos, têm sido desenvolvidos. Por exemplo, Campos (2007) apresenta um algoritmo de integração automática cujo esquema é iterativo e não-adaptativo para a quadratura de Gauss-Legendre.

Com base no esquema proposto por Campos, este trabalho apresenta a quadratura iterativa de Gauss: um esquema iterativo e não-adaptativo que fornece o resultado da integração dada uma tolerância para o erro. Este método é utilizável em todos os casos das quadraturas de Gauss de medidas clássicas.

## 1.4 Descrição dos próximos capítulos

O Capítulo 2 destina-se a abordar os principais aspectos teóricos sobre os polinômios ortogonais que têm implicações sobre a quadratura de Gauss, além de apresentar os polinômios ortogonais clássicos.

O Capítulo 3 introduz a interpolação e a quadratura de Hermite, conceitos essenciais para a formulação da quadratura de Gauss.

O Capítulo 4 é dedicado à apresentação das fórmulas das quadraturas de Gauss com medidas clássicas.

No Capítulo 5 são apresentados os algoritmos para as quadraturas e são realizados experimentos numéricos. São ainda comparadas as eficiências de dois tipos de algoritmos usados numa quadratura de Gauss, discute-se a aplicabilidade das quadraturas para uma dada integral. Dentre os algoritmos apresentados, é elaborado um método capaz de identificar a quadratura e o respectivo algoritmo mais eficiente.

No Capítulo 6 são apresentados a quadratura iterativa e o programa `QUAD_ITER` que calcula a integral via quadratura iterativa de Gauss por intermédio do método proposto no Capítulo 5. Com este programa são realizados experimentos com integrais impróprias e de difícil obtenção.

As conclusões e propostas para futuros trabalhos constam do Capítulo 7, seguido das referências bibliográficas.

## 2 *Polinômios ortogonais*

Historicamente, os polinômios ortogonais têm origem na teoria de frações contínuas. Esta relação é de grande importância e é um dos possíveis pontos de partida para o tratamento dos polinômios ortogonais (Andrade e Bracciali, 2005). No presente trabalho, a abordagem destes polinômios surge com a fórmula de Rodrigues.

Este capítulo é dividido em duas partes: a primeira destina-se a apresentar a fórmula de Rodrigues e algumas propriedades dos polinômios ortogonais que terão implicações na quadratura de Gauss, a segunda parte apresenta os polinômios de Jacobi (incluindo casos particulares de Legendre, de Chebyshev de 1ª e 2ª espécies e de Gegenbauer), de Hermite, de Laguerre e de Laguerre generalizado.

Tais polinômios foram considerados por Szegő (1975) como sendo polinômios ortogonais clássicos. A obra clássica de Szegő (1975) é considerada a melhor referência sobre o assunto dissertando sobre os polinômios ortogonais de medidas clássicas e sobre os polinômios ortogonais no círculo unitário. Especificamente serão expostos somente os principais resultados dos polinômios ortogonais que dizem respeito à quadratura de Gauss. Os empregos destes polinômios à Análise Aplicada são muitas e novas aplicações surgem a todo momento (Bracciali e Andrade, 2006).

As principais obras consultadas para as definições, teoremas e corolários apresentados neste capítulo foram Szegő (1975), Hildebrand (1974), Wilf (1978) e Bracciali e Andrade (2006). Procurou preservar-se, na medida do possível, as notações que constam da obra de Hildebrand (1974).

### 2.1 Propriedades

Seja  $\alpha(x)$  uma função real limitada, não decrescente e com infinitos pontos de aumento sobre o intervalo finito ou infinito  $[a, b]$ , tal que os momentos

$$\mu_k = \int_a^b x^k d\alpha(x), \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

existem e são finitos. Então, se  $\alpha(x)$  for contínua,  $d\alpha(x) = w(x) dx$ . No senso deste trabalho,  $w(x)$  é chamada de função peso (ou medida) com a propriedade  $w(x) \geq 0$  e também é diferente da função identicamente nula em  $[a, b]$ .

Seja  $\mathbb{P}_r$  o espaço de todos polinômios algébricos de grau menor ou igual a  $r$ .

**Definição 2.1 (Seqüência de polinômios ortogonais)** *Uma seqüência de polinômios  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$  pertencentes ao  $\mathbb{P}_n$  é uma seqüência de polinômios ortogonais em relação à função peso  $w(x)$  sobre o intervalo real  $[a, b]$ <sup>1</sup>, se*

$$(i) \quad \phi_r(x) = \sum_{i=0}^r A_{r,i} x^i \text{ possuir grau exatamente } r, \text{ isto é, } A_{r,r} \neq 0,$$

$$(ii) \quad \langle \phi_k(x), \phi_r(x) \rangle = \int_a^b w(x) \phi_k(x) \phi_r(x) dx = \begin{cases} 0, & \text{se } r \neq k, \\ \gamma_{\phi_r} \neq 0, & \text{se } r = k. \end{cases}$$

■

O termo  $A_{r,i}$  representa o coeficiente em  $x^i$  do polinômio  $\phi_r(x)$ . O coeficiente dominante  $A_{r,r}$  também é denotado por  $A_r$ . Quando  $A_r = 1$ , o polinômio  $\phi_r(x)$  é chamado de polinômio ortogonal mônico denotado por  $\psi_r(x)$ .

Uma vez que a função peso  $w(x) \geq 0$  no intervalo  $[a, b]$ , segue que

$$\gamma_{\phi_r} = \int_a^b w(x) [\phi_r(x)]^2 dx > 0. \quad (2.1)$$

**Definição 2.2 (Seqüência de polinômios ortonormais)** *Uma seqüência  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$  é chamada de seqüência de polinômios ortonormais, denotada por  $\{\phi_r^*(x)\}_{r=0}^{\infty}$  se, na Definição 2.1,  $\gamma_{\phi_r} = 1$ .* ■

**Teorema 2.1** *Os polinômios  $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots, \phi_k(x)$ , pertencentes a uma seqüência de polinômios ortogonais  $\{\phi_i(x)\}_{i=0}^k$ , são linearmente independentes no  $\mathbb{P}_k$ .*

**Demonstração:** Sejam  $B_i, i = 0, 1, \dots, k$ , constantes reais tais que  $\sum_{i=0}^k B_i \phi_i(x) = 0$ .

Logo, para cada polinômio  $\phi_j(x), 0 \leq j \leq k$ , tem-se que

$$\int_a^b w(x) \left( \sum_{i=0}^k B_i \phi_i(x) \right) \phi_j(x) dx = 0,$$

<sup>1</sup>Caso  $a = -\infty$  ou  $b = \infty$ , assume-se, sem perda de generalidade, que o intervalo é aberto neste(s) extremo(s).

$$\sum_{i=0}^k B_i \int_a^b w(x) \phi_i(x) \phi_j(x) dx = 0.$$

Pela Definição 2.1, tem-se que

$$\int_a^b w(x) \phi_i(x) \phi_j(x) dx = 0 \quad \text{para } i \neq j, \quad \text{e} \quad \gamma_{\phi_j} = \int_a^b w(x) \phi_j(x) \phi_j(x) dx > 0.$$

Logo,

$$\sum_{i=0}^k B_i \int_a^b w(x) \phi_i(x) \phi_j(x) dx = B_j \gamma_{\phi_j} = 0.$$

Portanto,  $B_j = 0$ ,  $j = 0, 1, \dots, k$ . ■

O teorema anterior garante que os polinômios ortogonais  $\phi_i(x)$ ,  $i = 0, 1, \dots, r$  formam uma base para  $\mathbb{P}_r$ . Isto também se deve ao fato de que os polinômios são de graus diferentes.

Seja  $q_{r-1}(x)$  um polinômio arbitrário de grau  $r - 1$  ou menor. Pelo Teorema 2.1,  $q_{r-1}(x)$  é uma combinação linear dos polinômios ortogonais pertencentes a  $\{\phi_i(x)\}_{i=0}^{r-1}$ , isto é,  $q_{r-1}(x) = \sum_{i=0}^{r-1} \mathcal{B}_i \phi_i(x)$ . Por outro lado, pela Definição 2.1,

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{r-1} \mathcal{B}_i \int_a^b w(x) \phi_i(x) \phi_r(x) dx &= 0, \\ \int_a^b w(x) \sum_{i=0}^{r-1} \mathcal{B}_i \phi_i(x) \phi_r(x) dx &= 0, \\ \int_a^b w(x) q_{r-1}(x) \phi_r(x) dx &= 0. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Agora, seja  $q_r$  um polinômio de grau  $r$ , então,  $q_r(x) = \sum_{i=0}^r \mathcal{B}_i \phi_i(x)$ ,  $\mathcal{B}_r \neq 0$ . Neste sentido,

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x) q_r(x) \phi_r(x) dx &= \int_a^b w(x) \sum_{i=0}^r \mathcal{B}_i \phi_i(x) \phi_r(x) dx, \\ &= \sum_{i=0}^r \mathcal{B}_i \int_a^b w(x) \phi_i(x) \phi_r(x) dx, \\ \int_a^b w(x) q_r(x) \phi_r(x) dx &= \mathcal{B}_r \int_a^b w(x) \phi_r(x) \phi_r(x) dx = \mathcal{B}_r \gamma_{\phi_r} \neq 0. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Os resultados dados pelas equações (2.2) e (2.3) mostram que dada uma seqüência

$\{\phi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$ , pode-se afirmar que

$$\int_a^b w(x)q(x)\phi_r(x) dx = \begin{cases} 0, & \forall q(x) \text{ de grau } r-1 \text{ ou menor,} \\ \mathcal{B}_r \gamma_{\phi_r} \neq 0, & \forall q(x) \text{ de grau } r. \end{cases}$$

A recíproca da afirmação acima é verdadeira. De fato, basta tomar  $q(x) = \phi_i(x)$ , para  $i = 0, 1, \dots, r-1$ , e  $q(x) = \mathcal{B}_r \phi_r(x)$ .

**Teorema 2.2** *Sejam  $\{\varphi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$  e  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$  duas seqüências de polinômios ortogonais com relação à função peso  $w(x)$  no intervalo  $[a, b]$ . Então,*

$$\varphi_i(x) = \mathcal{C}_i \phi_i(x), \quad \mathcal{C}_i \in \mathbb{R}^*, \quad i \in \mathbb{N}.$$

**Demonstração:** Uma vez que  $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots, \phi_i(x)$  formam uma base para o espaço vetorial dos polinômios de grau menor ou igual a  $i$ , pode-se expressar  $\varphi_i(x)$  como uma combinação linear desses polinômios, isto é,  $\varphi_i(x) = \sum_{j=0}^i \mathcal{C}_j \phi_j(x)$ ,  $\mathcal{C}_i \neq 0$ . Por outro lado, pela equação (2.2),

$$\int_a^b w(x)\varphi_0(x)\phi_i(x) dx = \int_a^b w(x)\varphi_1(x)\phi_i(x) dx = \dots = \int_a^b w(x)\varphi_{i-1}(x)\phi_i(x) dx = 0.$$

Assim, para  $k = 0, 1, \dots, i-1$ ,

$$0 = \int_a^b w(x)\varphi_i(x)\phi_k(x) dx = \sum_{j=0}^i \mathcal{C}_j \int_a^b w(x)\phi_j(x)\phi_k(x) dx = \mathcal{C}_k \gamma_{\phi_k}.$$

Contudo,  $\gamma_{\phi_k} > 0$ , então  $\mathcal{C}_k = 0$ ,  $k = 0, 1, \dots, i-1$ . Portanto,  $\varphi_i(x) = \mathcal{C}_i \phi_i(x)$ . ■

O teorema anterior mostra que os polinômios de mesmo grau de duas seqüências de polinômios ortogonais definidas com a mesma função peso  $w(x)$  e com o mesmo intervalo  $[a, b]$  são iguais exceto por um fator constante. Particularmente, no caso dos polinômios mônicos  $\psi_r(x)$ , a constante é o coeficiente dominante  $A_r$  de  $\phi_r(x)$ , implicando que

$$\psi_r(x) = \frac{\phi_r(x)}{A_r}. \quad (2.4)$$

A norma de um polinômio  $\phi_k(x)$  pertencente a uma seqüência de polinômios ortogonais  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$  é dada por

$$\|\phi_k(x)\| = \sqrt{\langle \phi_k(x), \phi_k(x) \rangle}$$

e, segundo a notação adotada, a norma fica definida por

$$\sqrt{\gamma_{\phi_k}} = \sqrt{\int_a^b w(x) [\phi_k(x)]^2 dx}. \quad (2.5)$$

Para encontrar uma seqüência de polinômios ortonormais  $\{\phi_r^*(x)\}_{r=0}^\infty$ , basta dividir cada polinômio por sua norma:

$$\phi_r^*(x) = \frac{\phi_r(x)}{\sqrt{\gamma_{\phi_r}}}. \quad (2.6)$$

Além disto, a menos do sinal de  $A_r$ , uma seqüência de polinômios ortonormais construída a partir dos polinômios ortogonais  $\phi_r(x)$  ou dos polinômios mônicos  $\psi_r(x)$  é sempre a mesma:

$$\psi_r^*(x) = \frac{\psi_r(x)}{\sqrt{\gamma_{\psi_r}}} = \frac{\frac{\phi_r}{A_r}}{\sqrt{\int_a^b w(x) \left[\frac{\phi_r(x)}{A_r}\right]^2 dx}} = \frac{\phi_r}{\sqrt{\int_a^b w(x) [\phi_r(x)]^2 dx}} = \frac{\phi_r(x)}{\sqrt{\gamma_{\phi_r}}} = \phi_r^*(x).$$

Definindo

$$V_r^{(r)}(x) = \frac{d^r V_r(x)}{dx^r} \equiv w(x)\phi_r(x), \quad (2.7)$$

a equação (2.2) toma a forma

$$\int_a^b V_r^{(r)}(x) q_{r-1}(x) dx = 0, r \geq 1. \quad (2.8)$$

Desenvolvendo (2.8) pelo emprego da integração por partes,

$$\int_a^b V_r^{(r)}(x) q_{r-1}(x) dx = V_r^{(r-1)}(x) q_{r-1}(x) \Big|_a^b - \int_a^b V_r^{(r-1)}(x) q'_{r-1}(x) dx \quad (2.9)$$

e repetindo o processo para a integral do termo do lado direito na igualdade acima, obtém-se

$$\int_a^b V_r^{(r-1)}(x) q'_{r-1}(x) dx = V_r^{(r-2)}(x) q'_{r-1}(x) \Big|_a^b - \int_a^b V_r^{(r-2)}(x) q''_{r-1}(x) dx.$$

Analogamente, para a integral do termo do lado direito das expressões resultantes,

$$\int_a^b V_r^{(r-2)}(x) q''_{r-1}(x) dx = V_r^{(r-3)}(x) q''_{r-1}(x) \Big|_a^b - \int_a^b V_r^{(r-3)}(x) q^{(3)}_{r-1}(x) dx,$$

⋮

⋮

$$\int_a^b V_r^{(1)}(x) q^{(r-1)}_{r-1}(x) dx = V_r(x) q^{(r-1)}_{r-1}(x) \Big|_a^b - \int_a^b V_r(x) q^{(r)}_{r-1}(x) dx = V_r(x) q^{(r-1)}_{r-1}(x) \Big|_a^b,$$

pois  $q_{r-1}^{(r)}(x) = 0$ . Conseqüentemente, substituindo as  $r - 1$  igualdades acima em (2.9),

$$\int_a^b V_r^{(r)}(x)q_{r-1}(x) dx = \left( V_r^{(r-1)}(x)q_{r-1}(x) - V_r^{(r-2)}(x)q'_{r-1}(x) + V_r^{(r-3)}(x)q''_{r-1}(x) \right. \\ \left. + \dots + (-1)^{r-1}V_r(x)q_{r-1}^{(r-1)}(x) \right) \Big|_a^b.$$

Deste modo (2.8) torna-se

$$\left( V_r^{(r-1)}(x)q_{r-1}(x) - V_r^{(r-2)}(x)q'_{r-1}(x) + V_r^{(r-3)}(x)q''_{r-1}(x) \right. \\ \left. + \dots + (-1)^{r-1}V_r(x)q_{r-1}^{(r-1)}(x) \right) \Big|_a^b = 0. \quad (2.10)$$

Por outro lado, da identidade (2.7), obtém-se a **fórmula de Rodrigues**<sup>2</sup>,

$$\phi_r(x) \equiv \frac{1}{w(x)} \frac{d^r V_r(x)}{dx^r}, \quad (2.11)$$

Como o lado direito da fórmula de Rodrigues é um polinômio de grau  $r$ , sua derivada de ordem  $r + 1$  é igual a zero, implicando que  $V_r(x)$  deve satisfazer à equação diferencial

$$\frac{d^{r+1}}{dx^{r+1}} \left\{ \frac{1}{w(x)} \frac{d^r V_r(x)}{dx^r} \right\} = 0, \quad (2.12)$$

em  $[a, b]$ . Esta equação terá  $2r$  condições de contorno, obtidas em (2.10),

$$V_r(a) = V_r'(a) = V_r''(a) = \dots = V_r^{(r-1)}(a) = 0, \quad (2.13)$$

$$V_r(b) = V_r'(b) = V_r''(b) = \dots = V_r^{(r-1)}(b) = 0, \quad (2.14)$$

tendo em vista que (2.10) deve ser satisfeita para  $q_{r-1}(a)$ ,  $q_{r-1}(b)$ ,  $q'_{r-1}(a)$ ,  $q'_{r-1}(b)$  e demais valores dependentes de  $q_{r-1}(x)$ . As condições acima são estabelecidas desde que  $r \geq 1$ .

Uma vez que as condições de contorno são independentes de  $q_{r-1}(x)$ , a solução de (2.12) também o será, mantendo a generalidade do polinômio  $q_{r-1}(x)$ . Portanto, a solução da equação diferencial (2.12), com as  $2r$  condições de contorno, fornece o polinômio  $\phi_r(x)$  de grau  $r \in \mathbb{N}$  (como dado na equação (2.11)). Em outras palavras, ela fornece a seqüência de polinômios ortogonais  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$  com relação à função peso  $w(x)$  sobre o intervalo  $[a, b]$ . Nota-se também que as únicas condições independentes do polinômio  $q_{r-1}(x)$  que satisfazem (2.10) são exatamente aquelas em (2.13) e (2.14).

---

<sup>2</sup>A fórmula recebe este nome em homenagem ao matemático Benjamin Olinde Rodrigues (1795-1851) que a formulou.

**Teorema 2.3** *Sendo o polinômio  $\phi_r(x)$  pertencente à uma seqüência de polinômios ortogonais, então ele possui  $r$  zeros reais, distintos e contidos no intervalo  $(a, b)$ .*

**Demonstração:** Desde que  $r \geq 1$  então pode-se afirmar que

$$\int_a^b w(x)\phi_r(x)\phi_0(x) dx = 0 \implies \phi_0(x) \int_a^b w(x)\phi_r(x) dx = 0,$$

pois  $\phi_0(x)$  é uma constante. Assim,  $\int_a^b w(x)\phi_r(x) dx = 0$ . Além disto, como  $w(x)$  é de sinal constante em  $[a, b]$ , então  $\phi_r(x)$  deverá mudar de sinal pelo menos uma vez em  $(a, b)$ . Portanto,  $\phi_r(x)$  possui, no mínimo, um zero de multiplicidade ímpar em  $(a, b)$ .

Agora sejam  $d_1, \dots, d_m$  os zeros reais de  $\phi_r(x)$  de multiplicidade ímpar,  $e_1, \dots, e_m$ , contidos em  $(a, b)$ , onde  $m \leq r$ . Suponha que  $m < r$ , então,

$$(x - d_1)(x - d_2) \dots (x - d_m)\phi_r(x) = A_{r,r}(x - d_1)^{e_1+1}(x - d_2)^{e_2+1} \dots (x - d_m)^{e_m+1}\rho_{r-m}(x),$$

onde  $A_{r,r} \neq 0$  é o coeficiente dominante de  $\phi_r(x)$ ,  $e_i + 1$  é um número par e  $\rho_{r-m}(x)$  é um polinômio de grau no máximo  $r - m$  cujos zeros são complexos, reais de multiplicidade par pertencentes a  $(a, b)$  ou reais de multiplicidade qualquer não pertencentes ao intervalo  $(a, b)$ . Logo,  $\rho_{r-m}(x)$  não muda de sinal em  $(a, b)$  e, conseqüentemente, o produto dado por  $(x - d_1)(x - d_2) \dots (x - d_m)\phi_r(x)$  também não muda de sinal em  $(a, b)$ .

Entretanto, desde que  $m < r$ , o produto  $(x - d_1)(x - d_2) \dots (x - d_m)$  será um polinômio de grau menor do que  $r$ . Em virtude de (2.2),

$$\int_a^b w(x)(x - d_1)(x - d_2) \dots (x - d_m)\phi_r(x) dx = 0.$$

Mas como  $w(x)$  não muda de sinal em  $[a, b]$ , o restante do integrando constituirá um polinômio que deverá mudar de sinal pelo menos uma vez em  $(a, b)$ . Neste sentido,  $m$  não poderá ser menor que  $r$ , implicando que  $m = r$ , conseqüentemente,  $\phi_r(x)$  não possui qualquer zero complexo, ou real de multiplicidade par pertencente a  $(a, b)$  ou, ainda, real de multiplicidade qualquer não pertencente a  $(a, b)$ .

Portanto,  $\phi_r(x)$  é um polinômio cujos zeros somam  $r$ , isto é, todos os zeros são reais de multiplicidade 1 e contidos no intervalo  $(a, b)$ . ■

**Teorema 2.4 (Fórmula de recorrência de três termos para  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^\infty$ )** *Cada seqüência de polinômios ortogonais  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^\infty$  satisfaz uma fórmula de recorrência de três termos da forma*

$$\phi_{r+1}(x) = (a_r x - b_r)\phi_r(x) - c_r \phi_{r-1}(x), \quad (2.15)$$

com  $a_r, b_r$  e  $c_r$  sendo constantes,  $r \geq 0$  e  $\phi_{-1}(x) \equiv 0$ .

**Demonstração:** Seja  $\phi_r(x)$  um polinômio da forma

$$\phi_r(x) = A_{r,r}x^r + A_{r,r-1}x^{r-1} + \dots + A_{r,1}x + A_{r,0},$$

Pelo Teorema 2.1 todo polinômio de grau  $r+1$  pode ser expresso como combinação linear dos polinômios  $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots, \phi_r(x), \phi_{r+1}(x)$ , então,

$$\begin{aligned} x\phi_r(x) &= C_{r+1}\phi_{r+1}(x) + C_r\phi_r(x) + \dots + C_1\phi_1(x) + C_0\phi_0(x), \\ x\phi_r(x) &= \sum_{i=0}^{r+1} C_i\phi_i(x), \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde  $C_i$  é o coeficiente de  $\phi_i(x)$  com  $C_{r+1} \neq 0$ . Desde que  $j \leq r-2$ ,

$$\int_a^b w(x) x \phi_j(x) \phi_r(x) dx = 0.$$

Substituindo (2.16) na expressão anterior,

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x) \phi_j(x) \left( \sum_{i=0}^{r+1} C_i \phi_i(x) \right) dx &= 0, \\ \sum_{i=0}^{r+1} C_i \int_a^b w(x) \phi_j(x) \phi_i(x) dx &= 0. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Assim, para cada  $i \neq j$ , tem-se  $C_i \int_a^b w(x) \phi_j(x) \phi_i(x) dx = 0$  e a equação (2.17) se desenvolve em

$$C_j \int_a^b w(x) [\phi_j(x)]^2 dx = 0.$$

Como  $\int_a^b w(x) [\phi_j(x)]^2 dx = \gamma_{\phi_j} > 0$ , resta que

$$C_j = 0, \quad j \leq r-2. \quad (2.18)$$

Empregando o resultado (2.18) no desenvolvimento da expressão (2.16),

$$\begin{aligned} x\phi_r(x) &= C_{r+1}\phi_{r+1}(x) + C_r\phi_r(x) + C_{r-1}\phi_{r-1}(x), \\ \phi_{r+1}(x) &= \frac{x\phi_r(x)}{C_{r+1}} - \frac{C_r\phi_r(x)}{C_{r+1}} - \frac{C_{r-1}\phi_{r-1}(x)}{C_{r+1}}, \end{aligned}$$

$$\phi_{r+1}(x) = \left( \frac{x}{C_{r+1}} - \frac{C_r}{C_{r+1}} \right) \phi_r(x) - \frac{C_{r-1}\phi_{r-1}(x)}{C_{r+1}},$$

onde, definindo-se  $a_r \equiv \frac{1}{C_{r+1}}$ ,  $b_r \equiv \frac{C_r}{C_{r+1}}$  e  $c_r \equiv \frac{C_{r-1}}{C_{r+1}}$ , fica demonstrada a equação (2.15). ■

A determinação do coeficiente  $a_r$  pode ser feita observando a equação (2.16), pela qual,

$$x(A_{r,r}x^r + \dots + A_{r,0}) = C_{r+1}(A_{r+1,r+1}x^{r+1} + \dots + A_{r+1,0}) + C_r\phi_r + \dots + C_0\phi_0.$$

Considerando a igualdade entre os coeficientes do termo de grau  $r+1$  na expressão anterior,

$$A_{r,r} = C_{r+1}A_{r+1,r+1} \quad \Longrightarrow \quad C_{r+1} = \frac{A_{r,r}}{A_{r+1,r+1}}.$$

Como  $a_r \equiv \frac{1}{C_{r+1}}$ ,

$$a_r = \frac{A_{r+1,r+1}}{A_{r,r}}. \quad (2.19)$$

Os coeficientes  $b_r$  e  $c_r$  serão tratados a partir do teorema a seguir.

**Teorema 2.5 (Identidade de Christoffel-Darboux)** *Cada seqüência  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$  obedece à seguinte relação*

$$\sum_{k=0}^r \frac{\phi_k(x)\phi_k(y)}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{\phi_{r+1}(x)\phi_r(y) - \phi_r(x)\phi_{r+1}(y)}{a_r\gamma_{\phi_r}(x-y)}.$$

**Demonstração:** Multiplicando-se a equação (2.15) por  $w(x)\phi_{k+1}(x)$  e, em seguida, integrando-a em  $(a, b)$ , obtém-se

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x) [\phi_{k+1}(x)]^2 dx &= a_k \int_a^b w(x) x \phi_k(x) \phi_{k+1}(x) dx - b_k \int_a^b w(x) \phi_k(x) \phi_{k+1}(x) dx \\ &\quad - c_k \int_a^b w(x) \phi_{k-1}(x) \phi_{k+1}(x) dx. \end{aligned}$$

Como, na expressão anterior, os dois últimos termos do lado direito são nulos devido à ortogonalidade, esta se reduz a

$$\gamma_{\phi_{k+1}} = a_k \int_a^b w(x) x \phi_k(x) \phi_{k+1}(x) dx. \quad (2.20)$$

Por outro lado, multiplicando-se (2.15) por  $w(x)\phi_k(x)$  e, da mesma forma, integrando tal

expressão em  $(a, b)$ ,

$$\begin{aligned}
\int_a^b w(x) \phi_k(x) \phi_{k+1}(x) dx &= a_k \int_a^b w(x) x [\phi_k(x)]^2 dx - b_k \int_a^b w(x) [\phi_k(x)]^2 dx \\
&\quad - c_k \int_a^b w(x) \phi_{k-1}(x) \phi_k(x) dx, \\
0 &= a_k \int_a^b w(x) x [\phi_k(x)]^2 dx - b_k \gamma_{\phi_k}, \\
b_k &= \frac{a_k}{\gamma_{\phi_k}} \int_a^b w(x) x [\phi_k(x)]^2 dx. \tag{2.21}
\end{aligned}$$

Ainda uma vez, ao se repetir o mesmo procedimento, multiplicando  $w(x) \phi_{k-1}(x)$  por (2.15),

$$\begin{aligned}
\int_a^b w(x) \phi_{k-1}(x) \phi_{k+1}(x) dx &= a_k \int_a^b w(x) x \phi_{k-1}(x) \phi_k(x) dx \\
&\quad - b_k \int_a^b w(x) \phi_{k-1}(x) \phi_k(x) dx - c_k \int_a^b w(x) [\phi_{k-1}(x)]^2 dx, \\
0 &= a_k \int_a^b w(x) x \phi_{k-1}(x) \phi_k(x) dx - c_k \gamma_{\phi_{k-1}}. \tag{2.22}
\end{aligned}$$

Substituindo  $k$  por  $k - 1$  em (2.20) e rearranjando os termos,

$$\int_a^b w(x) x \phi_{k-1}(x) \phi_k(x) dx = \frac{\gamma_{\phi_k}}{a_{k-1}}.$$

Usando a igualdade anterior em (2.22),

$$c_k = \frac{a_k \gamma_{\phi_k}}{a_{k-1} \gamma_{\phi_{k-1}}}. \tag{2.23}$$

Dividindo a equação (2.15) por  $a_k \gamma_{\phi_k}$  e, posteriormente, usando a igualdade (2.23),

$$\begin{aligned}
\frac{\phi_{k+1}(x)}{a_k \gamma_{\phi_k}} &= \frac{x \phi_k(x)}{\gamma_{\phi_k}} - \frac{b_k \phi_k(x)}{a_k \gamma_{\phi_k}} - \frac{\phi_{k-1}(x)}{a_{k-1} \gamma_{\phi_{k-1}}}, \\
\frac{x \phi_k(x)}{\gamma_{\phi_k}} &= \frac{\phi_{k+1}(x)}{a_k \gamma_{\phi_k}} + \frac{\phi_{k-1}(x)}{a_{k-1} \gamma_{\phi_{k-1}}} + \frac{b_k \phi_k(x)}{a_k \gamma_{\phi_k}}.
\end{aligned}$$

Multiplicando a equação anterior por  $\phi_k(y)$ , onde  $y$  é um parâmetro arbitrário,

$$\frac{x \phi_k(x) \phi_k(y)}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{\phi_k(y) \phi_{k+1}(x)}{a_k \gamma_{\phi_k}} + \frac{\phi_{k-1}(x) \phi_k(y)}{a_{k-1} \gamma_{\phi_{k-1}}} + \frac{b_k \phi_k(x) \phi_k(y)}{a_k \gamma_{\phi_k}}, \tag{2.24}$$

permutando  $y$  com  $x$  em (2.24),

$$\frac{y\phi_k(y)\phi_k(x)}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{\phi_k(x)\phi_{k+1}(y)}{a_k\gamma_{\phi_k}} + \frac{\phi_{k-1}(y)\phi_k(x)}{a_{k-1}\gamma_{\phi_{k-1}}} + \frac{b_k\phi_k(y)\phi_k(x)}{a_k\gamma_{\phi_k}} \quad (2.25)$$

e subtraindo (2.25) de (2.24), será obtido

$$(x-y)\frac{\phi_k(x)\phi_k(y)}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{\phi_{k+1}(x)\phi_k(y) - \phi_k(x)\phi_{k+1}(y)}{a_k\gamma_{\phi_k}} - \frac{\phi_k(x)\phi_{k-1}(y) - \phi_{k-1}(x)\phi_k(y)}{a_{k-1}\gamma_{\phi_{k-1}}}.$$

Tomando  $k = 0, 1, \dots, r$  no resultado anterior e somando as equações resultantes, verifica-se o cancelamento dos termos situados no lado direito destas, com exceção do primeiro termo da  $r$ -ésima equação, reduzindo o somatório a

$$\sum_{k=0}^r (x-y)\frac{\phi_k(x)\phi_k(y)}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{\phi_{r+1}(x)\phi_r(y) - \phi_r(x)\phi_{r+1}(y)}{a_r\gamma_{\phi_r}}$$

e, finalmente, a

$$\sum_{k=0}^r \frac{\phi_k(x)\phi_k(y)}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{\phi_{r+1}(x)\phi_r(y) - \phi_r(x)\phi_{r+1}(y)}{a_r\gamma_{\phi_r}(x-y)}.$$

■

O limite quando  $y$  tende a  $x$  na identidade de Christoffel-Darboux implica que

$$\begin{aligned} \lim_{y \rightarrow x} \left[ \sum_{k=0}^r \frac{\phi_k(x)\phi_k(y)}{\gamma_{\phi_k}} \right] &= \lim_{y \rightarrow x} \left[ \frac{\phi_{r+1}(x)\phi_r(y) - \phi_r(x)\phi_{r+1}(y)}{a_r\gamma_{\phi_r}(x-y)} \right], \\ \sum_{k=0}^r \frac{[\phi_k(x)]^2}{\gamma_{\phi_k}} &= \frac{1}{a_r\gamma_{\phi_r}} \lim_{y \rightarrow x} \left[ \frac{\phi_{r+1}(x)\phi_r(y) - \phi_r(x)\phi_{r+1}(y)}{(x-y)} \right], \\ &= \frac{1}{a_r\gamma_{\phi_r}} \lim_{y \rightarrow x} \left[ \frac{\phi_{r+1}(x)\phi_r(y) - \phi_{r+1}(y)\phi_r(x)}{(x-y)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\phi_{r+1}(y)\phi_r(x) - \phi_r(x)\phi_{r+1}(y)}{(x-y)} \right], \\ \sum_{k=0}^r \frac{[\phi_k(x)]^2}{\gamma_{\phi_k}} &= \frac{1}{a_r\gamma_{\phi_r}} \lim_{y \rightarrow x} \left[ \frac{\phi_r(x)[\phi_{r+1}(x) - \phi_{r+1}(y)]}{(x-y)} - \frac{\phi_{r+1}(x)[\phi_r(x) - \phi_r(y)]}{(x-y)} \right], \\ &= \frac{1}{a_r\gamma_{\phi_r}} \left[ \phi_r(x) \lim_{y \rightarrow x} \left( \frac{\phi_{r+1}(x) - \phi_{r+1}(y)}{x-y} \right) \right. \\ &\quad \left. - \phi_{r+1}(x) \lim_{y \rightarrow x} \left( \frac{\phi_r(x) - \phi_r(y)}{x-y} \right) \right], \end{aligned}$$

conduzindo aos seguintes corolários:

**Corolário 2.5.1**

$$\sum_{k=0}^r \frac{[\phi_k(x)]^2}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{1}{a_r \gamma_{\phi_r}} [\phi_r(x) \phi'_{r+1}(x) - \phi_{r+1}(x) \phi'_r(x)].$$

■

**Corolário 2.5.2** *Dois polinômios pertencentes a  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$  de graus consecutivos,  $\phi_k(x)$  e  $\phi_{k+1}(x)$ , não possuem zeros em comum.*

**Demonstração:** Sem perda de generalidade, sejam os polinômios  $\phi_k(x)$  e  $\phi_{k+1}(x)$  mônicos, ou seja, com coeficientes dominantes  $A_k = A_{k+1} = 1$ . Isto implica que  $a_k = 1$ , em virtude de (2.19). Uma vez que  $\gamma_{\phi_k} > 0$ , o Corolário 2.5.1 implica que

$$\phi_k(x) \phi'_{k+1}(x) - \phi_{k+1}(x) \phi'_k(x) > 0. \quad (2.26)$$

Sejam  $x_{k,i}$  e  $x_{k,i+1}$  dois zeros consecutivos de  $\phi_k(x)$  tais que  $x_{k,i} < x_{k,i+1}$ . Então, avaliando (2.26) nestes dois valores,

$$\phi_{k+1}(x_{k,i}) \phi'_k(x_{k,i}) < 0 \quad \text{e} \quad \phi_{k+1}(x_{k,i+1}) \phi'_r(x_{k,i+1}) < 0.$$

Por outro lado, como  $\phi'_k(x_{k,i})$  e  $\phi'_k(x_{k,i+1})$  possuem sinais opostos, então  $\phi_{k+1}(x_{k,i})$  e  $\phi_{k+1}(x_{k,i+1})$  também. Logo, existe pelo menos um zero de  $\phi_{k+1}(x)$  no intervalo  $(x_{k,i}, x_{k,i+1})$ .

■

O coeficiente  $b_r$  do Teorema 2.4 é dado por (2.21). Assim,

$$\begin{aligned} b_r &= \frac{a_r}{\gamma_{\phi_r}} \int_a^b w(x) x [\phi_r(x)]^2 dx, \\ &= \frac{a_r}{\gamma_{\phi_r}} \int_a^b w(x) x \phi_r(x) \phi_r(x) dx, \\ &= \frac{a_r}{\gamma_{\phi_r}} \int_a^b w(x) x \phi_r(x) (A_{r,r} x^r + A_{r,r-1} x^{r-1} + \dots + A_{r,0}) dx, \\ &= \frac{a_r}{\gamma_{\phi_r}} \int_a^b w(x) \phi_r(x) (A_{r,r} x^{r+1} + A_{r,r-1} x^r + \dots + A_{r,0} x) dx, \\ &= \frac{a_r}{\gamma_{\phi_r}} \left( A_{r,r} \int_a^b w(x) \phi_r(x) x^{r+1} dx + A_{r,r-1} \int_a^b w(x) \phi_r(x) x^r dx, \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + A_{r,r-2} \int_a^b w(x) \phi_r(x) x^{r-1} dx + \dots + A_{r,0} \int_a^b w(x) \phi_r(x) x dx \Big), \\
b_r &= \frac{a_r}{\gamma_{\phi_r}} \left( A_{r,r} \int_a^b w(x) \phi_r(x) x^{r+1} dx + A_{r,r-1} \int_a^b w(x) \phi_r(x) x^r dx \right).
\end{aligned}$$

Aplicando a equação (2.7) na expressão anterior, tem-se que

$$b_r = \frac{a_r}{\gamma_{\phi_r}} \left( A_{r,r} \int_a^b V_r^{(r)}(x) x^{r+1} dx + A_{r,r-1} \int_a^b V_r^{(r)}(x) x^r dx \right),$$

e integrando por partes  $r$  vezes, analogamente ao que foi realizado com a equação (2.8),

$$\begin{aligned}
b_r &= \frac{a_r}{\gamma_{\phi_r}} \left\{ A_{r,r} \left[ \left( V_r^{(r-1)}(x) x^{r+1} - \dots + (-1)^{r-1} (r+1) r \dots 3 V_r(x) x^2 \right) \Big|_a^b \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + (-1)^r (r+1)! \int_a^b V_r(x) x dx \right] \right. \\
& \quad \left. + A_{r,r-1} \left[ \left( V_r^{(r-1)}(x) x^r - r V_r^{(r-2)}(x) x^{r-1} + \dots + (-1)^{r-1} r! V_r(x) x \right) \Big|_a^b \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + (-1)^r r! \int_a^b V_r(x) dx \right] \right\}.
\end{aligned}$$

A partir das condições de contorno (2.13) e (2.14), a expressão anterior se reduz a

$$b_r = (-1)^r \frac{a_r}{\gamma_{\phi_r}} r! \left( A_{r,r} (r+1) \int_a^b V_r(x) x dx + A_{r,r-1} \int_a^b V_r(x) dx \right). \quad (2.27)$$

Por sua vez,  $\gamma_{\phi_r}$  é desenvolvido, a partir de sua definição dada em (2.1), como

$$\begin{aligned}
\gamma_{\phi_r} &= \int_a^b w(x) [\phi_r(x)]^2 dx > 0, \\
&= \int_a^b w(x) \phi_r(x) \phi_r(x) dx, \\
&= \int_a^b w(x) \phi_r(x) \left( A_{r,r} x^r + A_{r,r-1} x^{r-1} + \dots + A_{r,0} \right) dx, \\
&= A_{r,r} \int_a^b w(x) \phi_r(x) x^r dx + A_{r,r-1} \int_a^b w(x) \phi_r(x) x^{r-1} dx + \dots \\
& \quad + A_{r,0} \int_a^b w(x) \phi_r(x) dx,
\end{aligned}$$

$$\gamma_{\phi_r} = A_{r,r} \int_a^b w(x) \phi_r(x) x^r dx.$$

Novamente, partindo de (2.7),  $\gamma_{\phi_r} = A_{r,r} \int_a^b V_r^{(r)}(x) x^r dx$ . Integrando por partes  $r$  vezes, analogamente ao caso efetuado na equação (2.8),

$$\begin{aligned} \gamma_{\phi_r} = & A_{r,r} \left[ \left( V_r^{(r-1)}(x) x^r - r V_r^{(r-2)}(x) x^{r-1} + \dots + (-1)^{r-1} r! V_r(x) x \right) \Big|_a^b \right. \\ & \left. + (-1)^r r! \int_a^b V_r(x) dx \right]. \end{aligned}$$

Pelas condições de contorno (2.13) e (2.14),

$$\gamma_{\phi_r} = (-1)^r r! A_r \int_a^b V_r(x) dx > 0. \quad (2.28)$$

A fórmula de recorrência de três termos para os polinômios mônicos  $\psi_r(x)$  é dada pelo Teorema 2.4 usando que  $A_r = 1$  nos seus coeficientes  $a_r$ ,  $b_r$  e  $c_r$ . Estes coeficientes são dados por (2.19), (2.21) e (2.23), respectivamente, ficando demonstrado o seguinte teorema.

**Teorema 2.6 (Fórmula de recorrência de três termos para  $\{\psi_r(x)\}_{r=0}^\infty$ )** *Cada sequência de polinômios mônicos  $\{\psi_r(x)\}_{r=0}^\infty$  satisfaz a uma fórmula de recorrência de três termos da forma*

$$\psi_{r+1}(x) = (x - \alpha_r) \psi_r(x) - \beta_r \psi_{r-1}(x), \quad r \geq 0, \quad (2.29)$$

$\psi_{-1}(x) \equiv 0$ ,  $\psi_0(x) = 1$ , onde

$$\alpha_r = \frac{1}{\gamma_{\psi_r}} \int_a^b w(x) x [\psi_r(x)]^2 dx, \quad r \geq 0, \quad (2.30)$$

$$\beta_r = \frac{\gamma_{\psi_r}}{\gamma_{\psi_{r-1}}}, \quad r \geq 1. \quad (2.31)$$

■

Reescreve-se  $\alpha_r$ , notando que  $\psi_r(x) = \frac{\phi_r(x)}{A_r}$  e  $\gamma_{\psi_r} = \frac{\gamma_{\phi_r}}{A_r^2}$  e notando também a forma de  $b_r$  em (2.21),

$$\alpha_r = \frac{A_r^2}{\gamma_{\phi_r}} \int_a^b w(x) x \left[ \frac{\phi_r(x)}{A_r} \right]^2 dx = \frac{1}{\gamma_{\phi_r}} \int_a^b w(x) x [\phi_r(x)]^2 dx,$$

$$\alpha_r = \frac{b_r}{a_r}. \quad (2.32)$$

Reescreve-se  $\beta_r$  notando que  $\gamma_{\psi_r} = \frac{\gamma_{\phi_r}}{A_r^2}$  e  $a_{r-1} = \frac{A_r}{A_{r-1}}$ ,

$$\begin{aligned} \beta_r &= \frac{A_{r-1}^2 \gamma_{\phi_r}}{A_r^2 \gamma_{\phi_{r-1}}}, \\ \beta_r &= \frac{\gamma_{\phi_r}}{a_{r-1}^2 \gamma_{\phi_{r-1}}}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

**Teorema 2.7 (Fórmula de recorrência de três termos para  $\{\psi_r^*(x)\}_{r=0}^\infty$ )** Cada sequência de polinômios ortonormais  $\{\psi_r^*(x)\}_{r=0}^\infty$  satisfaz a uma fórmula de recorrência de três termos da forma

$$\sqrt{\beta_{r+1}} \psi_{r+1}^* = (x - \alpha_r) \psi_r^*(x) - \sqrt{\beta_r} \psi_{r-1}^*(x), \quad r \geq 0, \quad (2.34)$$

$$\psi_0^*(x) = \left( \int_a^b w(x) dx \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.35)$$

sendo  $\psi_{-1}^*(x) \equiv 0$ ,  $\alpha_r$  como em (2.30) e  $\beta_r$  como em (2.31).

**Demonstração:** Inserindo  $\psi_r(x) = \psi_r^*(x) \sqrt{\gamma_{\psi_r}}$  em (2.29) e dividindo por  $\sqrt{\gamma_{\psi_{r+1}}}$ ,

$$\psi_{r+1}^*(x) = (x - \alpha_r) \sqrt{\frac{\gamma_{\psi_r}}{\gamma_{\psi_{r+1}}}} \psi_r^*(x) - \beta_r \sqrt{\frac{\gamma_{\psi_{r-1}}}{\gamma_{\psi_{r+1}}}} \psi_{r-1}^*(x),$$

que, de (2.31), pode ser escrita como

$$\psi_{r+1}^*(x) = (x - \alpha_r) \frac{\psi_r^*(x)}{\sqrt{\beta_{r+1}}} - \beta_r \frac{\psi_{r-1}^*(x)}{\sqrt{\beta_{r+1}\beta_r}}.$$

Multiplicando a equação anterior por  $\sqrt{\beta_{r+1}}$ , obtém-se (2.34). O valor inicial  $\psi_0^*(x)$  é obtido pela normalização de  $\psi_0(x) = 1$ . ■

Pela fórmula de recorrência para os polinômios ortonormais (2.34), tem-se que

$$x\psi_r^*(x) = \sqrt{\beta_r} \psi_{r-1}^* + \alpha_r \psi_r^*(x) + \sqrt{\beta_{r+1}} \psi_{r+1}^*,$$

e fazendo  $r = 0, 1, \dots, R-1$ , tem-se, respectivamente,

$$\begin{aligned} x\psi_0^*(x) &= \alpha_0 \psi_0^*(x) + \sqrt{\beta_1} \psi_1^*, \\ x\psi_1^*(x) &= \sqrt{\beta_1} \psi_0^* + \alpha_1 \psi_1^*(x) + \sqrt{\beta_2} \psi_2^*, \\ x\psi_2^*(x) &= \sqrt{\beta_2} \psi_1^* + \alpha_2 \psi_2^*(x) + \sqrt{\beta_3} \psi_3^*, \end{aligned}$$

$$\begin{array}{c} \vdots \\ \vdots \\ x\psi_{R-1}^*(x) = \sqrt{\beta_{R-1}}\psi_{R-2}^* + \alpha_{R-1}\psi_{R-1}^*(x) + \sqrt{\beta_R}\psi_R^*, \end{array}$$

ou, na forma matricial,

$$x \begin{bmatrix} \psi_0^*(x) \\ \psi_1^*(x) \\ \psi_2^*(x) \\ \vdots \\ \psi_{R-1}^*(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \sqrt{\beta_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{\beta_{R-1}} & \alpha_{R-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_0^*(x) \\ \psi_1^*(x) \\ \psi_2^*(x) \\ \vdots \\ \psi_{R-1}^*(x) \end{bmatrix} + \sqrt{\beta_R} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \psi_R^*(x) \end{bmatrix}, \quad (2.36)$$

na qual a matriz quadrada de ordem  $R$ , simétrica e tridiagonal é a matriz de Jacobi  $\mathbf{J}_R$ . Sendo  $\Psi_{R-1}(x)$  o vetor  $(\psi_0^*(x), \psi_1^*(x), \dots, \psi_{R-1}^*(x))^T$ , então a equação matricial pode ser expressa como

$$x \Psi_{R-1}(x) = \mathbf{J}_R \Psi_{R-1}(x) + \sqrt{\beta_R} \psi_R^*(x) \mathbf{u}_{R-1}, \quad (2.37)$$

sendo  $\mathbf{u}_{R-1}$  o vetor unitário com 1 na última posição e zero nas demais. Seja  $x_{R,i}$  o  $i$ -ésimo zero de  $\psi_R^*(x)$ . Avaliando a equação (2.37) em  $x_{R,i}$ ,

$$x_{R,i} \Psi_{R-1}(x_{R,i}) = \mathbf{J}_R \Psi_{R-1}(x_{R,i}).$$

Uma vez que  $\psi_0^*(x) = \left( \int_a^b w(x) dx \right)^{-\frac{1}{2}} > 0$ , então o vetor  $\Psi_{R-1}(x_{R,i})$  é não-nulo. Assim,  $x_{R,i}$ ,  $i = 0, 1, \dots, R-1$  são autovalores da matriz de Jacobi  $\mathbf{J}_R$ . Deste modo, fica demonstrado o seguinte teorema:

**Teorema 2.8** *Os autovalores  $x_{R,0}, x_{R,1}, \dots, x_{R,R-1}$  da matriz de Jacobi  $\mathbf{J}_R$  são os zeros de  $\psi_R^*(x)$  e o autovetor correspondente a  $x_{R,i}$  é  $(\psi_0^*(x_{R,i}), \psi_1^*(x_{R,i}), \dots, \psi_{R-1}^*(x_{R,i}))^T$ . ■*

**Corolário 2.8.1** *Seja  $\mathbf{v}_i$  o autovetor normalizado da matriz de Jacobi correspondente ao autovalor  $x_{R,i}$ ,*

$$x_{R,i} \mathbf{v}_i = \mathbf{J}_R \mathbf{v}_i, \quad \mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i = 1,$$

e seja  $\mathbf{v}_{i,1}$  denotando seu primeiro componente. Então,

$$\frac{\mathbf{v}_{i,1}^2}{[\psi_0^*(x)]^2} = \frac{1}{\sum_{j=0}^{R-1} [\psi_j^*(x_{R,i})]^2}. \quad (2.38)$$

**Demonstração:** Como  $\mathbf{v}_i$  está normalizado,  $\mathbf{v}_i = \Psi_{R-1}(x_{R,i}) \left( \sum_{j=0}^{R-1} [\psi_j^*(x_{R,i})]^2 \right)^{-\frac{1}{2}}$ , comparando o primeiro componente de ambos os vetores,

$$\mathbf{v}_{i,1} = \frac{\psi_0^*(x)}{\sqrt{\sum_{j=0}^{R-1} [\psi_j^*(x_{R,i})]^2}}.$$

Elevando os dois lados da equação anterior ao quadrado, obtém-se (2.38).  $\blacksquare$

**Teorema 2.9** *Se  $[a, b]$  for um intervalo simétrico com relação à origem e a função peso  $w(x)$  for uma função par, então  $\phi_r(x)$  será uma função par ou ímpar de acordo com  $r$  par ou ímpar, respectivamente.*

**Demonstração:** Sem perda de generalidade, suponha que o polinômio  $\phi_r(x)$  seja mônico, isto é,  $A_{r,r} = 1$ . Uma vez que  $\phi_r(x) = \sum_{i=0}^r A_{r,i} x^i$ , então o sistema linear de ordem  $r$  dado por  $\int_a^b w(x) \phi_r(x) x^i dx = 0$ , para  $i = 0, 1, \dots, r-1$ , determina  $A_{r,i}$ ,  $i = 0, \dots, r-1$ . Em outras palavras, o sistema determina  $\phi_r(x)$ . Fazendo  $x = -x$  no sistema,

$$\begin{aligned} \int_a^b w(-x) \phi_r(-x) (-x)^i (-1) dx &= 0, \\ (-1)^{i+1} \int_a^b w(-x) \phi_r(-x) x^i dx &= 0, \\ \int_a^b w(-x) \phi_r(-x) x^i dx &= 0, \quad i = 0, 1, \dots, r-1. \end{aligned}$$

Mas, por hipótese, tem-se que  $w(x)$  é uma função par no intervalo simétrico  $[a, b]$  com relação à origem, isto é,  $w(x) = w(-x) \forall x \in [a, b]$ . Daí,

$$\int_a^b w(x) \phi_r(-x) x^i dx = 0, \quad i = 0, 1, \dots, r-1. \quad (2.39)$$

O sistema linear (2.39), determina  $\phi_r(-x)$  cujo coeficiente dominante é  $(-1)^r$ . Por outro lado,  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$  e  $\{\phi_r(-x)\}_{r=0}^{\infty}$  são duas seqüências de polinômios ortogonais sobre o mesmo intervalo e com a mesma função peso. Assim, pelo Teorema 2.2,  $\phi_r(-x)$  é igual a  $\phi_r(x)$ , exceto por uma constante evidente  $\mathcal{C}$ . Logo,  $\phi_r(-x) \equiv \mathcal{C} \phi_r(x)$  e comparando os coeficientes em  $x^r$  dos polinômios  $\phi_r(x)$  e  $\phi_r(-x)$ , obtém-se

$$\phi_r(-x) \equiv (-1)^r \phi_r(x).$$

Portanto,  $\phi_r(x)$  é uma função par ou ímpar de acordo com  $r$  par ou ímpar, respectivamente. ■

Sob as hipóteses do teorema anterior, os zeros de  $\phi_r(x)$  são simétricos em relação à origem, uma vez que  $\phi_r(x)$  é uma função par ou ímpar, implicando no seguinte corolário:

**Corolário 2.9.1** *Se  $[a, b]$  for um intervalo simétrico com relação à origem e a função peso  $w(x)$  for uma função par, então os zeros de  $\phi_r(x)$  serão simétricos com relação à origem.* ■

Se  $w(x)$  for função par e o intervalo  $[a, b]$  for simétrico com relação à origem, então, pelo Teorema 2.9, a função  $\phi_r(x)$  é par ou ímpar, de acordo com  $r$  par ou ímpar, respectivamente. Conseqüentemente,  $[\phi_r(x)]^2$  é função par, pois o quadrado de toda função par ou ímpar é sempre par. Daí,  $x[\phi_r(x)]^2$  torna-se função ímpar, implicando que  $\int_a^b w(x)x[\phi_r(x)]^2 dx = 0$ . Portanto, por (2.21),  $b_r = 0$  e, por (2.32),  $\alpha_r = 0$ . Este resultado está apresentado no seguinte corolário:

**Corolário 2.9.2** *Se  $w(x)$  for uma função par e  $[a, b]$  for um intervalo simétrico com relação à origem, então  $b_r = \alpha_r = 0$ ,  $r \geq 0$ .* ■

## 2.2 Polinômios de Legendre

No caso de uma seqüência de polinômios ortogonais definida com relação à função peso  $w(x) = 1$ , sobre o intervalo  $[-1, 1]$ , a equação diferencial (2.12) se reduz a

$$\frac{d^{2r+1}V_r(x)}{dx^{2r+1}} = 0, \quad (2.40)$$

com  $2r$  condições de contorno

$$V_r(\pm 1) = V_r'(\pm 1) = V_r''(\pm 1) = \dots = V_r^{(r-1)}(\pm 1) = 0. \quad (2.41)$$

Observando que (2.40) trata-se de uma equação diferencial homogênea de coeficiente constante igual a 1, então, sua solução pode ser dada por  $V_r = k_{2r}x^{2r} + k_{2r-1}x^{2r-1} + \dots + k_0$ , onde as constantes  $k_i$  são as soluções de um sistema linear homogêneo dado pelas  $2r$  condições de contorno acima.

Em particular, quando  $r = 1$  tem-se

$$V_1(x) = k_2x^2 + k_1x + k_0 \quad \text{e} \quad V_1(\pm 1) = 0,$$

dando origem ao sistema

$$\begin{cases} k_2 + k_1 + k_0 = 0 \\ k_2 - k_1 + k_0 = 0, \end{cases}$$

cuja solução é  $k_2 = -k_0$ ,  $k_1 = 0$  e  $k_0 \in \mathbb{R}$ . Daí,  $V_1(x) = -k_0x^2 + k_0$ , isto é,

$$V_1(x) = k_0(1 - x^2). \quad (2.42)$$

Para o caso em que  $r = 2$ ,

$$V_2(x) = k_4x^4 + k_3x^3 + k_2x^2 + k_1x + k_0 \quad \text{e} \quad V_2(\pm 1) = V_2'(\pm 1) = 0,$$

resultando no sistema

$$\begin{cases} k_4 + k_3 + k_2 + k_1 + k_0 = 0 \\ k_4 - k_3 + k_2 - k_1 + k_0 = 0 \\ 4k_4 + 3k_3 + 2k_2 + k_1 = 0 \\ -4k_4 + 3k_3 - 2k_2 + k_1 = 0, \end{cases}$$

cuja solução é  $k_4 = k_0$ ,  $k_3 = k_1 = 0$ ,  $k_2 = -2k_0$  e  $k_0 \in \mathbb{R}$ . Daí,

$$V_2(x) = k_4x^4 - 2k_0x^2 + k_0 = k_0(x^4 - 2x^2 + 1),$$

a qual pode ser apresentada por

$$V_2(x) = k_0(1 - x^2)^2. \quad (2.43)$$

Por indução, partindo dos resultados (2.42) e (2.43), é obtida a expressão para o caso geral  $V_r(x) = K_r(1 - x^2)^r$ , onde  $K_r$  é uma constante real. De fato, pela regra de Leibniz<sup>3</sup> (Abramowitz e Stegun, 1972),

$$\frac{d^j}{dx^j} \left\{ K_r(1 - x^2)^r \right\} = K_r \sum_{i=0}^j \binom{j}{i} \frac{d^{j-i}}{dx^{j-i}} \left\{ (1 + x)^r \right\} \frac{d^i}{dx^i} \left\{ (1 - x)^r \right\}, \quad j = 0, \dots, r - 1.$$

O termo do lado direito da expressão acima é nulo se  $x = \pm 1$ . Ou seja,  $V_r^{(j)}(\pm 1) = 0$  para  $j = 0, \dots, r - 1$ , satisfazendo as  $2r$  condições em (2.41).

Assim, pela fórmula de Rodrigues (2.11),

$$\phi_r(x) = K_r \frac{d^r}{dx^r} \left\{ (1 - x^2)^r \right\}. \quad (2.44)$$

---

<sup>3</sup>ou Leibnitz.

Tomando  $K_r = \frac{(-1)^r}{2^r r!}$  obtém-se o **polinômio de Legendre**  $P_r(x)$  de grau  $r$ ,

$$P_r(x) = \frac{(-1)^r}{2^r r!} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ (1-x^2)^r \right\}, \quad (2.45)$$

ou fórmula de Rodrigues para  $P_r(x)$  (Szegő, 1975). A seqüência dos polinômios ortogonais de Legendre é representada por  $\{P_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$ .

Os seis primeiros polinômios de Legendre são

$$P_0(x) = 1,$$

$$P_1(x) = x,$$

$$P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2},$$

$$P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x,$$

$$P_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8},$$

$$P_5(x) = \frac{63}{8}x^5 - \frac{35}{4}x^3 + \frac{15}{8}x.$$

A Figura 3 apresenta os gráficos dos seis polinômios anteriores no intervalo  $[-1, 1]$ . Verifica-se que seus zeros são reais, distintos e estão contidos no intervalo  $(-1, 1)$ , como foi demonstrado no Teorema 2.1. Observa-se que os zeros são simétricos, pois  $w(x) = 1$  é uma função par e o intervalo  $[-1, 1]$  é simétrico com relação à origem (Corolário 2.9.1). Também é possível observar que os zeros destes polinômios se entrelaçam.

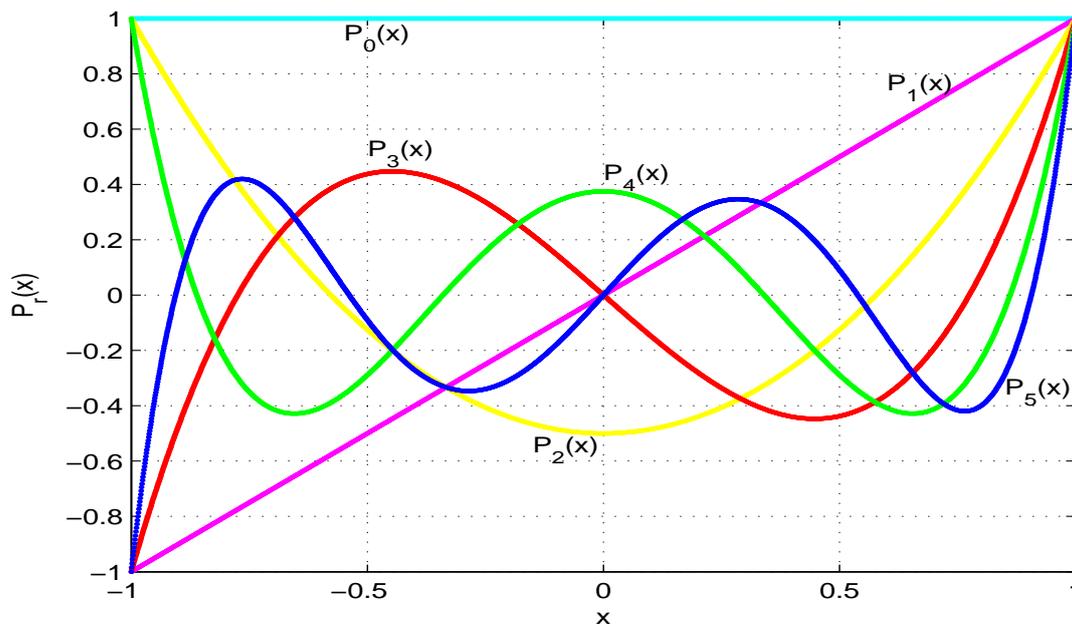


Figura 3: Polinômios de Legendre de grau até 5.

Aplicando-se o binômio de Newton ao polinômio de Legendre  $P_r(x)$ , em (2.45),

$$P_r(x) = \frac{(-1)^r}{2^r r!} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ (-1)^r x^{2r} + (-1)^{r-1} r x^{2r-2} + \dots + 1 \right\},$$

cujo coeficiente dominante é

$$A_r = \frac{(-1)^r}{2^r r!} \frac{(-1)^r (2r)!}{r!} = \frac{(2r)!}{2^r (r!)^2}. \quad (2.46)$$

A partir de (2.28) calcula-se

$$\gamma_{\phi_r} = (-1)^r r! A_r \int_a^b V_r(x) dx, \quad (2.47)$$

$$= (-1)^r r! \frac{(2r)!}{2^r (r!)^2} \int_{-1}^1 \frac{(-1)^r}{2^r r!} (1-x^2)^r dx,$$

$$\gamma_{\phi_r} = \frac{(2r)!}{2^{2r} (r!)^2} \int_{-1}^1 (1-x^2)^r dx. \quad (2.48)$$

Calcula-se a integral acima ao provar-se por indução que  $\int_{-1}^1 (1-x^2)^r dx = \frac{2^{2r+1} (r!)^2}{(2r+1)!}$ .

De fato,

$$\begin{aligned} r = 0 &\Rightarrow \int_{-1}^1 dx = 2 = \frac{2^{0+1} (0!)^2}{(0+1)!}, \\ r = 1 &\Rightarrow \int_{-1}^1 (1-x^2) dx = \frac{4}{3} = \frac{2^{2+1} (1!)^2}{(2+1)!}, \\ r = 2 &\Rightarrow \int_{-1}^1 (1-x^2)^2 dx = \frac{16}{15} = \frac{2^{4+1} (2!)^2}{(4+1)!}. \end{aligned}$$

Considerando-se a expressão para  $r = j$ , restará provar a validade para o caso em que  $r = j + 1$ . Deste modo,

$$\int (1-x^2)^{j+1} dx = \int \frac{-u^{j+1}}{2\sqrt{1-u}} du,$$

onde  $u = 1 - x^2 \Rightarrow du = -2x dx$  e  $x = \sqrt{1-u}$ . (O caso  $x = -\sqrt{1-u}$  é análogo).

Uma vez que  $\int \frac{-u^{j+1}}{2\sqrt{1-u}} du = \frac{u^{j+1}\sqrt{1-u}}{2j+3} - \frac{j+1}{2j+3} \int \frac{u^j}{\sqrt{1-u}} du$ , (Leithold, 1994), tem-se que

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^{j+1} dx = \frac{(1-x^2)^{j+1} x}{2j+3} \Big|_{-1}^1 + \frac{2(j+1)}{2j+3} \int_{-1}^1 (1-x^2)^j dx,$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2(j+1)}{2j+3} \frac{2^{2j+1}(j!)^2}{(2j+1)!}, \\
&= \frac{2^{2j+2}(j+1)(j!)^2}{(2j+3)(2j+1)!}, \\
&= \frac{2^{2j+2}(j+1)(j!)^2}{(2j+3)(2j+1)!} \cdot \frac{2(j+1)}{2(j+1)}, \\
\int_{-1}^1 (1-x^2)^{j+1} dx &= \frac{2^{2j+3}[(j+1)!]^2}{(2j+3)!},
\end{aligned}$$

como queria-se demonstrar.

Portanto, (2.48) torna-se

$$\begin{aligned}
\gamma_{\phi_r} &= \frac{(2r)!}{2^{2r}(r!)^2} \frac{2^{2r+1}(r!)^2}{(2r+1)!}, \\
\gamma_{\phi_r} &= \frac{2}{2r+1}.
\end{aligned} \tag{2.49}$$

De acordo com o Teorema 2.4, os polinômios de Legendre podem ser obtidos segundo uma fórmula de recorrência de três termos, a partir de  $a_r$ ,  $b_r$  e  $c_r$ , dados pelas equações (2.19), (2.27) e (2.23). Por (2.19),

$$a_r = \frac{2r+1}{r+1}. \tag{2.50}$$

Como  $w(x) = 1$  e o intervalo  $[-1, 1]$  é simétrico, o Corolário 2.9.2, implica que

$$b_r = 0. \tag{2.51}$$

Por (2.23),

$$c_r = \frac{r}{r+1}. \tag{2.52}$$

Finalmente, usando (2.50), (2.51) e (2.52) no Teorema 2.4, tem-se a fórmula de recorrência para a seqüência dos polinômios ortogonais de Legendre,

$$P_{r+1}(x) = \frac{2r+1}{r+1} x P_r(x) - \frac{r}{r+1} P_{r-1}(x), \quad r \geq 0, \tag{2.53}$$

$$P_{-1}(x) \equiv 0, \quad P_0(x) = 1.$$

O  $i$ -ésimo zero  $x_{r,i}$  de  $P_r(x)$  é dado por (Davis e Rabinowitz, 1984)

$$x_{r,i} = \left(1 - \frac{1}{8r^2} + \frac{1}{8r^3}\right) \cos\left(\frac{(4i-1)\pi}{4r+2}\right) + O(r^{-4}),$$

com  $x_{r,1} > x_{r,2} > \dots > x_{r,r}$ . Portanto,

$$x_{r,i} \approx \cos \left( \frac{(4i-1)\pi}{4r+2} \right), \quad i = 1, 2, \dots, r, \quad (2.54)$$

onde  $x_{r,1} > x_{r,2} > \dots > x_{r,r}$ .

Pela fórmula anterior nota-se que  $x_{r,i}$  pertence ao intervalo  $(-1, 1)$ , como mostrou o Teorema 2.3.

Uma fórmula envolvendo a derivada do polinômio de Legendre (Szegő, 1975) é

$$(1-x^2)P_r'(x) = (r+1)xP_r(x) - (r+1)P_{r+1}(x) = -rP_r(x) + rP_{r-1}(x). \quad (2.55)$$

Os polinômios ortonormais de Legendre  $P_r^*(x)$  são dados pela normalização  $\frac{P_r(x)}{\sqrt{\gamma_{\phi_r}}}$ ,

$$P_r^*(x) = \sqrt{\frac{2r+1}{2}} P_r(x).$$

A equação de recorrência para a seqüência dos polinômios ortonormais de Legendre  $P_r^*(x)$  é dada pelo Teorema 2.7, notando as formas de  $\alpha_r$  e  $\beta_r$  nas equações (2.32) e (2.33). Assim,

$$\sqrt{\beta_{r+1}}P_{r+1}^*(x) = xP_r^*(x) + \sqrt{\beta_r}P_{r-1}^*(x), \quad r \geq 0, \quad (2.56)$$

sendo  $P_{-1}^*(x) \equiv 0$ ,  $P_0^*(x) = \frac{\sqrt{2}}{2}$ ,

$$\alpha_r = \frac{b_r}{a_r} = 0, \quad r \geq 0, \quad (2.57)$$

$$\beta_r = \frac{\gamma_{\phi_r}}{a_{r-1}^2 \gamma_{\phi_{r-1}}} = \frac{r^2}{4r^2 - 1}, \quad r \geq 1. \quad (2.58)$$

## 2.3 Polinômios de Laguerre generalizados

No caso de uma seqüência de polinômios ortogonais definida sobre o intervalo  $[0, \infty)$ , com  $w(x) = e^{-x}x^\alpha$ , onde  $\alpha > -1$ , tem-se que a equação diferencial (2.12) toma a forma

$$\frac{d^{r+1}}{dx^{r+1}} \left\{ e^x x^{-\alpha} \frac{d^r V_r(x)}{dx^r} \right\} = 0, \quad (2.59)$$

com  $2r$  condições de contorno

$$V_r(0) = V_r'(0) = V_r''(0) = \dots = V_r^{(r-1)}(0) = 0, \quad (2.60)$$

$$V_r(\infty) = V_r'(\infty) = V_r''(\infty) = \dots = V_r^{(r-1)}(\infty) = 0. \quad (2.61)$$

Afirma-se que  $V_r(x) = K_r e^{-x} x^{\alpha+r}$ , onde  $K_r$  é uma constante, pois empregando a regra de Leibniz ao termo interno às chaves na equação (2.59),

$$\begin{aligned} e^x x^{-\alpha} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ K_r e^{-x} x^{\alpha+r} \right\} &= K_r e^x x^{-\alpha} \sum_{i=0}^r \binom{r}{i} \frac{d^{r-i}}{dx^{r-i}} \left\{ x^{\alpha+r} \right\} \frac{d^i}{dx^i} \left\{ e^{-x} \right\}, \\ &= K_r e^x x^{-\alpha} \sum_{i=0}^r \frac{(-1)^i r!}{i!} \binom{r+\alpha}{r-i} e^{-x} x^{\alpha+i}, \\ e^x x^{-\alpha} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ K_r e^{-x} x^{\alpha+r} \right\} &= K_r \sum_{i=0}^r \frac{(-1)^i r!}{i!} \binom{r+\alpha}{r-i} x^i. \end{aligned}$$

Ficando demonstrado que  $e^x x^{-\alpha} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ K_r e^{-x} x^{\alpha+r} \right\}$  é um polinômio de grau  $r$  e que  $V_r(x) = K_r e^{-x} x^{\alpha+r}$  satisfaz (2.59).

Empregando novamente a regra de Leibniz,

$$\frac{d^j}{dx^j} \left\{ K_r e^{-x} x^{\alpha+r} \right\} = K_r \sum_{i=0}^j \frac{(-1)^i j!}{i!} \binom{r+\alpha}{j-i} e^{-x} x^{\alpha+r-j+i}, \quad j = 0, \dots, r-1,$$

que se anula em  $x = 0$ , pois  $\alpha + r - j + i > 0$ , o que satisfaz (2.60). Por outro lado, cada um de seus termos pode ser representado pela forma  $\frac{x^l}{e^x}$ , onde  $l > 0$ , a menos de uma constante. Como  $\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{x^l}{e^x} = 0$ , as condições de contorno em (2.61) são também satisfeitas.

Assim, pela fórmula de Rodrigues (2.11),

$$\phi_r(x) = K_r e^x x^{-\alpha} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ e^{-x} x^{\alpha+r} \right\}. \quad (2.62)$$

Escolhendo  $K_r = \frac{1}{r!}$  obtém-se o **polinômio de Laguerre generalizado**  $L_r^\alpha(x)$  de grau  $r$ ,

$$L_r^\alpha(x) = \frac{1}{r!} e^x x^{-\alpha} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ e^{-x} x^{\alpha+r} \right\}, \quad (2.63)$$

ou fórmula de Rodrigues para o polinômio  $L_r^\alpha(x)$ . A seqüência dos polinômios ortogonais de Laguerre generalizados é representada por  $\{L_r^\alpha(x)\}_{r=0}^\infty$ .

Os seis primeiros polinômios de Laguerre generalizados com  $\alpha = 1$  são

$$L_0^1(x) = 1,$$

$$L_1^1(x) = -x + 2,$$

$$L_2^1(x) = \frac{1}{2}x^2 - 3x + 3,$$

$$L_3^1(x) = -\frac{1}{6}x^3 + 2x^2 - 6x + 4,$$

$$L_4^1(x) = \frac{1}{24}x^4 - \frac{5}{6}x^3 + 5x^2 - 10x + 5, \quad L_5^1(x) = -\frac{1}{120}x^5 + \frac{1}{4}x^4 - \frac{5}{2}x^3 + 10x^2 - 15x + 6.$$

A Figura 4 apresenta os gráficos destes polinômios no intervalo  $[0, 8]$ .

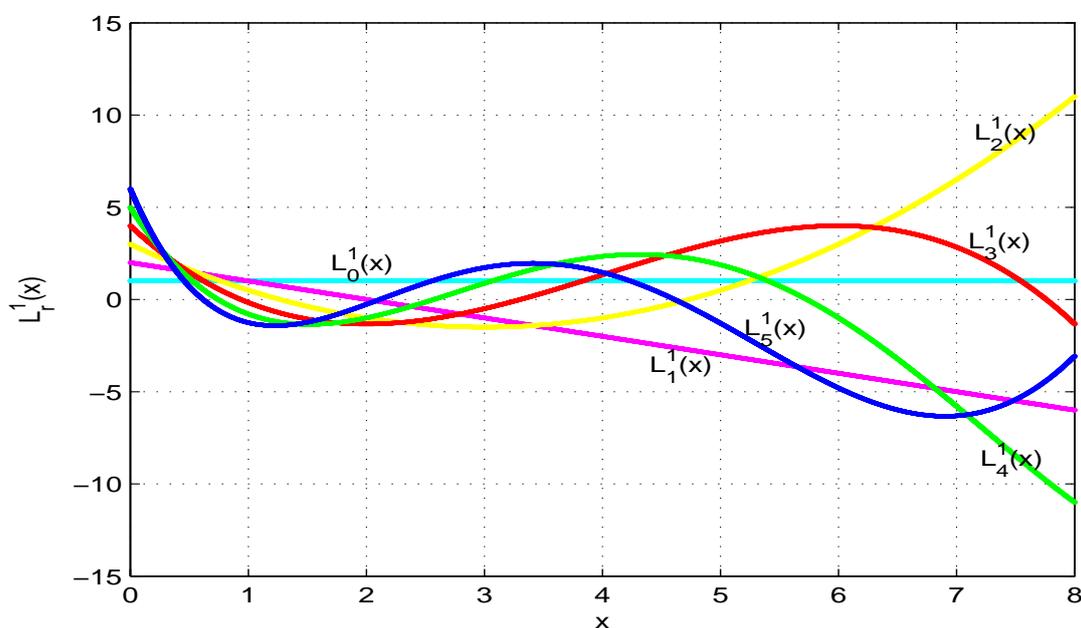


Figura 4: Polinômios de Laguerre generalizados de grau até 5 com  $\alpha = 1$ .

Aplicando-se a regra de Leibnitz ao polinômio de Laguerre generalizado  $L_r^\alpha(x)$ , em (2.63),

$$L_r^\alpha(x) = \sum_{i=0}^r \frac{(-1)^i}{i!} \binom{r+\alpha}{r-i} x^i,$$

cujo coeficiente do termo de grau  $i$  é dado por

$$A_{r,i} = \frac{(-1)^i}{i!} \binom{r+\alpha}{r-i}. \quad (2.64)$$

De (2.28) calcula-se

$$\gamma_{\phi_r} = (-1)^r r! A_r \int_a^b V_r(x) dx, \quad (2.65)$$

$$\begin{aligned}
&= (-1)^r r! \frac{(-1)^r}{r!} \int_0^\infty \frac{1}{r!} e^{-x} x^{\alpha+r} dx, \\
&= \frac{1}{r!} \int_0^\infty e^{-x} x^{\alpha+r} dx, \\
\gamma_{\phi_r} &= \frac{\Gamma(\alpha + r + 1)}{r!}, \tag{2.66}
\end{aligned}$$

onde  $\Gamma(t) = \int_0^\infty e^{-x} x^{t-1} dx$  é a função Gama tal que  $\Gamma(t) = (t-1)!$ .

De acordo com o Teorema 2.4 os polinômios de Laguerre generalizados podem ser determinados segundo uma fórmula de recorrência de três termos, a partir de  $a_r$ ,  $b_r$  e  $c_r$ , obtidos segundo as equações (2.19), (2.27) e (2.23). De (2.19) tem-se

$$a_r = -\frac{1}{r+1}. \tag{2.67}$$

De (2.27),

$$\begin{aligned}
b_r &= (-1)^r \frac{-\frac{1}{r+1}}{\Gamma(\alpha + r + 1)} r! \left[ \frac{(-1)^r}{r!} (r+1) \int_0^\infty \frac{1}{r!} e^{-x} x^{\alpha+r+1} dx \right. \\
&\quad \left. + \frac{(-1)^{r-1}}{(r-1)!} (r+\alpha) \int_0^\infty \frac{1}{r!} e^{-x} x^{\alpha+r} dx \right], \\
&= \frac{(-1)^{r+1} (r!)^2}{(r+1)\Gamma(\alpha + r + 1)} \left[ \frac{(-1)^r (r+1)\Gamma(\alpha + r + 2)}{(r!)^2} + \frac{(-1)^{r-1} (r+\alpha)\Gamma(\alpha + r + 1)}{r!(r-1)!} \right], \\
&= -(\alpha + r + 1) + \frac{r(r+\alpha)}{r+1},
\end{aligned}$$

$$b_r = -\frac{\alpha + 2r + 1}{r+1}. \tag{2.68}$$

De (2.23),

$$c_r = \frac{\alpha + r}{r+1}. \tag{2.69}$$

Finalmente, usando (2.67), (2.68) e (2.69) no Teorema 2.4, tem-se a equação de recorrência para  $L_r^\alpha(x)$

$$L_{r+1}^\alpha(x) = \left( -\frac{x}{r+1} + \frac{\alpha + 2r + 1}{r+1} \right) L_r^\alpha(x) - \frac{\alpha + r}{r+1} L_{r-1}^\alpha(x), \quad r \geq 0, \tag{2.70}$$

$$L_{-1}^\alpha(x) \equiv 0, \quad L_0^\alpha(x) = 1.$$

O  $i$ -ésimo zero  $x_{r,i}$  de  $L_r^\alpha(x)$  é dado por (Davis e Rabinowitz, 1984)

$$x_{r,i} = \frac{j_{\alpha,i}^2}{4\mathcal{K}} \left( 1 + \frac{2(\alpha^2 - 1) + j_{\alpha,i}^2}{48\mathcal{K}^2} \right) + O(r^{-5}),$$

onde  $\mathcal{K} = r + \frac{\alpha + 1}{2}$  e  $j_{\alpha,i}$  é o  $i$ -ésimo zero positivo da função de Bessel  $J_\alpha(x)$ .

Uma fórmula envolvendo a derivada de  $L_r^\alpha(x)$  (Szegö, 1975) é

$$xL_r^{\alpha'}(x) = rL_r^\alpha(x) - (\alpha + r)L_{r-1}^\alpha(x). \quad (2.71)$$

Os polinômios ortonormais de Laguerre generalizados  $L_r^{\alpha*}(x)$  são obtidos segundo a normalização  $\frac{L_r^\alpha(x)}{\sqrt{\gamma_{\phi_r}}}$ ,

$$L_r^{\alpha*}(x) = \sqrt{\frac{r!}{\Gamma(\alpha + r + 1)}} L_r^\alpha(x).$$

A equação de recorrência para a seqüência dos polinômios ortonormais de Laguerre generalizados  $L_r^{\alpha*}(x)$  é dada pelo Teorema 2.7, notando as formas de  $\alpha_r$  e  $\beta_r$  nas equações (2.32) e (2.33). Assim,

$$\sqrt{\beta_{r+1}}L_{r+1}^{\alpha*}(x) = (x - \alpha_r)L_r^{\alpha*}(x) + \sqrt{\beta_r}L_{r-1}^{\alpha*}(x), \quad r \geq 0, \quad (2.72)$$

sendo  $L_{-1}^{\alpha*}(x) \equiv 0$ ,  $L_0^{\alpha*}(x) = \frac{1}{\sqrt{\Gamma(\alpha + 1)}}$ ,

$$\alpha_r = \frac{b_r}{a_r} = \alpha + 2r + 1, \quad r \geq 0, \quad (2.73)$$

$$\beta_r = \frac{\gamma_{\phi_r}}{a_{r-1}^2 \gamma_{\phi_{r-1}}} = r(\alpha + r), \quad r \geq 1. \quad (2.74)$$

## 2.4 Polinômios de Laguerre

Definindo  $\alpha = 0$  na seqüência  $\{L_r^\alpha(x)\}_{r=0}^\infty$ , obtém-se os **polinômios de Laguerre**  $L_r(\mathbf{x})$ , um caso particular dos polinômios de Laguerre generalizados. Desta forma, os polinômios de Laguerre são definidos no intervalo  $[0, \infty)$  com a função peso  $w(x) = e^{-x}$ .

A fórmula de Rodrigues para este caso é

$$L_r(x) = \frac{1}{r!} e^x \frac{d^r}{dx^r} \left\{ e^{-x} x^r \right\}.$$

Os seis primeiros polinômios de Laguerre são

$$L_0(x) = 1,$$

$$L_1(x) = -x + 1,$$

$$L_2(x) = \frac{1}{2}x^2 - 2x + 1,$$

$$L_3(x) = -\frac{1}{6}x^3 + \frac{3}{2}x^2 - 3x + 1,$$

$$L_4(x) = \frac{1}{24}x^4 - \frac{2}{3}x^3 + 3x^2 - 4x + 1, \quad L_5(x) = -\frac{1}{120}x^5 + \frac{5}{24}x^4 - \frac{5}{3}x^3 + 5x^2 - 5x + 1.$$

A Figura 5 apresenta os gráficos dos polinômios acima no intervalo  $[0, 8]$ .

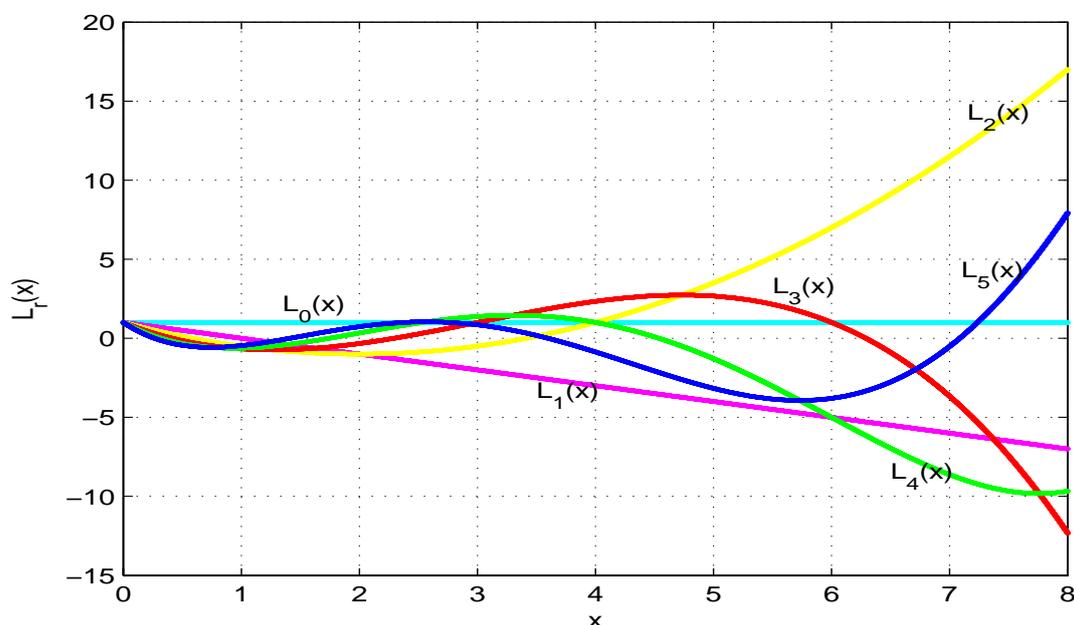


Figura 5: Polinômios de Laguerre de grau até 5.

A fórmula de recorrência de três termos para  $L_r(x)$  é

$$L_{r+1}(x) = \left( -\frac{x}{r+1} + \frac{2r+1}{r+1} \right) L_r(x) - \frac{r}{r+1} L_{r-1}(x), \quad r \geq 0, \quad (2.75)$$

$$L_{-1}(x) \equiv 0, \quad L_0(x) = 1.$$

Uma fórmula envolvendo a derivada de  $L_r(x)$  (Szegő, 1975) é

$$xL'_r(x) = r(L_r(x) - L_{r-1}(x)). \quad (2.76)$$

Por (2.66), a norma dos polinômios ortogonais de Laguerre  $\gamma_{\phi_r} = 1$ , isto é, eles são

ortonormais e  $L_{r+1}(x) = L_{r+1}^*(x)$ . Deste modo, pelo Teorema 2.7, tem-se que

$$\sqrt{\beta_{r+1}}L_{r+1}^*(x) = (x - \alpha_r)L_r^*(x) + \sqrt{\beta_r}L_{r-1}^*(x), \quad r \geq 0, \quad (2.77)$$

$$L_{-1}^*(x) \equiv 0, \quad L_0^*(x) = 1,$$

$$\alpha_r = 2r + 1, \quad r \geq 0, \quad (2.78)$$

$$\beta_r = r^2, \quad r \geq 1. \quad (2.79)$$

## 2.5 Polinômios de Hermite

Quando a seqüência de polinômios ortogonais  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$  é definida com  $w(x) = e^{-x^2}$  sobre intervalo  $(-\infty, \infty)$ , tem-se que a equação diferencial (2.12) toma a forma

$$\frac{d^{r+1}}{dx^{r+1}} \left\{ e^{x^2} \frac{d^r V_r(x)}{dx^r} \right\} = 0, \quad (2.80)$$

com  $2r$  condições de contorno

$$V_r(\pm\infty) = V_r'(\pm\infty) = V_r''(\pm\infty) = \dots = V_r^{(r-1)}(\pm\infty) = 0. \quad (2.81)$$

Afirma-se que  $V_r(x) = K_r e^{-x^2}$ , onde  $K_r$  é uma constante, pois aplicando a regra de Leibniz ao termo interno às chaves em (2.80),

$$\frac{d^r}{dx^r} \left\{ K_r e^{-x^2} \right\} = K_r e^{-x^2} r! \sum_{i=0}^{\lfloor r/2 \rfloor} \frac{(-1)^{i-r}}{i!} \frac{(2x)^{r-2i}}{(r-2i)!}.$$

Ficando demonstrado que  $e^{x^2} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ K_r e^{-x^2} \right\}$  é um polinômio de grau  $r$  e também que  $V_r(x) = K_r e^{-x^2}$  satisfaz a equação (2.80). Por outro lado, cada um dos termos de  $\frac{d^j}{dx^j} \left\{ K_r e^{-x^2} \right\}$ ,  $j = 0, 1, \dots, r-1$ , são da forma  $\frac{x^l}{e^{x^2}}$ , para algum  $l$  natural, a menos de uma constante. Como  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{x^l}{e^{x^2}} = 0$ , então as condições de contorno (2.81) são satisfeitas.

Assim, pela fórmula de Rodrigues (2.11),

$$\phi_r(x) = K_r e^{x^2} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ e^{-x^2} \right\}.$$

Com  $K_r = (-1)^r$  obtém-se o **polinômio de Hermite  $H_r(x)$**  (Szegö, 1975) de grau  $r$ ,

$$H_r(x) = (-1)^r e^{x^2} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ e^{-x^2} \right\}, \quad (2.82)$$

cuja seqüência é representada por  $\{H_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$ .

Os seis primeiros polinômios de Hermite são

$$H_0(x) = 1,$$

$$H_1(x) = 2x,$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2,$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x,$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12,$$

$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x.$$

A Figura 6 apresenta os gráficos dos cinco primeiros polinômios acima no intervalo  $[-2, 2]$ . Verifica-se que os zeros são reais e distintos, como mostrou o Teorema 2.3. Além disto, percebe-se que os zeros são simétricos com relação à origem, pois  $w(x) = e^{-x^2}$  é uma função par sobre o intervalo  $(-\infty, \infty)$ , conforme o Corolário 2.9.1. Nota-se que os zeros se entrelaçam.

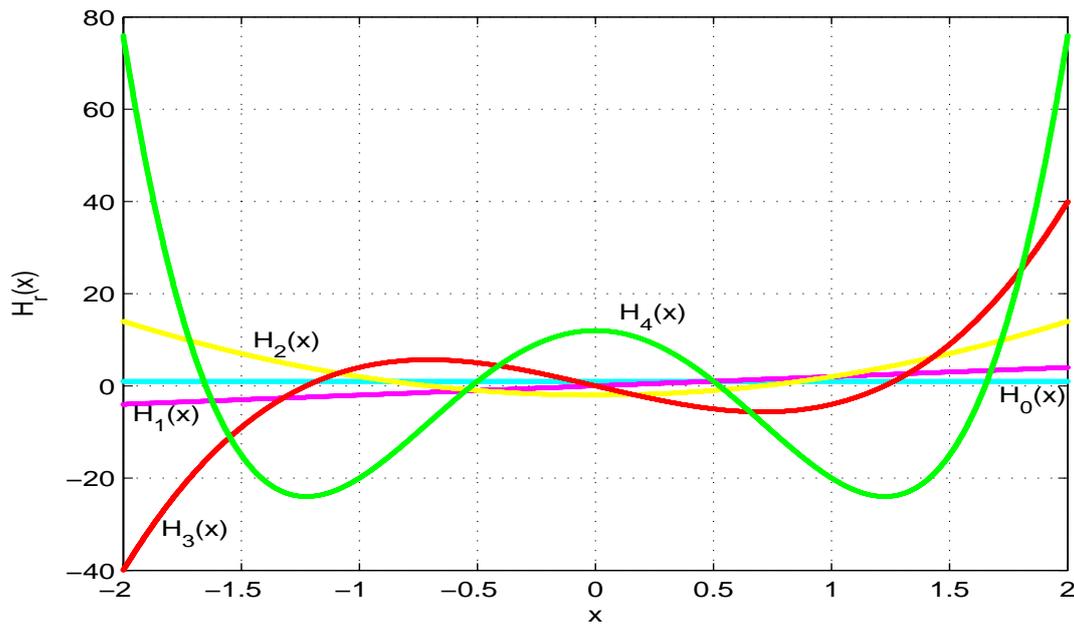


Figura 6: Polinômios de Hermite de grau até 4.

A forma fechada do polinômio de Hermite (Szegő, 1975) é

$$H_r(x) = r! \sum_{i=0}^{\lfloor r/2 \rfloor} \frac{(-1)^i (2x)^{r-2i}}{i! (r-2i)!},$$

cujos coeficiente dominante é

$$A_r = 2^r. \quad (2.83)$$

De (2.28) calcula-se

$$\begin{aligned}\gamma_{\phi_r} &= (-1)^r r! A_r \int_a^b V_r(x) dx, \\ &= (-1)^r r! 2^r \int_{-\infty}^{\infty} (-1)^r e^{-x^2} dx, \\ \gamma_{\phi_r} &= 2^r r! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx.\end{aligned}\tag{2.84}$$

Para calcular a integral acima, denota-se  $I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$ . Conseqüentemente,

$$I^2 = \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \right) \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx dy.$$

Esta integral dupla pode ser calculada em termos de coordenadas polares, isto é,

$$\begin{aligned}I^2 &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr d\theta, \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr, \\ I^2 &= 2\pi \left[ \frac{-e^{-r^2}}{2} \right]_0^{\infty} = \pi \quad \implies \quad I = \sqrt{\pi}.\end{aligned}$$

Portanto,

$$\gamma_{\phi_r} = 2^r r! \sqrt{\pi}.\tag{2.85}$$

De acordo com o Teorema 2.4 os polinômios de Hermite podem ser determinados segundo uma fórmula de recorrência de três termos, a partir de  $a_r$ ,  $b_r$  e  $c_r$ , obtidos segundo as equações (2.19), (2.21) e (2.23). De (2.19) tem-se

$$a_r = 2.\tag{2.86}$$

Desde que  $w(x) = e^{-x^2}$  e o intervalo  $(-\infty, \infty)$  é simétrico com relação à origem, o Corolário 2.9.2 conduz a

$$b_r = 0.\tag{2.87}$$

De (2.23),

$$c_r = 2r.\tag{2.88}$$

Notando os resultados (2.86), (2.87) e (2.88) no Teorema 2.4, tem-se a equação de recor-

rência para  $H_r(x)$ ,

$$H_{r+1}(x) = 2xH_r(x) - 2rH_{r-1}(x), \quad r \geq 0, \quad (2.89)$$

$$H_{-1}(x) \equiv 0, \quad H_1(x) = 0.$$

Pela fórmula de Rodrigues para o polinômio de Hermite, tem-se que

$$\frac{d^r}{dx^r} \left\{ e^{-x^2} \right\} = (-1)^r e^{-x^2} H_r(x),$$

$$\frac{d^{r+1}}{dx^{r+1}} \left\{ e^{-x^2} \right\} = (-1)^r (-2xe^{-x^2} H_r(x) + e^{-x^2} H'_r(x)),$$

$$\begin{aligned} (-1)^{r+1} e^{-x^2} H_{r+1}(x) &= (-1)^r (-2xe^{-x^2} H_r(x) + e^{-x^2} H'_r(x)), \\ H'_r(x) &= 2xH_r(x) - H_{r+1}(x). \end{aligned} \quad (2.90)$$

Por outro lado, pela equação de recorrência para  $H_r(x)$ , tem-se que

$$2rH_{r-1}(x) = 2xH_r(x) - H_{r+1}(x). \quad (2.91)$$

Notando (2.90) e (2.91) obtém-se uma relação envolvendo a derivada do polinômio de Hermite

$$H'_r(x) = 2rH_{r-1}(x) = 2xH_r(x) - H_{r+1}(x). \quad (2.92)$$

Os polinômios ortonormais de Hermite  $H_r^*(x)$  são dados segundo a normalização  $\frac{\pi^{-\frac{1}{4}} H_r(x)}{\sqrt{2^r r!}}$ . A equação de recorrência para a seqüência de tais polinômios é dada pelo Teorema 2.7, notando as formas de  $\alpha_r$  e  $\beta_r$  nas equações (2.32) e (2.33),

$$\sqrt{\beta_{r+1}} H_{r+1}^*(x) = x H_r^*(x) + \sqrt{\beta_r} H_{r-1}^*(x), \quad r \geq 0, \quad (2.93)$$

sendo  $H_{-1}^*(x) \equiv 0$ ,  $H_0^*(x) = \pi^{-\frac{1}{4}}$ ,

$$\alpha_r = \frac{b_r}{a_r} = 0, \quad r \geq 0, \quad (2.94)$$

$$\beta_r = \frac{\gamma_{\phi_r}}{a_{r-1}^2 \gamma_{\phi_{r-1}}} = \frac{r}{2}, \quad r \geq 1. \quad (2.95)$$

## 2.6 Polinômios de Jacobi

No caso em que a seqüência de polinômios ortogonais é definida com a função peso  $w(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$ , onde  $\alpha > -1$  e  $\beta > -1$ , sobre o intervalo  $[-1, 1]$ , tem-se que a

equação diferencial (2.12) torna-se

$$\frac{d^{r+1}}{dx^{r+1}} \left\{ (1-x)^{-\alpha} (1+x)^{-\beta} \frac{d^r V_r(x)}{dx^r} \right\} = 0, \quad (2.96)$$

com  $2r$  condições de contorno

$$V_r(\pm 1) = V_r'(\pm 1) = V_r''(\pm 1) = \dots = V_r^{(r-1)}(\pm 1) = 0. \quad (2.97)$$

Afirma-se que  $V_r(x) = K_r(1-x)^{r+\alpha}(1+x)^{r+\beta}$ , onde  $K_r$  é uma constante, pois aplicando a regra de Leibniz ao termo entre chaves da equação (2.96),

$$\begin{aligned} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ K_r(1-x)^{r+\alpha}(1+x)^{r+\beta} \right\} &= K_r \sum_{i=0}^r \binom{r}{i} \frac{d^{r-i}}{dx^{r-i}} \left\{ (1-x)^{r+\alpha} \right\} \frac{d^i}{dx^i} \left\{ (1+x)^{r+\beta} \right\}, \\ \frac{d^r}{dx^r} \left\{ K_r(1-x)^{r+\alpha}(1+x)^{r+\beta} \right\} &= K_r \sum_{i=0}^r (-1)^{r-i} \binom{r}{i} (r+\alpha)(r+\alpha-1)\dots(i+\alpha+1) \\ &\quad \times (r+\beta)(r+\beta-1)\dots(r+\beta-i+1)(1-x)^{i+\alpha} \\ &\quad \times (1+x)^{r-i+\beta}, \end{aligned}$$

ficando demonstrado que  $(1-x)^{-\alpha}(1+x)^{-\beta} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ K_r(1-x)^{r+\alpha}(1+x)^{r+\beta} \right\}$  é um polinômio de grau  $r$  e que  $V_r(x) = K_r(1-x)^{r+\alpha}(1+x)^{r+\beta}$  satisfaz à equação (2.96). Ainda pela regra de Leibniz, os termos de  $\frac{d^j}{dx^j} \left\{ K_r(1-x)^{r+\alpha}(1+x)^{r+\beta} \right\}$ ,  $j = 0, \dots, r-1$ , são da forma  $(1-x)^{r+\alpha-j+i}(1+x)^{r-i+\beta}$ . Estes termos se anulam em  $x = \pm 1$ , pois  $r+\alpha-j+i > 0$  e  $r-i+\beta > 0$ . Assim, as condições de contorno (2.97) são satisfeitas.

Portanto, da fórmula de Rodrigues em (2.11),

$$\phi_r(x) = K_r(1-x)^{-\alpha}(1+x)^{-\beta} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ (1-x)^{r+\alpha}(1+x)^{r+\beta} \right\}. \quad (2.98)$$

Tomando  $K_r = \frac{(-1)^r}{2^r r!}$ , o **polinômio de Jacobi**  $P_r^{(\alpha, \beta)}(x)$ , (Szegö, 1975) de grau  $r$  é dado por

$$P_r^{(\alpha, \beta)}(x) = \frac{(-1)^r}{2^r r!} (1-x)^{-\alpha}(1+x)^{-\beta} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ (1-x)^{r+\alpha}(1+x)^{r+\beta} \right\},$$

cuja seqüência é representada por  $\{P_r^{(\alpha, \beta)}(x)\}_{r=0}^{\infty}$ . Um caso particular deste resultado é o polinômio de Legendre  $P_r(x)$  com a escolha  $\alpha = \beta = 0$ .

Uma forma fechada de (2.98) é (Szegö, 1975)

$$\phi_r(x) = (-1)^r K_r 2^r r! \sum_{i=0}^r \binom{r+\alpha+\beta+i}{i} \binom{r+\alpha}{r-i} \left( \frac{x-1}{2} \right)^i, \quad (2.99)$$

desde que  $r + \alpha + \beta \in \mathbb{R} - \mathbb{Z}_-^*$  em decorrência do domínio da função  $\Gamma(t)$ . Seu coeficiente dominante é

$$A_r = (-1)^r K_r \frac{\Gamma(2r + \alpha + \beta + 1)}{\Gamma(r + \alpha + \beta + 1)}, \quad r + \alpha + \beta \in \mathbb{R} - \mathbb{Z}_-^*. \quad (2.100)$$

Portanto, o coeficiente dominante do polinômio de Jacobi  $P_r^{(\alpha, \beta)}(x)$  é

$$A_r = \frac{1}{2^r r!} \frac{\Gamma(2r + \alpha + \beta + 1)}{\Gamma(r + \alpha + \beta + 1)}, \quad r + \alpha + \beta \in \mathbb{R} - \mathbb{Z}_-^*. \quad (2.101)$$

A partir de (2.100) calcula-se (2.28),

$$\begin{aligned} \gamma_{\phi_r} &= (-1)^r r! A_r \int_a^b V_r(x) dx, \\ &= (-1)^r r! (-1)^r K_r \frac{\Gamma(2r + \alpha + \beta + 1)}{\Gamma(r + \alpha + \beta + 1)} \int_{-1}^1 K_r (1-x)^{r+\alpha} (1+x)^{r+\beta} dx, \\ \gamma_{\phi_r} &= K_r^2 r! \frac{\Gamma(2r + \alpha + \beta + 1)}{\Gamma(r + \alpha + \beta + 1)} \int_{-1}^1 (1-x)^{r+\alpha} (1+x)^{r+\beta} dx, \end{aligned}$$

mas tem-se que  $\int_{-1}^1 (1-x)^{r+\alpha} (1+x)^{r+\beta} dx = 2^{2r+\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(r+\alpha+1) \Gamma(r+\beta+1)}{\Gamma(2r+\alpha+\beta+2)}$ , (Kythe e Schäferkötter, 2005), resultando

$$\begin{aligned} \gamma_{\phi_r} &= K_r^2 2^{2r+\alpha+\beta+1} r! \frac{\Gamma(2r + \alpha + \beta + 1)}{\Gamma(r + \alpha + \beta + 1)} \frac{\Gamma(r + \alpha + 1) \Gamma(r + \beta + 1)}{\Gamma(2r + \alpha + \beta + 2)}, \\ \gamma_{\phi_r} &= K_r^2 \frac{2^{2r+\alpha+\beta+1} r!}{2r + \alpha + \beta + 1} \frac{\Gamma(r + \alpha + 1) \Gamma(r + \beta + 1)}{\Gamma(r + \alpha + \beta + 1)}, \end{aligned} \quad (2.102)$$

com  $r + \alpha + \beta \in \mathbb{R} - \mathbb{Z}_-^*$ .

Portanto, o coeficiente  $\gamma_{\phi_r}$  associado ao polinômio de Jacobi  $P_r^{(\alpha, \beta)}(x)$  é

$$\gamma_{\phi_r} = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{(2r + \alpha + \beta + 1)r!} \frac{\Gamma(r + \alpha + 1) \Gamma(r + \beta + 1)}{\Gamma(r + \alpha + \beta + 1)}, \quad r + \alpha + \beta \in \mathbb{R} - \mathbb{Z}_-^*. \quad (2.103)$$

Nota-se que  $r + \alpha + \beta \notin \mathbb{R} - \mathbb{Z}_-^*$  apenas quando  $\alpha + \beta = -1$  e  $r = 0$ . Para este caso tem-se, de (2.99), que  $\phi_0(x) = K_0$ , então  $A_0 = K_0$ . Conseqüentemente, por (2.28),

$$\gamma_{\phi_0} = K_0^2 2^{\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(\alpha + 1) \Gamma(\beta + 1)}{\Gamma(\alpha + \beta + 2)}. \quad (2.104)$$

A equação de recorrência do polinômio de Jacobi pode ser determinada a partir de

$a_r$ ,  $b_r$  e  $c_r$ , em (2.19), (2.27) e (2.23). De (2.19),

$$a_r = \frac{(2r + \alpha + \beta + 2)(2r + \alpha + \beta + 1)}{2(r + 1)(r + \alpha + \beta + 1)}, \quad r \geq 1. \quad (2.105)$$

Por (2.23),

$$c_r = \frac{(2r + \alpha + \beta + 2)(r + \alpha)(r + \beta)}{(r + 1)(r + \alpha + \beta + 1)(2r + \alpha + \beta)}, \quad r \geq 1. \quad (2.106)$$

*A priori*, o termo  $c_r$  deveria ser válido apenas para  $r \geq 2$  em virtude do termo  $A_{r-1}$  que está presente em  $a_{r-1}$  e em  $\gamma_{\phi_{r-1}}$ . No entanto,  $A_{r-1}$  é cancelado no produto  $a_{r-1}\gamma_r$ , o que torna  $c_r$  válido para  $r \geq 1$ .

O termo  $b_r$  para  $P_r^{(\alpha, \beta)}(x)$  é obtido de forma diferente da fórmula em (2.27). Primeiramente, observa-se que na fórmula de recorrência (2.15), o termo em  $x^r$ , do lado direito é  $(A_{r,r-1}a_r - A_r b_r)x^r$  e do lado esquerdo é  $A_{r+1,r}x^r$ . Desta maneira, impondo a igualdade entre os termos,

$$b_r = \frac{A_{r,r-1}a_r - A_{r+1,r}}{A_r}. \quad (2.107)$$

Pela forma fechada em (2.99), com  $K_r = \frac{(-1)^r}{2^r r!}$  tem-se

$$A_{r+1,r} = \frac{\Gamma(2r + \alpha + \beta + 2)(\alpha - \beta)}{2^{r+1} r! \Gamma(r + \alpha + \beta + 2)}, \quad A_{r,r-1} = \frac{\Gamma(2r + \alpha + \beta)(\alpha - \beta)}{2^r (r-1)! \Gamma(r + \alpha + \beta + 1)}, \quad r \geq 1. \quad (2.108)$$

Notando (2.101), (2.105) e (2.108) em (2.107), obtém-se

$$b_r = \frac{(2r + \alpha + \beta + 1)(\alpha^2 - \beta^2)}{2(r + 1)(r + \alpha + \beta + 1)(2r + \alpha + \beta)}, \quad r \geq 1. \quad (2.109)$$

Portanto, pelo Teorema 2.4, a equação de recorrência para  $P_r^{(\alpha, \beta)}(x)$  é

$$\begin{aligned} 2(r + 1)(r + \alpha + \beta + 1)(2r + \alpha + \beta)P_{r+1}^{(\alpha, \beta)}(x) &= (2r + \alpha + \beta + 1) \left[ (2r + \alpha + \beta + 2) \right. \\ &\quad \left. \times (2r + \alpha + \beta)x + \alpha^2 - \beta^2 \right] P_r^{(\alpha, \beta)}(x) \\ &\quad - 2(r + \alpha)(r + \beta)(2r + \alpha + \beta + 2)P_{r-1}^{(\alpha, \beta)}(x), \end{aligned} \quad (2.110)$$

$$\forall r \geq 1, P_0^{(\alpha, \beta)}(x) = 1, P_1^{(\alpha, \beta)}(x) = \frac{1}{2}(\alpha + \beta + 2)x + \frac{1}{2}(\alpha - \beta).$$

Duas relações envolvendo a derivada do polinômio  $P_r^{(\alpha, \beta)}(x)$  são (Szegő, 1975):

$$\begin{aligned} (2r + \alpha + \beta + 2)(1 - x^2)P_r^{(\alpha, \beta)'}(x) &= (r + \alpha + \beta + 1) \\ &\quad \times \left[ (2r + \alpha + \beta + 2)x + \alpha - \beta \right] P_r^{(\alpha, \beta)}(x) \end{aligned}$$

$$-2(r+1)(r+\alpha+\beta+1)P_{r+1}^{(\alpha,\beta)}(x), \quad (2.111)$$

$$\begin{aligned} (2r+\alpha+\beta)(1-x^2)P_r^{(\alpha,\beta)'}(x) &= -r\left[(2r+\alpha+\beta)x+\beta-\alpha\right]P_r^{(\alpha,\beta)}(x) \\ &+ 2(r+\alpha)(r+\beta)P_{r-1}^{(\alpha,\beta)}(x), \end{aligned} \quad (2.112)$$

Os polinômios ortonormais de Jacobi  $P_r^{(\alpha,\beta)*}(x)$  são obtidos segundo a normalização  $\frac{P_r^{(\alpha,\beta)}(x)}{\gamma_{\phi_r}}$ , para  $r \geq 1$ . A equação de recorrência para a seqüência  $\{P_r^{(\alpha,\beta)*}(x)\}_{r=0}^{\infty}$  é dada pelo Teorema 2.7, notando as formas de  $\alpha_r$  e  $\beta_r$  nas equações (2.32) e (2.33),

$$\sqrt{\beta_{r+1}}P_{r+1}^{(\alpha,\beta)*}(x) = (x-\alpha_r)P_r^{(\alpha,\beta)*}(x) + \sqrt{\beta_r}P_{r-1}^{(\alpha,\beta)*}(x), \quad r \geq 0, \quad (2.113)$$

sendo  $P_{-1}^{(\alpha,\beta)*}(x) \equiv 0$ ,  $P_0^{(\alpha,\beta)*}(x) = \sqrt{\frac{\Gamma(\alpha+\beta+2)}{2^{\alpha+\beta+1}\Gamma(\alpha+1)\Gamma(\beta+1)}}$ ,

$$\alpha_r = \frac{b_r}{a_r} = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{(2r+\alpha+\beta)(2r+\alpha+\beta+2)}, \quad r \geq 1, \quad (2.114)$$

$$\alpha_0 = \frac{b_0}{a_0} = \frac{\beta - \alpha}{\alpha + \beta + 2}, \quad (2.115)$$

$$\beta_r = \frac{\gamma_{\phi_r}}{a_{r-1}^2\gamma_{\phi_{r-1}}} = \frac{4r(r+\alpha)(r+\beta)(r+\alpha+\beta)}{(2r+\alpha+\beta+1)(2r+\alpha+\beta-1)(2r+\alpha+\beta)^2}, \quad r \geq 2, \quad (2.116)$$

$$\beta_1 = \frac{\gamma_{\phi_1}}{a_0^2\gamma_{\phi_0}} = \frac{4(1+\alpha)(1+\beta)}{(\alpha+\beta+3)(\alpha+\beta+2)^2}. \quad (2.117)$$

## 2.7 Polinômios de Chebyshev de 1ª espécie

Quando a seqüência  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$  for definida com  $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$  sobre o intervalo  $[-1, 1]$ , obtém-se um caso particular da seqüência dos polinômios de Jacobi quando sua função peso é escolhida com  $\alpha = \beta = -\frac{1}{2}$ . Nesta situação, obtém-se, de (2.98), a seguinte relação

$$\phi_r(x) = K_r \sqrt{1-x^2} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ (1-x^2)^{r-\frac{1}{2}} \right\}.$$

Tomando  $K_r = \frac{(-2)^r r!}{(2r)!}$ , obtém-se a fórmula de Rodrigues para o **polinômio de Chebyshev de 1ª espécie**  $T_r(x)$  (Szegö, 1975), de grau  $r$ ,

$$T_r(x) = \frac{(-2)^r r!}{(2r)!} \sqrt{1-x^2} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ (1-x^2)^{r-\frac{1}{2}} \right\},$$

cuja seqüência é representada por  $\{T_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$ . De (2.99) obtém-se sua forma fechada,

$$T_r(x) = \frac{2^{2r}(r!)^2}{(2r)!} \sum_{i=0}^r \binom{r-1+i}{i} \binom{r-\frac{1}{2}}{r-i} \left(\frac{x-1}{2}\right)^i, \quad \forall r \geq 1. \quad (2.118)$$

Os seis primeiros polinômios de Chebyshev de 1ª espécie são

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x,$$

$$T_2(x) = 2x^2 - 1,$$

$$T_3(x) = 4x^3 - 3x,$$

$$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1,$$

$$T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x.$$

A Figura 7 mostra os gráficos dos seis polinômios acima no intervalo  $[-1, 1]$ . Verifica-se que os zeros são reais, distintos e contidos no interior deste intervalo, conforme mostrou o Teorema 2.3. Nota-se também que os zeros são simétricos, pois os polinômios  $T_r(x)$  são funções pares ou ímpares (Corolário 2.9.1). Além disto, percebe-se que os zeros se entrelaçam.

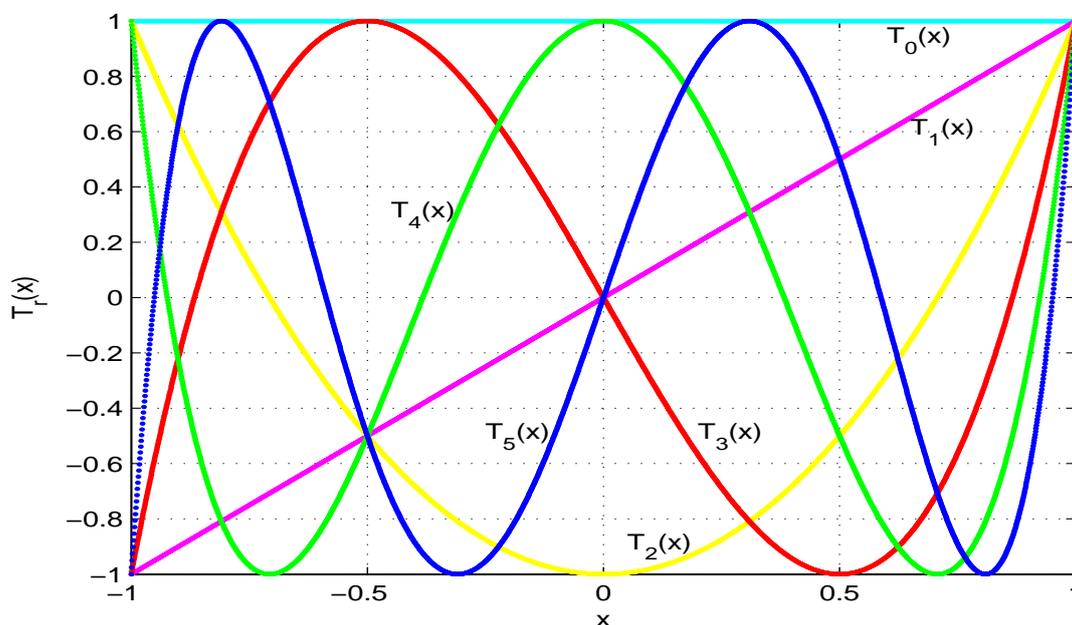


Figura 7: Polinômios de Chebyshev de 1ª espécie de grau até 5.

De (2.100) obtém-se o coeficiente dominante do polinômio de Chebyshev de 1ª espécie

$$A_r = \frac{2^r r}{2r} = 2^{r-1}, \quad \forall r \geq 1. \quad (2.119)$$

Calcula-se  $\gamma_{\phi_r}$  em (2.102),

$$\gamma_{\phi_r} = \left( \frac{(-2)^r r!}{(2r)!} \right)^2 \frac{2^{2r} r!}{2r} \frac{\Gamma(r + \frac{1}{2}) \Gamma(r + \frac{1}{2})}{\Gamma(r)}.$$

Mas a função  $\Gamma(t)$  possui a seguinte propriedade (Abramowitz e Stegun, 1972)

$$\Gamma\left(t + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2t-1)(2t-3)\dots 5 \cdot 3 \cdot 1}{2^t} \sqrt{\pi}, \quad t \in \mathbb{N}. \quad (2.120)$$

Conseqüentemente,

$$\begin{aligned} \gamma_{\phi_r} &= \frac{2^{4r-1} (r!)^3 (2r-1)^2 (2r-3)^2 \dots 5^2 \cdot 3^2 \cdot 1^2}{r(2r!)^2 2^{2r} (r-1)!} \pi, \\ &= \frac{2^{2r-1} (r!)^2}{(2r!)^2} (2r-1)^2 (2r-3)^2 \dots 5^2 \cdot 3^2 \cdot 1^2 \pi, \\ &= 2^{2r-1} (r!)^2 \frac{(2r-1)^2 (2r-3)^2 \dots 5^2 \cdot 3^2 \cdot 1^2}{(2r)^2 (2r-1)^2 (2r-2)^2 \dots 4^2 \cdot 3^2 \cdot 2^2 \cdot 1^2} \pi, \\ &= 2^{2r-1} (r!)^2 \frac{\pi}{(2r)^2 (2r-2)^2 \dots 4^2 \cdot 2^2}, \\ &= 2^{2r-1} \frac{r^2 (r-1)^2 (r-2)^2 \dots 3^2 \cdot 2^2 \cdot 1^2}{(2r)^2 (2(r-1))^2 (2(r-2))^2 \dots (2 \cdot 3)^2 \cdot (2 \cdot 2)^2 \cdot (2 \cdot 1)^2} \pi, \\ &= \frac{2^{2r-1}}{2^{2r}} \frac{r^2 (r-1)^2 (r-2)^2 \dots 3^2 \cdot 2^2 \cdot 1^2}{r^2 (r-1)^2 (r-2)^2 \dots 3^2 \cdot 2^2 \cdot 1^2} \pi, \\ \gamma_{\phi_r} &= \frac{\pi}{2}, \quad \forall r \geq 1. \end{aligned} \quad (2.121)$$

De (2.104),

$$\gamma_{\phi_0} = \left( \frac{(-2)^0 0!}{0!} \right)^2 2^0 \frac{\Gamma(\frac{1}{2}) \Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(1)},$$

contudo  $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$ , implicando que  $\gamma_{\phi_0} = \pi$ .

Para obter a equação de recorrência de três termos do Teorema 2.4, tem-se que, de (2.19)

$$a_r = 2, \quad \forall r \geq 1. \quad (2.122)$$

Uma vez que  $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$  é uma função par e o intervalo  $[-1, 1]$  é simétrico com

relação à origem, então, pelo Corolário 2.9.2,

$$b_r = 0. \quad (2.123)$$

De (2.23),

$$c_r = 1, \quad \forall r \geq 1. \quad (2.124)$$

Pelo Teorema 2.4, com (2.122), (2.123) e (2.124), tem-se a equação de recorrência para  $T_r(x)$ ,

$$T_{r+1}(x) = 2xT_r(x) - T_{r-1}(x), \quad \forall r \geq 1. \quad (2.125)$$

Os polinômios de Chebyshev de 1ª espécie também se apresentam na forma trigonométrica  $T_r(x) = T_r(\cos(\theta)) = \cos(r\theta)$ , onde  $-1 \leq x \leq 1$ . Para perceber este fato, introduz-se a mudança de variável  $x = \cos(\theta)$ . Segue que

$$x = -1 \Rightarrow \cos(\theta) = -1 \Rightarrow \theta = \pi,$$

$$x = 1 \Rightarrow \cos(\theta) = 1 \Rightarrow \theta = 0,$$

$$x = \cos(\theta) \Rightarrow dx = -\text{sen}(\theta) d\theta,$$

$$w(\cos(\theta)) = \frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2(\theta)}} = \frac{1}{\sqrt{\text{sen}^2(\theta)}} = \frac{1}{\text{sen}(\theta)}, \quad 0 < \theta < \pi.$$

Assim, a equação (2.2) assume a forma

$$-\int_{\pi}^0 \frac{\phi_r(\cos(\theta))q_{r-1}(\cos(\theta))\text{sen}(\theta)}{\text{sen}(\theta)} d\theta = 0 \implies \int_0^{\pi} \phi_r(\cos(\theta))q_{r-1}(\cos(\theta)) d\theta = 0.$$

Desde que  $\cos(k\theta)$  pode ser representado por um polinômio de grau  $k$  em  $\cos(\theta)$  e, reciprocamente, qualquer polinômio de grau  $k$  em  $\cos(\theta)$  pode ser desenvolvido como uma combinação linear dos termos  $1, \cos(\theta), \cos(2\theta), \dots, \cos(k\theta)$ , segue que a condição anterior é satisfeita se, e somente se,

$$\int_0^{\pi} \phi_r(\cos(\theta)) \cos(k\theta) d\theta = 0, \quad k = 0, 1, \dots, r-1.$$

Afirma-se que  $\phi_r(\cos(\theta)) = K_r \cos(r\theta)$ , onde  $K_r$  é constante. De fato, notando o produto de cossenos,  $\cos(u) \cos(v) = \frac{1}{2}(\cos(u+v) + \cos(u-v))$ , tem-se que

$$\begin{aligned} \int_0^{\pi} K_r \cos(r\theta) \cos(k\theta) d\theta &= \frac{K_r}{2} \left( \int_0^{\pi} \cos[(r+k)\theta] d\theta + \int_0^{\pi} \cos[(r-k)\theta] d\theta \right), \quad (2.126) \\ &= \frac{K_r}{2} \left( \frac{\text{sen}[(r+k)\theta]}{(r+k)} + \frac{\text{sen}[(r-k)\theta]}{(r-k)} \right) \Big|_0^{\pi}, \end{aligned}$$

$$\int_0^\pi K_r \cos(r\theta) \cos(k\theta) d\theta = 0, \quad k = 0, 1, \dots, r-1.$$

Retornando para a variável  $x$  tem-se  $\phi_r(x) = K_r \cos(r \arccos(x))$ . Fazendo  $K_r = 1$  tem-se o polinômio de Chebyshev de 1ª espécie de grau  $r$  (Szegő, 1975),

$$T_r(x) = \cos(r \arccos(x)), \quad -1 \leq x \leq 1 \quad \text{ou} \quad T_r(\cos(\theta)) = \cos(r\theta), \quad 0 \leq \theta \leq \pi. \quad (2.127)$$

Segundo o Teorema 2.3 os  $r$  zeros  $x_{r,i}$  de  $T_r(x)$ ,  $i = 1, 2, \dots, r$ , pertencem ao intervalo  $(-1, 1)$ . Então é possível encontrar uma fórmula para o  $i$ -ésimo zero, pois a forma trigonométrica deste polinômio está definida neste intervalo. Desta forma,

$$\begin{aligned} \cos(r \arccos(x_{r,i})) &= 0, \\ r \arccos(x_{r,i}) &= \frac{\pi}{2} + (i-1)\pi, \quad i = 1, 2, \dots, r, \\ \arccos x_{r,i} &= \frac{\pi}{2r} + \frac{(i-1)\pi}{r} = \frac{(2i-1)\pi}{2r}, \\ x_{r,i} &= \cos\left(\frac{(2i-1)\pi}{2r}\right), \quad i = 1, 2, \dots, r, \end{aligned} \quad (2.128)$$

onde  $x_{r,1} > x_{r,2} > \dots > x_{r,r}$ .

Os polinômios ortonormais de Chebyshev de 1ª espécie  $T_r^*(x)$  são dados pela normalização  $\sqrt{\frac{2}{\pi}} T_r(x)$ ,  $r \geq 1$ . A equação de recorrência para a seqüência  $\{T_r^*(x)\}_{r=0}^\infty$  é dada pelo Teorema 2.7, notando as formas de  $\alpha_r$  e  $\beta_r$  nas equações (2.32) e (2.33),

$$\sqrt{\beta_{r+1}} T_{r+1}^*(x) = x T_r^*(x) + \sqrt{\beta_r} T_{r-1}^*(x), \quad r \geq 0, \quad (2.129)$$

sendo  $T_{-1}^*(x) \equiv 0$ ,  $T_0^*(x) = \pi^{-\frac{1}{2}}$ ,

$$\alpha_r = \frac{b_r}{a_r} = 0, \quad r \geq 0, \quad (2.130)$$

$$\beta_r = \frac{\gamma_{\phi_r}}{a_{r-1}^2 \gamma_{\phi_{r-1}}} = \frac{1}{4}, \quad r \geq 2, \quad (2.131)$$

$$\beta_1 = \frac{\gamma_{\phi_1}}{a_0^2 \gamma_{\phi_0}} = \frac{1}{2}. \quad (2.132)$$

## 2.8 Polinômios de Chebyshev de 2ª espécie

Se a seqüência  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$  for definida com  $w(x) = \sqrt{1-x^2}$ , no intervalo  $[-1, 1]$ , tem-se um caso particular da função de ponderação do polinômio de Jacobi quando  $\alpha = \beta = \frac{1}{2}$ . Neste caso obtém-se de (2.98) a seguinte relação

$$\phi_r(x) = K_r \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ (1-x^2)^{r+\frac{1}{2}} \right\}.$$

Com a escolha  $K_r = \frac{(-2)^r (r+1)!}{(2r+1)!}$ , obtém-se o **polinômio de Chebyshev de 2ª espécie**  $U_r(x)$  de grau  $r$  (Szegő, 1975),

$$U_r(x) = \frac{(-2)^r (r+1)!}{(2r+1)!} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ (1-x^2)^{r+\frac{1}{2}} \right\},$$

ou fórmula de Rodrigues para  $U_r(x)$  cuja seqüência é representada por  $\{U_r(x)\}_{r=0}^{\infty}$ .

De (2.99) obtém-se sua forma fechada,

$$U_r(x) = \frac{2^{2r} (r+1) (r!)^2}{(2r+1)!} \sum_{i=0}^r \binom{r-1+i}{i} \binom{r-\frac{1}{2}}{r-i} \left( \frac{x-1}{2} \right)^i. \quad (2.133)$$

Os seis primeiros polinômios de Chebyshev de 2ª espécie são

$$U_0(x) = 1,$$

$$U_1(x) = 2x,$$

$$U_2(x) = 4x^2 - 1,$$

$$U_3(x) = 8x^3 - 4x,$$

$$U_4(x) = 16x^4 - 12x^2 + 1,$$

$$U_5(x) = 32x^5 - 32x^3 + 6x.$$

A Figura 8 mostra os gráficos dos seis polinômios acima com seus zeros no interior do intervalo  $[-1, 1]$ , conforme mostrou o Teorema 2.3. Percebe-se a simetria dos zeros com relação à origem, uma vez que estes polinômios são funções pares ou ímpares, de acordo com o Corolário 2.9.1. Verifica-se também que os zeros se entrelaçam.

De (2.100) obtém-se o coeficiente dominante do polinômio de Chebyshev de 2ª espécie,

$$A_r = (-1)^r \frac{(-2)^r (r+1)!}{(2r+1)!} \frac{\Gamma(2r+2)}{\Gamma(r+2)} = 2^r. \quad (2.134)$$

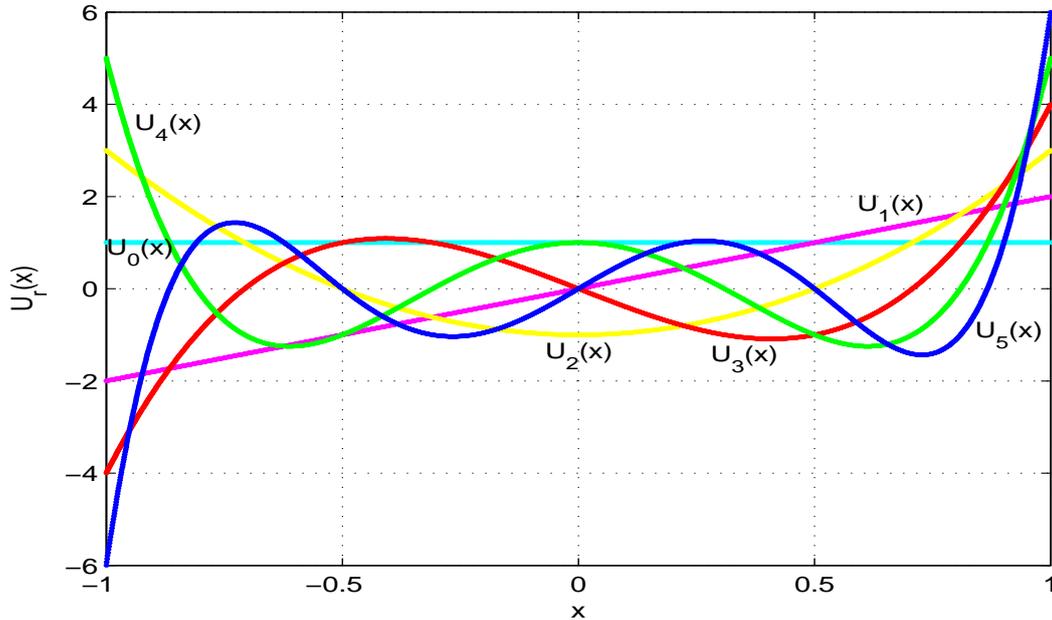


Figura 8: Polinômios de Chebyshev de 2ª espécie de grau até 5.

Calcula-se  $\gamma_{\phi_r}$  em (2.102),

$$\begin{aligned}
 \gamma_{\phi_r} &= \left( \frac{(-2)^r (r+1)!}{(2r+1)!} \right)^2 \frac{2^{2r+2} r!}{2r+2} \frac{\Gamma(r + \frac{1}{2} + 1) \Gamma(r + \frac{1}{2} + 1)}{\Gamma(r+2)}, \\
 &= \frac{2^{2r} [(r+1)!]^2}{[(2r+1)!]^2} \frac{2^{2r+2} r!}{(2r+1)} \frac{\Gamma^2[(r+1) + \frac{1}{2}]}{(r+1)!}, \\
 &= \frac{2^{4r+1} (r!)^2}{[(2r+1)!]^2} \frac{(2r+1)^2 (2r-1)^2 (2r-3)^2 \dots 5^2 \cdot 3^2 \cdot 1^2}{2^{2r+2}} \pi, \\
 &= 2^{2r-1} (r!)^2 \frac{(2r+1)^2 (2r-1)^2 (2r-3)^2 \dots 5^2 \cdot 3^2 \cdot 1^2}{(2r+1)^2 (2r)^2 (2r-1)^2 (2r-2)^2 \dots 4^2 \cdot 3^2 \cdot 2^2 \cdot 1^2} \pi, \\
 &= 2^{2r-1} (r!)^2 \frac{\pi}{(2r)^2 (2r-2)^2 \dots 4^2 \cdot 2^2}, \\
 &= 2^{2r-1} \frac{r^2 (r-1)^2 (r-2)^2 \dots 2^2 \cdot 1^2}{(2r)^2 (2r-1)^2 (2r-2)^2 \dots 2^4 \cdot 2^2} \pi, \\
 &= \frac{2^{2r-1}}{2^{2r}} \frac{r^2 (r-1)^2 (r-2)^2 \dots 2^2 \cdot 1^2}{r^2 (r-1)^2 (r-2)^2 \dots 2^2 \cdot 1^2} \pi, \\
 \gamma_{\phi_r} &= \frac{\pi}{2}.
 \end{aligned} \tag{2.135}$$

Para obter a equação de recorrência de três termos do Teorema 2.4, tem-se que, de (2.19)

$$a_r = 2. \quad (2.136)$$

Uma vez que  $w(x) = \sqrt{1-x^2}$  é uma função par e  $[-1, 1]$  é um intervalo simétrico com relação à origem, então, pelo Corolário 2.9.2,

$$b_r = 0. \quad (2.137)$$

De (2.23) tem-se

$$c_r = 1. \quad (2.138)$$

Pelo Teorema 2.4, com os resultados (2.136), (2.137) e (2.138), tem-se a equação de recorrência para  $U_r(x)$ ,

$$U_{r+1}(x) = 2xU_r(x) - U_{r-1}(x). \quad (2.139)$$

Os polinômios de Chebyshev de 2ª espécie também se apresentam na forma trigonométrica  $U_r(x) = U_r(\cos(\theta)) = \frac{\text{sen}[(r+1)\theta]}{\text{sen}(\theta)}$ , onde  $-1 < x < 1$ . Para perceber este fato, introduz-se a mudança de variável  $x = \cos(\theta)$ . Deste modo,

$$x \rightarrow -1 \Rightarrow \cos(\theta) \rightarrow -1 \Rightarrow \theta \rightarrow \pi,$$

$$x \rightarrow 1 \Rightarrow \cos(\theta) \rightarrow 1 \Rightarrow \theta \rightarrow 0,$$

$$x = \cos(\theta) \Rightarrow dx = -\text{sen}(\theta) d\theta,$$

$$w(\cos(\theta)) = \sqrt{1 - \cos^2(\theta)} = \sqrt{\text{sen}^2(\theta)} = \text{sen}(\theta).$$

Deste modo a equação (2.2) toma a forma

$$-\int_{\pi}^0 \text{sen}(\theta) \phi_r(\cos(\theta)) q_{r-1}(\cos(\theta)) \text{sen}(\theta) d\theta = 0,$$

$$\int_0^{\pi} \phi_r(\cos(\theta)) q_{r-1}(\cos(\theta)) \text{sen}^2(\theta) d\theta = 0.$$

Desde que  $\cos(k\theta)$  pode ser representado por um polinômio de grau  $k$  em  $\cos(\theta)$  e, reciprocamente, qualquer polinômio de grau  $k$  em  $\cos(\theta)$  pode ser desenvolvido como uma combinação linear dos termos  $1, \cos(\theta), \cos(2\theta), \dots, \cos(k\theta)$ , segue que a condição anterior é satisfeita se, e somente se,

$$\int_0^{\pi} \phi_r(\cos(\theta)) \cos(k\theta) \text{sen}^2(\theta) d\theta = 0, \quad k = 0, 1, \dots, r-1.$$

Afirma-se que  $\phi_r(\cos(\theta)) = K_r \frac{\text{sen}[(r+1)\theta]}{\text{sen}(\theta)}$ , onde  $K_r$  é constante. De fato,

$$K_r \int_0^\pi \frac{\text{sen}[(r+1)\theta]}{\text{sen}(\theta)} \cos(k\theta) \text{sen}^2(\theta) d\theta = K_r \int_0^\pi \text{sen}[(r+1)\theta] \text{sen}(\theta) \cos(k\theta) d\theta,$$

e fazendo uso do produto dos senos,  $\text{sen}(u) \text{sen}(v) = \frac{1}{2}(\cos(u-v) - \cos(u+v))$ , a integral anterior torna-se

$$\begin{aligned} \frac{K_r}{2} \int_0^\pi (\cos(r\theta) - \cos[(r+2)\theta]) \cos(k\theta) d\theta &= \frac{K_r}{2} \int_0^\pi \cos(r\theta) \cos(k\theta) d\theta \\ &\quad - \frac{K_r}{2} \int_0^\pi \cos[(r+2)\theta] \cos(k\theta) d\theta, \end{aligned}$$

mas analogamente à resolução de (2.126), as duas integrais do lado direito da equação anterior se anulam, levando ao resultado

$$\frac{K_r}{2} \int_0^\pi (\cos(r\theta) - \cos[(r+2)\theta]) \cos(k\theta) d\theta = 0, \quad k = 0, 1, \dots, r-1.$$

Retornando para a variável  $x$ , tem-se  $\phi_r(x) = K_r \frac{\text{sen}[(r+1) \arccos(x)]}{\sqrt{1-x^2}}$ . Escolhendo-se  $K_r = 1$  obtém-se o polinômio de Chebyshev de 2ª espécie de grau  $r$  (Szegő, 1975),

$$U_r(x) = \frac{\text{sen}[(r+1) \arccos(x)]}{\sqrt{1-x^2}}, \quad -1 < x < 1 \quad \text{ou} \quad U_r(\cos(\theta)) = \frac{\text{sen}[(r+1)\theta]}{\text{sen}(\theta)}, \quad 0 < \theta < \pi. \quad (2.140)$$

Desde que os  $r$  zeros  $x_{r,i}$  de  $U_r(x)$ ,  $i = 1, 2, \dots, r$ , pertencem ao intervalo  $(-1, 1)$  (Teorema 2.3), torna-se possível encontrar uma fórmula para o  $i$ -ésimo zero, pois a forma trigonométrica deste polinômio está definida neste intervalo. Assim,

$$\frac{\text{sen}[(r+1) \arccos(x_{r,i})]}{\sqrt{1-x_i^2}} = 0,$$

$$\text{sen}[(r+1) \arccos(x_{r,i})] = 0,$$

$$(r+1) \arccos(x_{r,i}) = i\pi, \quad i = 1, 2, \dots, r,$$

$$\arccos(x_{r,i}) = \frac{i\pi}{r+1},$$

$$x_{r,i} = \cos\left(\frac{i\pi}{r+1}\right), \quad i = 1, 2, \dots, r, \quad (2.141)$$

onde  $x_{r,1} > x_{r,2} > \dots > x_{r,r}$ .

Os polinômios ortonormais de Chebyshev de 2ª espécie  $U_r^*(x)$  são dados pela normalização  $\sqrt{\frac{2}{\pi}} U_r(x)$ . A equação de recorrência para a seqüência  $\{U_r^*(x)\}_{r=0}^\infty$  é dada pelo Teorema 2.7, notando as formas de  $\alpha_r$  e  $\beta_r$  nas equações (2.32) e (2.33),

$$\sqrt{\beta_{r+1}} U_{r+1}^*(x) = x U_r^*(x) + \sqrt{\beta_r} U_{r-1}^*(x), \quad r \geq 0, \quad (2.142)$$

sendo  $U_{-1}^*(x) \equiv 0$ ,  $U_0^*(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$ ,

$$\alpha_r = \frac{b_r}{a_r} = 0, \quad r \geq 0, \quad (2.143)$$

$$\beta_r = \frac{\gamma_{\phi_r}}{a_{r-1}^2 \gamma_{\phi_{r-1}}} = \frac{1}{4}, \quad r \geq 1. \quad (2.144)$$

## 2.9 Polinômios de Gegenbauer

Quando a seqüência de polinômios ortogonais for definida com  $w(x) = (1 - x^2)^{\mu - \frac{1}{2}}$ , com  $\mu > -\frac{1}{2}$  e  $\mu \neq 0$ , sobre o intervalo  $[-1, 1]$ , tem-se um caso particular da função de ponderação do polinômio de Jacobi quando  $\alpha = \beta = \mu - \frac{1}{2}$ . Neste caso obtém-se de (2.98) a seguinte relação

$$\phi_r(x) = K_r (1 - x^2)^{\frac{1}{2} - \mu} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ (1 - x^2)^{r + \mu - \frac{1}{2}} \right\}.$$

Fazendo  $K_r = \frac{(-1)^r \Gamma(\mu + \frac{1}{2}) \Gamma(r + 2\mu)}{2^r r! \Gamma(2\mu) \Gamma(r + \mu + \frac{1}{2})}$ , obtém-se o **polinômio de Gegenbauer**  $C_r^\mu(x)$  (Szegö, 1975) de grau  $r$ ,

$$C_r^\mu(x) = \frac{(-1)^r \Gamma(\mu + \frac{1}{2}) \Gamma(r + 2\mu)}{2^r r! \Gamma(2\mu) \Gamma(r + \mu + \frac{1}{2})} (1 - x^2)^{\frac{1}{2} - \mu} \frac{d^r}{dx^r} \left\{ (1 - x^2)^{r + \mu - \frac{1}{2}} \right\},$$

ou fórmula de Rodrigues para  $C_r^\mu(x)$ . Esta classe de polinômios também recebe o nome de *polinômios ultraesféricos* (Szegö, 1975).

De (2.99) obtém-se sua forma fechada. Uma outra representação da mesma pode ser encontrada em Szegö (1975),

$$C_r^\mu(x) = \frac{1}{\Gamma(\mu)} \sum_{i=0}^{\lfloor r/2 \rfloor} (-1)^i \frac{\Gamma(r - i + \mu)}{i!(r - 2i)!} (2x)^{r - 2i}.$$

Os quatro primeiros polinômios de Gegenbauer são

$$\begin{aligned} C_0^\mu(x) &= 1, & C_1^\mu(x) &= 2\mu x, \\ C_2^\mu(x) &= 2\mu(1 + \mu)x^2 - \mu, & C_3^\mu(x) &= \frac{4}{3}\mu(\mu + 2)(\mu + 1)x^3 - 2\mu(1 + \mu)x. \end{aligned}$$

De (2.100) obtém-se o coeficiente dominante do polinômio de Gegenbauer

$$A_r = \frac{1}{2^r r!} \frac{\Gamma(\mu + \frac{1}{2}) \Gamma(2r + 2\mu)}{\Gamma(2\mu) \Gamma(r + \mu + \frac{1}{2})}. \quad (2.145)$$

De (2.102) calcula-se

$$\begin{aligned} \gamma_{\phi_r} &= \left( \frac{(-1)^r}{2^r r!} \frac{\Gamma(\mu + \frac{1}{2}) \Gamma(r + 2\mu)}{\Gamma(2\mu) \Gamma(r + \mu + \frac{1}{2})} \right)^2 \frac{2^{2r+2\mu} r!}{(2r + 2\mu)} \frac{\Gamma(r + \mu + \frac{1}{2}) \Gamma(r + \mu + \frac{1}{2})}{\Gamma(r + 2\mu)}, \\ &= \frac{1}{2^{2r} (r!)^2} \frac{\Gamma^2(\mu + \frac{1}{2}) \Gamma^2(r + 2\mu)}{\Gamma^2(2\mu) \Gamma^2(r + \mu + \frac{1}{2})} \frac{2^{2r+2\mu} r!}{2(r + \mu)} \frac{\Gamma^2(r + \mu + \frac{1}{2})}{\Gamma(r + 2\mu)}, \\ \gamma_{\phi_r} &= \frac{2^{2\mu-1}}{(r + \mu)r!} \frac{\Gamma^2(\mu + \frac{1}{2}) \Gamma(r + 2\mu)}{\Gamma^2(2\mu)}. \end{aligned} \quad (2.146)$$

Para obter a fórmula de recorrência para o polinômio de Gegenbauer, tem-se de (2.19),

$$\begin{aligned} a_r &= \frac{1}{2^{r+1}(r+1)!} \frac{\Gamma(\mu + \frac{1}{2}) \Gamma(2r + 2\mu + 2)}{\Gamma(2\mu) \Gamma(r + \mu + \frac{3}{2})}, \\ &= \frac{1}{2^r r!} \frac{\Gamma(\mu + \frac{1}{2}) \Gamma(2r + 2\mu)}{\Gamma(2\mu) \Gamma(r + \mu + \frac{1}{2})}, \\ &= \frac{1}{2(r+1)} \frac{(2r + 2\mu + 1)(2r + 2\mu)(2r + 2\mu - 1)!}{(r + \mu + \frac{1}{2})(r + \mu - \frac{1}{2})!}, \\ &= \frac{1}{2(r+1)} \frac{(2r + 2\mu - 1)!}{(r + \mu - \frac{1}{2})!}, \\ &= \frac{1}{2(r+1)} \frac{2(r + \mu + \frac{1}{2}) 2(r + \mu)}{(r + \mu + \frac{1}{2})}, \\ a_r &= \frac{2(r + \mu)}{r + 1}. \end{aligned} \quad (2.147)$$

Pelo Corolário 2.9.2,

$$b_r = 0. \quad (2.148)$$

De (2.23) tem-se

$$\begin{aligned}
c_r &= \frac{\frac{2(r+\mu)}{r+1} \frac{2^{2\mu-1}}{(r+\mu)r!} \frac{\Gamma^2(\mu + \frac{1}{2}) \Gamma(r+2\mu)}{\Gamma^2(2\mu)}}{\frac{2(r+\mu-1)}{r} \frac{2^{2\mu-1}}{(r+\mu-1)(r-1)!} \frac{\Gamma^2(\mu + \frac{1}{2}) \Gamma(r+2\mu-1)}{\Gamma^2(2\mu)}}, \\
&= \frac{\frac{(r+2\mu-1)(r+2\mu-2)!}{(r+1)!}}{\frac{(r+2\mu-2)!}{r!}}, \\
c_r &= \frac{r+2\mu-1}{r+1}. \tag{2.149}
\end{aligned}$$

Finalmente, pelo Teorema 2.4, com os resultados (2.147), (2.148) e (2.149), tem-se a equação de recorrência para  $C_r^\mu(x)$ ,

$$C_{r+1}^\mu(x) = \frac{2(r+\mu)}{r+1} x C_r^\mu(x) + \frac{1-r-2\mu}{r+1} C_{r-1}^\mu(x). \tag{2.150}$$

Quando  $0 < \mu < 1$  e  $\mu \neq \frac{1}{2}$  há aproximações trigonométricas para os zeros não negativos do polinômio de Gegenbauer (Szegö, 1975):

$$x_{r,i} \approx \cos \left( \frac{\pi}{2} \left( \frac{i - (1-\mu)/2}{r+\mu} + \frac{i}{r+1} \right) \right), \quad \mu > \frac{1}{2}, \tag{2.151}$$

$$x_{r,i} \approx \cos \left( \frac{\pi}{2} \left( \frac{i - (1-\mu)/2}{r+\mu} + \frac{i + \mu - \frac{1}{2}}{r+2\mu} \right) \right), \quad \mu < \frac{1}{2}, \tag{2.152}$$

$i = 1, 2, \dots, \lfloor (r+1)/2 \rfloor$ , onde  $x_{r,1} > x_{r,2} > \dots > x_{r, \lfloor (r+1)/2 \rfloor} \geq 0$ .

Uma relação envolvendo a derivada do polinômio de Gegenbauer é (Szegö, 1975)

$$(1-x^2)C_r^{\mu\prime}(x) = -rxC_r^\mu(x) + (r+2\mu-1)C_{r-1}^\mu(x) = (r+2\mu)x C_r^\mu(x) - (r+1)C_{r+1}^\mu(x). \tag{2.153}$$

Os polinômios ortonormais de Gegenbauer  $C_r^{\mu*}(x)$  são dados pela normalização  $\frac{C_r^\mu(x)}{\sqrt{\gamma_{\phi_r}}}$ . A equação de recorrência para a seqüência  $\{C_r^{\mu*}(x)\}_{r=0}^\infty$  é dada pelo Teorema 2.7, notando as formas de  $\alpha_r$  e  $\beta_r$  nas equações (2.32) e (2.33),

$$\sqrt{\beta_{r+1}} C_{r+1}^{\mu*}(x) = x C_r^{\mu*}(x) + \sqrt{\beta_r} C_{r-1}^{\mu*}(x), \quad r \geq 0, \tag{2.154}$$

sendo  $C_{-1}^{\mu*}(x) \equiv 0$ ,  $C_0^{\mu*}(x) = \frac{\sqrt{\Gamma(2\mu+1)}}{2^\mu \Gamma(\mu + \frac{1}{2})}$ ,

$$\alpha_r = \frac{b_r}{a_r} = 0, \quad r \geq 0, \quad (2.155)$$

$$\beta_r = \frac{\gamma_{\phi_r}}{a_{r-1}^2 \gamma_{\phi_{r-1}}} = \frac{r(r+2\mu-1)}{4(r+\mu)(r+\mu-1)}, \quad r \geq 1. \quad (2.156)$$

## 3 *Interpolação e quadratura de Hermite*

Neste capítulo são tratadas a interpolação e a quadratura de Hermite. A quadratura de Gauss será desenvolvida a partir destes conceitos. Inicialmente são apresentados alguns conceitos básicos sobre polinômios interpoladores.

Um polinômio de grau  $r - 1$  é determinado por  $r$  parâmetros. Se  $f(x)$  for uma função contínua e se forem conhecidos os valores de  $f(x)$  para  $x = x_1, x_2, \dots, x_r$ , então é possível determinar um polinômio de grau  $r - 1$  que passe pelos  $r$  pontos de  $f(x)$ . Este polinômio é chamado de polinômio interpolador.

O polinômio interpolador de Hermite, além de possuir os mesmos valores de  $f(x)$  em  $r$  pontos, também assume o mesmo valor da primeira derivada de  $f(x)$  nestes pontos. Portanto, este polinômio terá grau  $2r - 1$ , uma vez que é determinado a partir de  $2r$  parâmetros: os valores de  $f(x)$  e  $f'(x)$  em  $x = x_1, x_2, \dots, x_r$ .

Em geral, as quadraturas são construídas a partir de polinômios interpoladores. As quadraturas exatas, para o caso em que  $f(x)$  é um polinômio de grau até  $r - 1$ , são denominadas por quadraturas interpolatórias (Krylov, 1962), como será o caso da quadratura de Hermite.

A principal obra consultada para o desenvolvimento deste capítulo foi Hildebrand (1974).

### 3.1 *Interpolação de Hermite*

Seja  $f(x)$  uma função contínua sobre o intervalo  $[a, b]$ ,  $-\infty \leq a < b \leq \infty$ . Sendo conhecidos os valores de  $f(x)$  e  $f'(x)$  em  $x_1, x_2, \dots, x_r$  é possível construir um polinômio interpolador de grau  $2r - 1$  que coincida com  $f(x)$  e  $f'(x)$  nestas  $r$  abscissas. Tal polinômio

interpolador pode ser definido como

$$y(x) = \sum_{k=1}^r h_k(x)f(x_k) + \sum_{k=1}^r \bar{h}_k(x)f'(x_k), \quad (3.1)$$

onde  $h_i(x)$  e  $\bar{h}_i(x)$  são polinômios de grau  $2r - 1$ , com  $i = 1, 2, \dots, r$ . A interpolação requerida pressupõe que  $y(x_j) = f(x_j)$ , implicando

$$h_i(x_j) = \delta_{ij} \quad \text{e} \quad \bar{h}_i(x_j) = 0, \quad (3.2)$$

e também pressupõe que  $y'(x_j) = f'(x_j)$ , implicando

$$h'_i(x_j) = 0 \quad \text{e} \quad \bar{h}'_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad (3.3)$$

onde  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j, \end{cases} \quad j = 1, 2, \dots, r.$$

Sejam os polinômios

$$\pi(x) \equiv (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_r), \quad (3.4)$$

e

$$l_i(x) = \frac{\pi(x)}{(x - x_i)\pi'(x_i)}, \quad (3.5)$$

$$l_i(x) \equiv \frac{(x - x_1) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_r)}{(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_r)}, \quad (3.6)$$

com a propriedade  $l_i(x_j) = 0, \forall i \neq j$ . Segundo a definição de  $l_i(x)$ , em (3.6), tem-se  $l_i(x_i) = 1$  e, de uma forma mais geral,

$$l_i(x_j) = \delta_{ij}. \quad (3.7)$$

Como  $l_i(x)$  é um polinômio de grau  $r-1$  o polinômio  $[l_i(x)]^2$  terá grau  $2r-2$  e  $[l_i(x_j)]^2 = \delta_{ij}$ .

Por outro lado, os polinômios  $h_i(x)$  e  $\bar{h}_i(x)$  possuem grau  $2r - 1$  e são da forma

$$h_i(x) = r_i(x)[l_i(x)]^2 \quad \text{e} \quad \bar{h}_i(x) = s_i(x)[l_i(x)]^2, \quad (3.8)$$

onde  $r_i(x)$  e  $s_i(x)$  são polinômios de grau 1. Para  $i \neq j$ , (3.8) satisfaz (3.2) e (3.3).

Utilizando as condições (3.2) e (3.3), com  $i = j$ , em (3.8),

$$h_i(x_i) = r_i(x_i)[l_i(x_i)]^2 \quad \Rightarrow \quad r_i(x_i) = 1, \quad (3.9)$$

$$h'_i(x_i) = r'_i(x_i)[l_i(x_i)]^2 + 2r_i(x_i)l_i(x_i)l'_i(x_i) \quad \Rightarrow \quad r'_i(x_i) + 2l'_i(x_i) = 0, \quad (3.10)$$

$$\bar{h}_i(x_i) = s_i(x_i)[l_i(x_i)]^2 \quad \Rightarrow \quad s_i(x_i) = 0, \quad (3.11)$$

$$\bar{h}'_i(x_i) = s'_i(x_i)[l_i(x_i)]^2 + 2s_i(x_i)l_i(x_i)l'_i(x_i) \quad \Rightarrow \quad s'_i(x_i) = 1. \quad (3.12)$$

De (3.11) e (3.12), obtêm-se os coeficientes linear e angular de  $s_i(x)$ ,

$$s_i(x) = x - x_i. \quad (3.13)$$

A equação (3.10) fornece o coeficiente angular de  $r_i(x)$ , a saber  $-2l'_i(x_i)$ . Utilizando este resultado em (3.9) obtêm-se o coeficiente linear,  $1 + 2x_i l'_i(x_i)$ . Conseqüentemente,

$$r_i(x) = 1 - 2l'_i(x_i)(x - x_i). \quad (3.14)$$

Substituindo os resultados (3.13) e (3.14) em (3.8) obtêm-se o **polinômio interpolador de Hermite**,

$$y(x) = \sum_{k=1}^r h_k(x)f(x_k) + \sum_{k=1}^r \bar{h}_k(x)f'(x_k), \quad (3.15)$$

no qual

$$h_i(x) = [1 - 2l'_i(x_i)(x - x_i)][l_i(x)]^2 \quad \text{e} \quad \bar{h}_i(x) = (x - x_i)[l_i(x)]^2. \quad (3.16)$$

**Teorema 3.1** *O erro  $E_r(x)$  na interpolação de Hermite é dado por*

$$E_r(x) = \frac{f^{(2r)}(\xi(x))}{(2r)!} [\pi(x)]^2,$$

onde  $\xi(x)$  está no interior de algum intervalo real.

**Demonstração:** Tem-se  $E_r(x) = f(x) - y(x)$ . O erro  $E_r(x)$  na interpolação é igual a zero em  $x_i$ , assim como  $E'_r(x)$ , pois

$$\begin{aligned} E'_r(x) = f'(x) - y'(x) &= f'(x) - \sum_{k=1}^r h'_k(x)f(x_k) - \sum_{k=1}^r \bar{h}'_k(x)f'(x_k), \\ E'_r(x_i) &= f'(x_i) - \sum_{k=1}^r h'_k(x_i)f(x_k) - \sum_{k=1}^r \bar{h}'_k(x_i)f'(x_k), \end{aligned}$$

e, uma vez que  $h'_k(x_i) = 0$  e  $\bar{h}'_k(x_i) = \delta_{ij}$ ,

$$E'_r(x_i) = f'(x_i) - f'(x_i) = 0.$$

Por outro lado, de acordo com (3.4),  $[\pi(x)]^2$  e sua derivada,  $2\pi(x)\pi'(x)$ , anulam-se em  $x_i$ . Deste modo, seja uma função  $F(x)$  definida por

$$F(x) = E_r(x) - C[\pi(x)]^2, \quad (3.17)$$

onde  $C$  é uma constante. A função  $F(x)$  é contínua e possui derivadas contínuas, pois é resultado da subtração de duas funções contínuas, cujas derivadas são contínuas. Além disto, a função  $F(x)$  é combinação linear de  $E_r(x)$  e  $[\pi(x)]^2$ , implicando na seguinte igualdade  $F(x_i) = F'(x_i) = 0$ . Seja  $\bar{x} \neq x_i$  tal que  $F(\bar{x}) = 0$  a partir da qual é determinada a constante  $C$ .

Seja  $\bar{I}$  um intervalo fechado sendo limitado pela maior e pela menor das abscissas  $x_1, x_2, \dots, x_r, \bar{x}$ . Como estas  $r + 1$  abscissas são raízes de  $F(x)$ , então  $F'(x)$  se anula em, pelo menos,  $r$  abscissas intermediárias no interior do intervalo  $\bar{I}$ . Entretanto, como  $F'(x)$  também é nula nas  $r$  abscissas  $x_1, x_2, \dots, x_r$ , então pode-se afirmar que:  $F'(x)$  possui, no mínimo,  $2r$  raízes pertencentes ao intervalo  $\bar{I}$ ; que  $F''(x)$ , por sua vez, possui, no mínimo,  $2r - 1$  raízes no interior do intervalo  $\bar{I}$ ;  $F^{(3)}(x)$ , no mínimo,  $2r - 2$  raízes no interior de  $\bar{I}$  e assim por diante. Conseqüentemente,  $F^{(2r)}(x)$  possui pelo menos uma raiz no interior de  $\bar{I}$ . Denota-se por  $\bar{\xi}(x)$  a função cuja imagem é o conjunto formado por estas últimas abscissas.

Como  $y(x)$ , em (3.1), é um polinômio de grau  $2r - 1$ , então  $y^{(2r)}(x) = 0$  e a derivada de ordem  $2r$  da equação  $F(x) = f(x) - y(x) - C[\pi(x)]^2$  é dada por  $F^{(2r)}(x) = f^{(2r)}(x) - C(2r)!$ . Conseqüentemente,

$$F^{(2r)}(\bar{\xi}(x)) = f^{(2r)}(\bar{\xi}(x)) - C(2r)!,$$

$$C = \frac{f^{(2r)}(\bar{\xi}(x))}{(2r)!}.$$

Como  $F(\bar{x}) = 0$ , fica implicado que, em (3.17),  $E_r(\bar{x}) = \frac{f^{(2r)}(\bar{\xi}(x))}{(2r)!}[\pi(\bar{x})]^2$ . Por outro lado, desde que ambos lados desta equação se anulam quando  $\bar{x}$  é identificado como  $x_i$ , esta equação fica verdadeira tanto para  $\bar{x}$  quanto para  $x_i$ . Portanto, suprimindo as barras,

pode-se reescrevê-la da seguinte forma

$$E_r(x) = \frac{f^{(2r)}(\xi(x))}{(2r)!} [\pi(x)]^2,$$

onde  $\xi(x)$  está no interior do intervalo  $I$  que, por sua vez, é tal que  $\{x_1, \dots, x_r\} \subset I$ . ■

## 3.2 Quadratura de Hermite

Na seção anterior foi definido o polinômio interpolador de Hermite, em (3.15) e (3.16) e o seu termo de erro no Teorema 3.1. Apresenta-se uma quadratura associada à função peso  $w(x) \geq 0$  no intervalo  $[a, b]$ ,  $-\infty \leq a < b \leq \infty$  denominada **quadratura de Hermite**,

$$\int_a^b w(x)f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + \sum_{k=1}^r \bar{H}_k f'(x_k) + E_r, \quad (3.18)$$

com os coeficientes<sup>1</sup>  $H_k$  e  $\bar{H}_k$  definidos por

$$H_i = \int_a^b w(x)h_i(x) dx = \int_a^b w(x)[1 - 2l'_i(x_i)(x - x_i)][l_i(x)]^2 dx, \quad (3.19)$$

e

$$\bar{H}_i = \int_a^b w(x)\bar{h}_i(x) dx = \int_a^b w(x)(x - x_i)[l_i(x)]^2 dx, \quad (3.20)$$

e com o erro dado por

$$E_r = \frac{1}{(2r)!} \int_a^b f^{(2r)}(\xi(x))w(x)[\pi(x)]^2 dx, \quad (3.21)$$

onde  $a < \xi(x) < b$ , desde que as abscissas  $x_1, \dots, x_r$  estejam contidas em  $[a, b]$ .

Como  $f(x)$  é contínua e o produto  $w(x)[\pi(x)]^2$  não muda de sinal em  $[a, b]$ , então, pelo *Teorema do Valor Médio Ponderado para Integrais*, existe um número  $\xi \in (a, b)$  tal que

$$E_r \equiv \frac{1}{(2r)!} \int_a^b f^{(2r)}(\xi(x))w(x)[\pi(x)]^2 dx = \frac{f^{(2r)}(\xi)}{(2r)!} \int_a^b w(x)[\pi(x)]^2 dx.$$

**Definição 3.2 (Grau de precisão)** *O grau de precisão de uma fórmula de quadratura é o maior natural  $\eta$  tal que a fórmula é exata para  $f(x) = x^k$ ,  $\forall k \in \{0, 1, \dots, \eta\}$ .* ■

<sup>1</sup>Normalmente estes números são chamados de *pesos da quadratura*, mas para evitar ambigüidade adota-se o nome *coeficientes* para referir a  $H_i$ , pois o nome *peso* é atribuído à função  $w(x)$ .

Baseado na Definição 3.2, tem-se que o grau de precisão da fórmula da quadratura de Hermite é exatamente  $2r - 1$ . O erro desta quadratura  $E_r = \frac{f^{(2r)}(\xi)}{(2r)!} \int_a^b w(x)[\pi(x)]^2 dx$  é nulo se, e somente se,  $f(x)$  for um polinômio de grau menor ou igual a  $2r - 1$ , tendo em vista que o integrando é uma função que não muda de sinal em  $[a, b]$ , ou seja, a integral definida nunca pode ser igual a zero.

As quadraturas com o grau de precisão da quadratura de Hermite são consideradas quadraturas de grau máximo de precisão.

## 4 *Quadratura de Gauss*

Neste capítulo apresenta-se a quadratura de Gauss. O alemão Carl Friedrich Gauss (1777-1855), tentando aperfeiçoar as técnicas de Newton-Cotes<sup>1</sup>, formulou a regra de quadratura que hoje leva seu nome para o caso em que  $w(x) = 1$  usando as frações contínuas. A generalização para funções peso arbitrárias surgiu mais tarde, em 1877, com a contribuição de E. B. Christoffel (Gautschi, 2003) e também com Chebyshev.

Os resultados aqui são conseqüentes dos conceitos relacionados à quadratura de Hermite. A quadratura de Gauss é também interpolatória, como a de Hermite, sem necessitar, entretanto, das avaliações das derivadas de  $f(x)$ . Contudo, ela preservará o grau máximo de precisão  $2r - 1$ .

A Seção 4.1 apresenta os teoremas que estabelecem a quadratura de Gauss e os teoremas que garantem a convergência deste método. As seções seguintes apresentam as quadraturas de Gauss de medidas  $w(x)$  clássicas, isto é, as quadraturas com base nos polinômios ortogonais clássicos. A teoria destes polinômios será amplamente usada e os resultados  $A_r$  e  $\gamma_{\phi_r}$  das Seções 2.2 a 2.9 são fundamentais.

As principais obras consultadas para os teoremas foram Hildebrand (1974), Wilf (1978), Davis e Rabinowitz (1984) e Krylov (1962).

### 4.1 Teoremas

**Teorema 4.1** *O polinômio  $\pi(x)$ , definido em (3.4), pertence à seqüência de polinômios ortogonais com relação a  $w(x)$  sobre o intervalo  $[a, b]$  se, e somente se, a fórmula da quadratura de Hermite, (3.18) a (3.21), puder se reduzir à forma*

$$\int_a^b w(x)f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + E_r.$$

---

<sup>1</sup>Este resultado consta de sua célebre obra: *Methodus nova integralium valores per approximationem inveniendi. Commentationes Societatis Regiae Scientiarum Gottingensis Recentiores*, 1814.

**Demonstração:** Se  $\pi(x)$  pertencer a uma seqüência de polinômios ortogonais com relação à  $w(x)$  sobre o intervalo  $[a, b]$ , então,  $\int_a^b w(x)\pi(x)u_{r-1}(x) dx = 0$ , sendo  $u_{r-1}(x)$  um polinômio de grau  $r - 1$  ou menor. Como  $l_i(x)$ , dado em (3.5), possui grau  $r - 1$ , então

$$\int_a^b w(x)\pi(x)l_i(x) dx = 0. \quad (4.1)$$

Ao reescrever a equação (3.20) notando (3.5),

$$\begin{aligned} \bar{H}_i &= \int_a^b w(x)(x - x_i) \frac{[\pi(x)]^2}{(x - x_i)^2 [\pi'(x_i)]^2} dx, \\ &= \frac{1}{\pi'(x_i)} \int_a^b w(x)\pi(x) \frac{\pi(x)}{(x - x_i)\pi'(x_i)} dx, \\ \bar{H}_i &= \frac{1}{\pi'(x_i)} \int_a^b w(x)\pi(x)l_i(x) dx. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Notando o resultado (4.1) em (4.2), ocorre que  $\bar{H}_i = 0$ , isto é, a fórmula da quadratura de Hermite se reduz a  $\int_a^b w(x)f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + E_r$ .

Por outro lado, suponha que a fórmula da quadratura de Hermite seja da forma

$$\int_a^b w(x)f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + E_r.$$

Seja  $f(x) = \pi(x)u_{r-1}(x)$  um polinômio de grau  $2r - 1$  ou menor. Então, por meio da Definição 3.2,  $E_r = 0$ . Como  $\pi(x_i) = 0$ , tem-se que  $f(x_i) = 0$ . Conseqüentemente,

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x)f(x) dx &= \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) = 0, \\ \int_a^b w(x)\pi(x)u_{r-1}(x) dx &= 0, \end{aligned}$$

isto é,  $\pi(x)$  pertence a  $\{\phi_r(x)\}_{r=0}^\infty$ . ■

Partindo da definição de  $H_i$  dada em (3.19),

$$\begin{aligned} H_i &= \int_a^b w(x)[1 - 2l'_i(x_i)(x - x_i)][l_i(x)]^2 dx, \\ H_i &= \int_a^b w(x)[l_i(x)]^2 dx - 2l'_i(x_i) \int_a^b w(x)(x - x_i)[l_i(x)]^2 dx, \end{aligned}$$

mas, de acordo com o Teorema 4.1, tem-se que

$$H_i = \int_a^b w(x)[l_i(x)]^2 dx - 2l'_i(x_i)\bar{H}_i,$$

$$H_i = \int_a^b w(x)[l_i(x)]^2 dx.$$

Observa-se que a fórmula de quadratura numérica do Teorema 4.1 é função apenas dos valores de  $f(x)$  em  $x_1, \dots, x_r$ , sendo independente das derivadas nestas abscissas, preservando, contudo, o grau de precisão  $2r - 1$ . Esta fórmula de quadratura é denominada **quadratura de Gauss**

$$\int_a^b w(x)f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + E_r, \quad (4.3)$$

com o coeficiente

$$H_i = \int_a^b w(x)[l_i(x)]^2 dx, \quad (4.4)$$

e erro

$$E_r = \frac{f^{(2r)}(\xi)}{(2r)!} \int_a^b w(x)[\pi(x)]^2 dx, \quad (4.5)$$

onde  $\xi \in (a, b)$ , desde que  $x_1, \dots, x_r$  estejam contidos em  $[a, b]$ .

Verifica-se que o polinômio  $\pi(x)$ , sob as hipóteses do Teorema 4.1, é um caso particular de  $\phi_r(x)$  com coeficiente dominante  $A_r = 1$ . Desta maneira, o Teorema 2.3 garante que todas os zeros de  $\pi(x)$ ,  $x_1, x_2, \dots, x_r$ , estão contidos no interior em  $(a, b)$ . Assim,  $x_1, x_2, \dots, x_r$  são os zeros<sup>2</sup> de  $\phi_r(x)$  cujo coeficiente dominante é  $A_r$ . Logo, sua forma fatorada é dada por  $\phi_r(x) = A_r(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_r)$ . Conseqüentemente,

$$\pi(x) = \frac{\phi_r(x)}{A_r}. \quad (4.6)$$

Com esta última igualdade, reescreve-se a equação (4.5),

$$E_r = \frac{f^{(2r)}(\xi)}{(2r)!} \int_a^b w(x) \left[ \frac{\phi_r(x)}{A_r} \right]^2 dx,$$

$$E_r = \frac{1}{A_r^2} \frac{f^{(2r)}(\xi)}{(2r)!} \int_a^b w(x)[\phi_r(x)]^2 dx,$$

---

<sup>2</sup>Para simplificar a notação, o  $i$ -ésimo zero do polinômio  $\phi_r(x)$ , de grau  $r$ , será denotado por  $x_i$ ,  $i = 0, \dots, r$ .

e, notando a definição de  $\gamma_{\phi_r}$  dada em (2.1),

$$E_r = \frac{\gamma_{\phi_r}}{A_r^2} \frac{f^{(2r)}(\xi)}{(2r)!}, \quad \xi \in (a, b). \quad (4.7)$$

**Teorema 4.2** *Na quadratura de Gauss é válido que*

$$H_i = \int_a^b w(x)[l_i(x)]^2 dx = \int_a^b w(x)l_i(x) dx.$$

**Demonstração:** Considerando  $f(x) = l_i(x)$  na quadratura de Gauss (4.3),

$$\int_a^b w(x)l_i(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k l_i(x_k) + E_r,$$

e, como definido em (3.7),  $l_i(x_k) = 1$ , se  $k = i$  e  $l_i(x_k) = 0$ , se  $k \neq i$ . Então,

$$\int_a^b w(x)l_i(x) dx = H_i + E_r,$$

e, como  $l_i(x)$  possui grau  $r - 1$ , tem-se  $E_r = 0$ , resultando em  $\int_a^b w(x)l_i(x) dx = H_i$ . Por outro lado, pela quadratura de Gauss, em (4.4),  $H_i = \int_a^b w(x)[l_i(x)]^2 dx$ , resultando em

$$H_i = \int_a^b w(x)[l_i(x)]^2 dx = \int_a^b w(x)l_i(x) dx.$$

■

Com a finalidade de obter explicitamente o coeficiente  $H_i$ , faz-se uso da identidade de Christoffel-Darboux (Teorema 2.5),

$$\sum_{k=0}^r \frac{\phi_k(x)\phi_k(y)}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{\phi_{r+1}(x)\phi_r(y) - \phi_r(x)\phi_{r+1}(y)}{a_r \gamma_{\phi_r}(x - y)},$$

Ao substituir  $y$  por  $x_i$ , onde  $x_i$  é um zero de  $\phi_r(x)$ , a identidade de Christoffel-Darboux torna-se

$$\frac{A_r \phi_{r+1}(x_i)}{A_{r+1} \gamma_{\phi_r}} \frac{\phi_r(x)}{x - x_i} = - \sum_{k=0}^r \frac{\phi_k(x)\phi_k(x_i)}{\gamma_{\phi_k}}.$$

Multiplicando a igualdade anterior por  $w(x)\phi_0(x)$  e integrando o resultado em  $[a, b]$ ,

$$\frac{A_r \phi_{r+1}(x_i)}{A_{r+1} \gamma_{\phi_r}} \int_a^b \frac{w(x)\phi_0(x)\phi_r(x)}{x - x_i} dx = - \int_a^b \sum_{k=0}^r w(x)\phi_0(x) \frac{\phi_k(x)\phi_k(x_i)}{\gamma_{\phi_k}} dx.$$

Expandindo o somatório e utilizando-se da ortogonalidade dos polinômios,

$$\begin{aligned} \frac{A_r \phi_{r+1}(x_i)}{A_{r+1} \gamma_{\phi_r}} \int_a^b \frac{w(x) \phi_0(x) \phi_r(x)}{x - x_i} dx &= -\frac{\phi_0(x_i)}{\gamma_{\phi_0}} \int_a^b w(x) [\phi_0(x)]^2 dx, \\ \frac{A_r \phi_{r+1}(x_i)}{A_{r+1} \gamma_{\phi_r}} \int_a^b \frac{w(x) \phi_0(x) \phi_r(x)}{x - x_i} dx &= -\phi_0(x_i). \end{aligned}$$

No entanto,  $\phi_0(x)$  é uma constante, implicando que  $\phi_0(x) = \phi_0(x_i)$ , resultando em

$$\int_a^b w(x) \frac{\phi_r(x)}{x - x_i} dx = -\frac{A_{r+1} \gamma_{\phi_r}}{A_r \phi_{r+1}(x_i)}. \quad (4.8)$$

Todavia, combinando (3.5) e (4.6),

$$l_i(x) = \frac{\pi(x)}{\pi'(x_i)(x - x_i)} = \frac{\phi_r(x)}{\phi_r'(x_i)(x - x_i)},$$

e utilizando a expressão acima na segunda forma de  $H_i$  do Teorema 4.2,

$$H_i = \frac{1}{\phi_r'(x_i)} \int_a^b w(x) \frac{\phi_r(x)}{x - x_i} dx.$$

Logo, por (4.8),

$$H_i = -\frac{A_{r+1} \gamma_{\phi_r}}{A_r \phi_r'(x_i) \phi_{r+1}(x_i)}. \quad (4.9)$$

Avaliando a fórmula de recorrência do Teorema 2.4 no zero  $x_i$  de  $\phi_r(x)$ ,

$$\begin{aligned} \phi_{r+1}(x_i) &= (a_r x_i - b_r) \phi_r(x_i) - c_r \phi_{r-1}(x_i), \\ \phi_{r+1}(x_i) &= -c_r \phi_{r-1}(x_i), \end{aligned}$$

substituindo o valor de  $c_r = \frac{a_r \gamma_{\phi_r}}{a_{r-1} \gamma_{\phi_{r-1}}}$ ,

$$\begin{aligned} \phi_{r+1}(x_i) &= -\frac{\frac{A_{r+1}}{A_r} \gamma_{\phi_r}}{\frac{A_r}{A_{r-1}} \gamma_{\phi_{r-1}}} \phi_{r-1}(x_i), \\ \phi_{r+1}(x_i) &= -\frac{A_{r+1} A_{r-1}}{A_r^2} \frac{\gamma_{\phi_r}}{\gamma_{\phi_{r-1}}} \phi_{r-1}(x_i). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Ao substituir o resultado (4.10) em (4.9) encontra-se outra forma de  $H_i$ ,

$$\begin{aligned} H_i &= \frac{A_{r+1} \gamma_{\phi_r}}{A_r \phi_r'(x_i)} \frac{A_r^2}{A_{r+1} A_{r-1}} \frac{\gamma_{\phi_{r-1}}}{\gamma_{\phi_r}} \frac{1}{\phi_{r-1}(x_i)}, \\ H_i &= \frac{A_r \gamma_{\phi_{r-1}}}{A_{r-1} \phi_r'(x_i) \phi_{r-1}(x_i)}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Notando o Corolário 2.5.1 com  $x = x_i$ , sendo  $x_i$  o  $i$ -ésimo zero de  $\phi_r(x)$ , e a forma de  $H_i$  em (4.9), tem-se que

$$\sum_{k=0}^r \frac{\phi_k(x_i)}{\gamma_{\phi_k}} = -\frac{A_r \phi_r'(x_i) \phi_{r+1}(x_i)}{A_{r+1} \gamma_{\phi_r}} = \frac{1}{H_i}.$$

Sem perda de generalidade, se  $\phi_k(x)$  for ortonormal, então  $\gamma_{\phi_k} = 1$  e  $\phi_k^*(x) = \psi_k^*(x)$ . Portanto,

$$\sum_{k=0}^r \psi_k^*(x_i) = \frac{1}{H_i}. \quad (4.12)$$

Pelo Corolário 2.8.1, obtém-se a implicação

$$H_i = \frac{\mathbf{v}_{i,1}^2}{[\psi_0^*(x)]^2},$$

estabelecendo o seguinte Teorema:

**Teorema 4.3** *Os  $r$  zeros  $x_i$  da quadratura de Gauss são os autovalores da matriz de Jacobi (equação (2.36))*

$$\mathbf{J}_r = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \sqrt{\beta_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{\beta_{r-1}} & \alpha_{r-1} \end{bmatrix},$$

sendo  $\alpha_i$ ,  $i = 0, 1, \dots, r-1$  e  $\beta_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, r-1$  dados pelos termos da equação de recorrência dos polinômios ortonormais e os coeficientes  $H_i$  são dados por

$$H_i = \frac{\mathbf{v}_{i,1}^2}{[\phi_0^*(x)]^2},$$

sendo  $\mathbf{v}_{i,1}$  o primeiro componente do autovetor normalizado  $\mathbf{v}_i$  correspondente ao autovalor  $x_i$ . ■

O notável resultado anterior é considerado o método mais elegante na obtenção dos zeros e coeficientes para a quadratura de Gauss (Wilf, 1978).

O teorema anterior também implica que os coeficientes  $H_i$  da quadratura de Gauss são todos positivos.

**Teorema 4.4** Se o intervalo  $[a, b]$  for finito e  $f(x)$  for contínua em  $[a, b]$ , então

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) = \int_a^b w(x) f(x) dx. \quad (4.13)$$

**Demonstração:** Desde que  $f(x)$  é contínua em  $[a, b]$ , o *Teorema de Weierstrass* garante que, dado qualquer  $\epsilon > 0$ , é possível encontrar um polinômio  $P(x)$  tal que

$$|f(x) - P(x)| < \epsilon, \quad \forall x \in [a, b]. \quad (4.14)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \left| \int_a^b w(x) f(x) dx - \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) \right| &\leq \left| \int_a^b w(x) f(x) dx - \int_a^b w(x) P(x) dx \right| \\ &+ \left| \int_a^b w(x) P(x) dx - \sum_{k=1}^r H_k P(x_k) \right| \\ &+ \left| \sum_{k=1}^r H_k P(x_k) - \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) \right|. \end{aligned}$$

De acordo com (4.14),

$$\left| \int_a^b w(x) f(x) dx - \int_a^b w(x) P(x) dx \right| < \epsilon \int_a^b w(x) dx$$

e

$$\left| \sum_{k=1}^r H_k P(x_k) - \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) \right| < \epsilon \sum_{k=1}^r H_k = \epsilon \int_a^b w(x) dx.$$

Se  $n$  for o grau do polinômio  $P(x)$ , então para  $2r - 1 \geq n$ ,

$$\int_a^b w(x) P(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k P(x_k),$$

e para tal valor de  $r$ ,

$$\left| \int_a^b w(x) P(x) dx - \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) \right| < 2\epsilon \int_a^b w(x) dx,$$

o que prova (4.13). ■

O teorema anterior garante a convergência das quadraturas de Gauss em intervalos limitados. Este resultado também pode decorrer como conseqüência de um caso geral de convergência para funções analíticas no plano complexo (Krylov, 1962). Os próximos teoremas mostram sob que condições as quadraturas de Gauss em intervalos infinitos podem convergir. As demonstrações destes resultados, juntamente com suas generalizações, são

dadas por Uspensky<sup>3</sup>, citado por Davis e Rabinowitz (1984).

**Teorema 4.5** *Considere a família de quadraturas do tipo*

$$\sum_{k=1}^r H_k f(x_k) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha} f(x) dx + E_r, \quad \alpha > -1.$$

*Se, para todos valores suficientemente grandes de  $x$ , a função  $f(x)$  satisfizer a desigualdade*

$$|f(x)| \leq \frac{e^x}{x^{\alpha+1+\rho}}, \quad \text{para algum } \rho > 0,$$

*então*

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha} f(x) dx.$$

■

Este teorema garante a convergência das quadraturas com funções peso de Laguerre generalizado e o próximo se aplica nas quadraturas de Gauss-Hermite. É importante observar que as condições de convergência de tais teoremas são suficientes mas não necessárias. Por exemplo, Davis e Rabinowitz (1984) apresentam exemplos de quadraturas que convergem fortemente mas cujas funções não satisfazem as condições dos teoremas. Por isto, toma-se a liberdade de realizar experimentos com as quadraturas de Gauss-Hermite, Gauss-Laguerre e Gauss-Laguerre generalizada sem verificar as condições de convergência.

**Teorema 4.6** *Considere a família das quadraturas do tipo*

$$\sum_{k=1}^r H_k f(x_k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx + E_r.$$

*Se, para todos valores suficientemente grandes de  $|x|$ , a função  $f(x)$  satisfizer a desigualdade*

$$|f(x)| \leq \frac{e^{x^2}}{|x|^{1+\rho}}, \quad \text{para algum } \rho > 0,$$

*então*

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx.$$

■

---

<sup>3</sup>Uspensky, J. V. On the convergence of quadrature formulas related to an infinite interval, *Trans. Amer. Math. Soc.* **30** (1928) 542-559.

## 4.2 Quadratura de Gauss-Legendre

O polinômio de Legendre  $P_r(x)$ , definido com  $w(x) = 1$  em  $[-1, 1]$ , possui coeficiente dominante  $A_r = \frac{(2r)!}{2^r(r!)^2}$  e  $\gamma_{\phi_r} = \frac{2}{2r+1}$  como dados em (2.46) e (2.49). Sob estas condições a quadratura de Gauss torna-se

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + E_r,$$

sendo  $x_i$  o  $i$ -ésimo zero de  $P_r(x)$  e onde, por (4.9),

$$H_i = -\frac{2}{(r+1)P_r'(x_i)P_{r+1}(x_i)} \quad (4.15)$$

ou, por (4.11),

$$H_i = \frac{2}{rP_r'(x_i)P_{r-1}(x_i)} \quad (4.16)$$

e, por (4.7),

$$E_r = \frac{2^{2r+1}(r!)^4}{(2r+1)[(2r)!]^3} f^{(2r)}(\xi), \quad \xi \in (-1, 1). \quad (4.17)$$

Fazendo-se  $x = x_i$  em (2.55),

$$(1-x_i^2)P_r'(x_i) = (r+1)x_iP_r(x_i) - (r+1)P_{r+1}(x_i) = -rx_iP_r(x_i) + rP_{r-1}(x_i),$$

$$(1-x_i^2)P_r'(x_i) = -(r+1)P_{r+1}(x_i) = rP_{r-1}(x_i). \quad (4.18)$$

Notando (4.18) reescreve-se os coeficientes em (4.15) e (4.16) do seguinte modo

$$H_i = \frac{2}{(1-x_i^2)(P_r'(x_i))^2}. \quad (4.19)$$

Como  $P_r(x)$  é função par ou ímpar e os zeros do polinômio de Legendre são simétricos com relação à origem, então  $(P_r'(x_i))^2 = (P_r'(x_{r+1-i}))^2$ . Logo,  $H_i = H_{r+1-i}$ , ou seja, os coeficientes  $H_i$  são também simétricos com relação à origem.

Por outro lado, notando a equação de recorrência para os polinômios ortonormais de Legendre, (2.56) a (2.58), tem-se, pelo Teorema 4.3, que

$$H_i = 2\mathbf{v}_{i,1}^2, \quad (4.20)$$

sendo  $\mathbf{v}_{i,1}$  o primeiro componente do autovetor  $\mathbf{v}_i$  normalizado da matriz de Jacobi

$$\mathbf{J}_r = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & 0 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & 0 & \sqrt{\beta_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{\beta_{r-1}} & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta_m = \frac{m^2}{4m^2 - 1}, \quad m = 1, \dots, r-1. \quad (4.21)$$

### 4.3 Quadratura de Gauss-Laguerre generalizada

O polinômio de Laguerre generalizado  $L_r^\alpha(x)$ , definido com  $w(x) = e^{-x}x^\alpha$ ,  $\alpha > -1$ , em  $[0, \infty)$ , possui coeficiente dominante  $A_r = \frac{(-1)^r}{r!}$  e  $\gamma_{\phi_r} = \frac{\Gamma(\alpha + r + 1)}{r!}$ , em (2.64) e (2.66). Sob estas condições a quadratura de Gauss torna-se

$$\int_0^\infty e^{-x}x^\alpha f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + E_r,$$

sendo  $x_i$  o  $i$ -ésimo zero de  $L_r^\alpha(x)$  e onde, por (4.9),

$$H_i = \frac{\Gamma(\alpha + r + 1)}{(r + 1)!L_r^{\alpha'}(x_i)L_{r+1}^\alpha(x_i)},$$

ou, por (4.11),

$$H_i = -\frac{\Gamma(\alpha + r)}{r!L_r^{\alpha'}(x_i)L_{r-1}^\alpha(x_i)} \quad (4.22)$$

e, por (4.7),

$$E_r = \frac{r!\Gamma(\alpha + r + 1)}{(2r)!} f^{(2r)}(\xi), \quad \xi \in (0, \infty). \quad (4.23)$$

Fazendo  $x = x_i$  em (2.71),

$$x_i L_r^{\alpha'}(x_i) = r L_r^\alpha(x_i) - (\alpha + r) L_{r-1}^\alpha(x_i),$$

$$L_{r-1}^\alpha(x_i) = -\frac{x_i L_r^{\alpha'}(x_i)}{(\alpha + r)}$$

e utilizando este resultado em (4.22),

$$H_i = -\frac{\Gamma(\alpha + r)}{r!L_r^{\alpha'}(x_i) \left( \frac{-x_i L_r^{\alpha'}(x_i)}{(\alpha + r)} \right)},$$

$$H_i = \frac{\Gamma(\alpha + r + 1)}{r! x_i (L_r^{\alpha'}(x_i))^2}. \quad (4.24)$$

Por outro lado, notando a equação de recorrência para os polinômios ortonormais de Laguerre generalizados, (2.72) a (2.74), tem-se, pelo Teorema 4.3, que

$$H_i = \Gamma(\alpha + 1) \mathbf{v}_{i,1}^2, \quad (4.25)$$

sendo  $\mathbf{v}_{i,1}$  o primeiro componente do autovetor  $\mathbf{v}_i$  normalizado da matriz de Jacobi

$$\mathbf{J}_r = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \sqrt{\beta_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{\beta_{r-1}} & \alpha_{r-1} \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} \alpha_m &= \alpha + 2m + 1, & m = 0, \dots, r-1 \\ \beta_m &= m(\alpha + m), & m = 1, \dots, r-1. \end{aligned} \quad (4.26)$$

## 4.4 Quadratura de Gauss-Laguerre

Esta quadratura é um caso particular da quadratura de Gauss-Laguerre generalizada quando  $\alpha = 0$ , portanto, sua fórmula de quadratura é

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + E_r,$$

sendo  $x_i$  o  $i$ -ésimo zero de  $L_r(x)$  e onde, por (4.24),

$$H_i = \frac{1}{x_i (L_r'(x_i))^2} \quad (4.27)$$

e, por (4.23),

$$E_r = \frac{(r!)^2}{(2r)!} f^{(2r)}(\xi), \quad \xi \in (0, \infty). \quad (4.28)$$

Notando a equação de recorrência para os polinômios ortornormais de Laguerre, (2.72) a (2.79), pelo Teorema 4.3, tem-se que

$$H_i = \mathbf{v}_{i,1}^2, \quad (4.29)$$

sendo  $\mathbf{v}_{i,1}$  o primeiro componente do autovetor  $\mathbf{v}_i$  normalizado da matriz de Jacobi

$$\mathbf{J}_r = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \sqrt{\beta_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{\beta_{r-1}} & \alpha_{r-1} \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} \alpha_m &= 2m + 1, & m = 0, \dots, r-1 \\ \beta_m &= m^2, & m = 1, \dots, r-1. \end{aligned} \quad (4.30)$$

## 4.5 Quadratura de Gauss-Hermite

O polinômio de Hermite  $H_r(x)$  definido com  $w(x) = e^{-x^2}$  no intervalo duplamente infinito possui coeficiente dominante  $A_r = 2^r$  e  $\gamma_{\phi_r} = 2^r r! \sqrt{\pi}$ , em (2.83) e (2.66). Desta forma, a quadratura de Gauss torna-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + E_r,$$

sendo  $x_i$  o  $i$ -ésimo zero de  $H_r(x)$  e onde, por (4.9),

$$H_i = - \frac{2^{r+1} r! \sqrt{\pi}}{H'_r(x_i) H_{r+1}(x_i)} \quad (4.31)$$

ou, por (4.11),

$$H_i = \frac{2^r (r-1)! \sqrt{\pi}}{H'_r(x_i) H_{r-1}(x_i)} \quad (4.32)$$

e, por (4.7),

$$E_r = \frac{r! \sqrt{\pi}}{2^r} \frac{f^{(2r)}(\xi)}{(2r)!}, \quad \xi \in (-\infty, \infty) \quad (4.33)$$

Da relação (2.92) segue que

$$\begin{aligned} H'_r(x_i) &= 2r H_{r-1}(x_i) = 2x_i H_r(x_i) - H_{r+1}(x_i), \\ H'_r(x_i) &= 2r H_{r-1}(x_i) = -H_{r+1}(x_i). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Notando (4.34) reescreve-se os coeficientes em (4.31) e (4.32) do seguinte modo

$$H_i = \frac{2^{r+1} r! \sqrt{\pi}}{(H'_r(x_i))^2}. \quad (4.35)$$

Como  $H_r(x)$  é função par ou ímpar e os zeros do polinômio de Hermite são simétricos com relação à origem, então  $(H'_r(x_{r+1-i}))^2 = (H'_r(x_i))^2$ . Logo,  $H_i = H_{r+1-i}$ , ou seja, os coeficientes  $H_i$  são também simétricos com relação à origem.

Por outro lado, notando a equação de recorrência para os polinômios ortonormais de Hermite, (2.93) a (2.95), tem-se pelo Teorema 4.3 que

$$H_i = \sqrt{\pi} \mathbf{v}_{i,1}^2, \quad (4.36)$$

sendo  $\mathbf{v}_{i,1}$  o primeiro componente do autovetor  $\mathbf{v}_i$  normalizado da matriz de Jacobi

$$\mathbf{J}_r = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & 0 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & 0 & \sqrt{\beta_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{\beta_{r-1}} & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta_m = \frac{m}{2}, \quad m = 1, \dots, r-1. \quad (4.37)$$

## 4.6 Quadratura de Gauss-Jacobi

O polinômio de Jacobi  $P_r^{(\alpha,\beta)}(x)$  é definido sobre o intervalo  $[-1, 1]$  com função peso  $w(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta$ ,  $\alpha > -1$  e  $\beta > -1$ . O seu coeficiente dominante é

$$A_r = \frac{1}{2^r r!} \frac{\Gamma(2r + \alpha + \beta + 1)}{\Gamma(r + \alpha + \beta + 1)}$$

e o termo

$$\gamma_{\phi_r} = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{(2r + \alpha + \beta + 1)r!} \frac{\Gamma(r + \alpha + 1)\Gamma(r + \beta + 1)}{\Gamma(r + \alpha + \beta + 1)},$$

ambos com  $r + \alpha + \beta \in \mathbb{R} - \mathbb{Z}_-^*$ , em (2.101) e (2.103).

Como explicado na Seção 2.6, para que  $r + \alpha + \beta \in \mathbb{R} - \{-1, -2, \dots\}$ , é suficiente que  $r \neq 0$ . Desde que uma quadratura pressupõe o número de zeros  $r \geq 1$ , então as expressões acima para  $A_r$  e  $\gamma_{\phi_r}$  são sempre válidas. Assim, a quadratura de Gauss torna-se

$$\int_{-1}^1 (1-x)^\alpha(1+x)^\beta f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + E_r,$$

sendo  $x_i$  o  $i$ -ésimo zero de  $P_r^{(\alpha,\beta)}(x)$  e onde, por (4.9),

$$H_i = -\frac{2^{\alpha+\beta}}{(r+1)!} \frac{(2r + \alpha + \beta + 2)}{(r + \alpha + \beta + 1)} \frac{\Gamma(r + \alpha + 1)\Gamma(r + \beta + 1)}{\Gamma(r + \alpha + \beta + 1) P_r^{(\alpha,\beta)'}(x_i) P_{r+1}^{(\alpha,\beta)}(x_i)} \quad (4.38)$$

ou, por (4.11),

$$H_i = \frac{2^{\alpha+\beta}}{r!} \frac{(2r + \alpha + \beta)}{(r + \alpha + \beta)} \frac{\Gamma(r + \alpha)\Gamma(r + \beta)}{\Gamma(r + \alpha + \beta) P_r^{(\alpha,\beta)'}(x_i) P_{r-1}^{(\alpha,\beta)}(x_i)} \quad (4.39)$$

e, por (4.7),

$$E_r = \frac{2^{2r+\alpha+\beta+1} r!}{(2r)!} \frac{\Gamma(r+\alpha+1)\Gamma(r+\beta+1)\Gamma(r+\alpha+\beta+1)}{(2r+\alpha+\beta+1)[\Gamma(2r+\alpha+\beta+1)]^2} f^{(2r)}(\xi), \quad \xi \in (-1, 1). \quad (4.40)$$

Avaliando (2.111) e (2.112) em  $x_i$  e usando o fato de que  $P_r^{(\alpha,\beta)}(x_i) = 0$ ,

$$(2r+\alpha+\beta+2)(1-x_i^2)P_r^{(\alpha,\beta)'}(x_i) = -2(r+1)(r+\alpha+\beta+1)P_{r+1}^{(\alpha,\beta)}(x_i), \quad (4.41)$$

$$(2r+\alpha+\beta)(1-x_i^2)P_r^{(\alpha,\beta)'}(x_i) = 2(r+\alpha)(r+\beta)P_{r-1}^{(\alpha,\beta)}(x_i), \quad (4.42)$$

Notando (4.41) e (4.42) em (2.111) e (2.112), respectivamente, os coeficientes  $H_i$  tornam-se iguais a

$$H_i = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{r!} \frac{\Gamma(r+\alpha+1)\Gamma(r+\beta+1)}{\Gamma(r+\alpha+\beta+1)(1-x_i^2)(P_r^{(\alpha,\beta)'}(x_i))^2}. \quad (4.43)$$

Entretanto, notando a equação de recorrência para os polinômios ortonormais de Jacobi, (2.113) a (2.117), tem-se, pelo Teorema 4.3, que

$$H_i = \frac{2^{\alpha+\beta+1}\Gamma(\alpha+1)\Gamma(\beta+1)}{\Gamma(\alpha+\beta+2)} \mathbf{v}_{i,1}^2, \quad (4.44)$$

sendo  $\mathbf{v}_{i,1}$  o primeiro componente do autovetor  $\mathbf{v}_i$  normalizado da matriz de Jacobi

$$\mathbf{J}_r = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \sqrt{\beta_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{\beta_{r-1}} & \alpha_{r-1} \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} \alpha_0 &= \frac{\beta - \alpha}{\alpha + \beta + 2}, \\ \beta_1 &= \frac{4(1+\alpha)(1+\beta)}{(\alpha + \beta + 3)(\alpha + \beta + 2)^2}, \end{aligned} \quad (4.45)$$

$$\alpha_m = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{(2m + \alpha + \beta)(2m + \alpha + \beta + 2)}, \quad m = 1, \dots, r-1, \quad (4.46)$$

$$\beta_m = \frac{4m(m+\alpha)(m+\beta)(m+\alpha+\beta)}{(2m+\alpha+\beta+1)(2m+\alpha+\beta-1)(2m+\alpha+\beta)^2}, \quad m = 2, \dots, r-1. \quad (4.47)$$

## 4.7 Quadratura de Gauss-Chebyshev de 1ª espécie

O polinômio de Chebyshev de 1ª espécie  $T_r(x)$ , definido com  $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$  no intervalo  $[-1, 1]$ , possui coeficiente dominante  $A_r = 2^{r-1}$  e  $\gamma_{\phi_r} = \frac{\pi}{2}$ , dados em (2.119) e (2.121). Utiliza-se os resultados da Seção 2.7 válidos para  $r \geq 1$ . Com isto, segue a

quadratura de Gauss

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + E_r,$$

sendo  $x_i$  o  $i$ -ésimo zero de  $T_r(x)$  e onde, por (4.9),

$$H_i = -\frac{\pi}{T_r'(x_i)T_{r+1}(x_i)} \quad (4.48)$$

ou, por (4.11),

$$H_i = \frac{\pi}{T_r'(x_i)T_{r-1}(x_i)}. \quad (4.49)$$

Além disso, por (4.7),

$$E_r = \frac{2\pi}{2^{2r}(2r)!} f^{(2r)}(\xi), \quad \xi \in (-1, 1). \quad (4.50)$$

Pelo Teorema 2.3, tem-se que  $x_i \in (-1, 1)$ . Por outro lado, se  $x_i = \cos(\theta_i)$ , então, é válido que  $\theta_i \in (0, \pi)$ . Deste modo, por (2.127),

$$T_r(x_i) = \cos(r\theta_i) = 0 \implies \text{sen}(r\theta_i) = \pm 1.$$

Segue que

$$\begin{aligned} T_{r+1}(x_i) &= \cos[(r+1)\theta_i] = \cos(r\theta_i)\cos(\theta_i) - \text{sen}(r\theta_i)\text{sen}(\theta_i) \\ &= \mp \text{sen}(\theta_i) \\ T_{r+1}(x_i) &= \mp \sqrt{1-x_i^2}. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Analogamente,

$$T_{r-1}(x_i) = \pm \sqrt{1-x_i^2}. \quad (4.52)$$

Novamente por (2.127),

$$T_r'(x) = -\text{sen}(r \arccos(x)) \left( \frac{-r}{\sqrt{1-x^2}} \right) dx \implies T_r'(x) = \frac{r \text{sen}(r \arccos(x))}{\sqrt{1-x^2}} dx.$$

Conseqüentemente,

$$\begin{aligned} T_r'(x_i) &= \frac{r \text{sen}[r \arccos(\cos(\theta_i))]}{\sqrt{1-\cos^2(\theta_i)}} = \frac{r \text{sen}(r\theta_i)}{\text{sen}(\theta_i)}, \\ T_r'(x_i) &= \frac{\pm r}{\sqrt{1-x_i^2}}. \end{aligned} \quad (4.53)$$

Notando (4.51), (4.52) e (4.53), tem-se que os coeficientes em (4.48) e (4.58) tornam-se

uma constante

$$H_i = \frac{\pi}{r}. \quad (4.54)$$

Por outro lado, notando a equação de recorrência para os polinômios ortonormais de Chebyshev de 1ª espécie, (2.129) a (2.132), tem-se, pelo Teorema 4.3, que

$$H_i = \pi \mathbf{v}_{i,1}^2, \quad (4.55)$$

sendo  $\mathbf{v}_{i,1}$  o primeiro componente do autovetor  $\mathbf{v}_i$  normalizado da matriz de Jacobi

$$\mathbf{J}_r = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & 0 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & 0 & \sqrt{\beta_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{\beta_{r-1}} & 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} \beta_1 &= \frac{1}{2}, \\ \beta_m &= \frac{1}{4}, \quad m = 2, \dots, r-1. \end{aligned} \quad (4.56)$$

## 4.8 Quadratura de Gauss-Chebyshev de 2ª espécie

O polinômio de Chebyshev de 2ª espécie  $U_r(x)$  definido com  $w(x) = \sqrt{1-x^2}$  no intervalo  $[-1, 1]$ , possui coeficiente dominante  $A_r = 2^r$  e  $\gamma_{\phi_r} = \frac{\pi}{2}$ , em (2.134) e (2.135). Com estes resultados, a quadratura de Gauss torna-se

$$\int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + E_r,$$

sendo  $x_i$  o  $i$ -ésimo zero de  $U_r(x)$  e onde, por (4.9),

$$H_i = -\frac{\pi}{U_r'(x_i)U_{r+1}(x_i)} \quad (4.57)$$

ou, por (4.11),

$$H_i = \frac{\pi}{U_r'(x_i)U_{r-1}(x_i)}. \quad (4.58)$$

Por (4.7), tem-se que

$$E_r = \frac{\pi}{2^{2r+1}} \frac{f^{(2r)}(\xi)}{(2r)!}, \quad \xi \in (-1, 1). \quad (4.59)$$

Pelo Teorema 2.3, tem-se  $x_i \in (-1, 1)$ . Por outro lado, se  $x_i = \cos(\theta_i)$ , então  $\theta_i \in (0, \pi)$ . Deste modo, por (2.140),

$$U_r(x_i) = \frac{\text{sen}[(r+1)\theta_i]}{\text{sen}(\theta_i)} = 0 \quad \implies \quad \text{sen}[(r+1)\theta_i] = 0 \quad \implies \quad \cos[(r+1)\theta_i] = \pm 1.$$

Decorre que

$$U_{r+1}(x_i) = \frac{\text{sen}((r+1)+1)\theta_i}{\text{sen}(\theta_i)} = \frac{\text{sen}[(r+1)\theta_i] \cos(\theta_i) + \text{sen}(\theta_i) \cos[(r+1)\theta_i]}{\text{sen}(\theta_i)},$$

$$U_{r+1}(x_i) = \pm \frac{\text{sen}(\theta_i)}{\text{sen}(\theta_i)} = \pm 1. \quad (4.60)$$

Analogamente,

$$U_{r-1}(x_i) = \mp 1. \quad (4.61)$$

Desde que  $x = \cos(\theta)$ , então  $dx = -\text{sen}(\theta) d\theta \Rightarrow d\theta = -\frac{dx}{\text{sen}(\theta)}$ . Então, por (2.140),

$$U'_r(x) = \frac{(r+1) \cos[(r+1)\theta] \text{sen}(\theta) - \text{sen}[(r+1)\theta] \cos(\theta)}{\text{sen}^2(\theta)} d\theta,$$

$$U'_r(x) = -\frac{(r+1) \cos[(r+1)\theta] \text{sen}(\theta) - \text{sen}[(r+1)\theta] \cos(\theta)}{\text{sen}^3(\theta)} dx.$$

Conseqüentemente,

$$U'_r(x_i) = -\frac{(r+1) \cos[(r+1)\theta_i] \text{sen}(\theta_i) - \text{sen}[(r+1)\theta_i] \cos(\theta_i)}{\text{sen}^3(\theta_i)},$$

$$= \mp \frac{(r+1) \text{sen}(\theta_i)}{\text{sen}^3(\theta_i)},$$

$$U'_r(x_i) = \mp \frac{r+1}{\text{sen}^2(\theta_i)}.$$

Mas, desde que  $x_i = \cos\left(\frac{i\pi}{r+1}\right)$  em (2.141), conclui-se que

$$U'_r(x_i) = \mp \frac{r+1}{\text{sen}^2\left(\frac{i\pi}{r+1}\right)}. \quad (4.62)$$

Observando os resultados (4.60), (4.61) e (4.62), os coeficientes em (4.57) e (4.58) tornam-se iguais a

$$H_i = \frac{\pi}{r+1} \text{sen}^2\left(\frac{i\pi}{r+1}\right). \quad (4.63)$$

Como  $\text{sen}\left(\frac{i\pi}{r+1}\right) = \text{sen}\left(\frac{(r+1-i)\pi}{r+1}\right)$ , então  $H_i = H_{r+1-i}$ .

Por outro lado, notando a equação de recorrência para os polinômios  $U_r^*(x)$ , (2.142) a (2.144), tem-se, pelo Teorema 4.3, que

$$H_i = \frac{\pi}{2} \mathbf{v}_{i,1}^2, \quad (4.64)$$

sendo  $\mathbf{v}_{i,1}$  o primeiro componente do autovetor  $\mathbf{v}_i$  normalizado da matriz de Jacobi

$$\mathbf{J}_r = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & 0 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & 0 & \sqrt{\beta_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{\beta_{r-1}} & 0 \end{bmatrix}, \beta_m = \frac{1}{4}, \quad m = 1, \dots, r-1. \quad (4.65)$$

## 4.9 Quadratura de Gauss-Gegenbauer

O polinômio de Gegenbauer  $C_r^\mu(x)$  definido com  $w(x) = (1-x^2)^{\mu-\frac{1}{2}}$ , onde  $\mu > -\frac{1}{2}$  e  $\mu \neq 0$ , no intervalo  $[-1, 1]$ , possui coeficiente dominante

$$A_r = \frac{1}{2^r r!} \frac{\Gamma(\mu + \frac{1}{2}) \Gamma(2r + 2\mu)}{\Gamma(2\mu) \Gamma(r + \mu + \frac{1}{2})},$$

e

$$\gamma_{\phi_r} = \frac{2^{2\mu-1}}{(r+\mu)r!} \frac{\Gamma^2(\mu + \frac{1}{2}) \Gamma(r + 2\mu)}{\Gamma^2(2\mu)},$$

em (2.145) e (2.146). Com estes resultados, segue a quadratura de Gauss

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^{\mu-\frac{1}{2}} f(x) dx = \sum_{k=1}^r H_k f(x_k) + E_r,$$

sendo  $x_i$  o  $i$ -ésimo zero de  $C_r^\mu(x)$  e onde, por (4.9),

$$\begin{aligned} H_i &= -\frac{2^{2\mu-2}}{(r+1)!(r+\mu)} \frac{(2r+2\mu+1)(2r+2\mu)}{(r+\mu+\frac{1}{2})} \frac{\Gamma^2(\mu+\frac{1}{2})\Gamma(r+2\mu)}{\Gamma^2(2\mu)C_r^{\mu'}(x_i)C_{r+1}^\mu(x_i)}, \\ &= -\frac{2^{2\mu-2}}{(r+1)!(r+\mu)} \frac{2(r+\mu+\frac{1}{2})2(r+\mu)}{(r+\mu+\frac{1}{2})} \frac{\Gamma^2(\mu+\frac{1}{2})\Gamma(r+2\mu)}{\Gamma^2(2\mu)C_r^{\mu'}(x_i)C_{r+1}^\mu(x_i)}, \\ H_i &= -\frac{2^{2\mu}}{(r+1)!} \frac{\Gamma^2(\mu+\frac{1}{2})}{\Gamma^2(2\mu)} \frac{\Gamma(r+2\mu)}{C_r^{\mu'}(x_i)C_{r+1}^\mu(x_i)}. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Notando que (Abramowitz e Stegun, 1972)

$$\frac{\Gamma^2(\mu+\frac{1}{2})}{\Gamma^2(2\mu)} = \frac{4\pi}{2^{4\mu}\Gamma^2(\mu)}, \quad (4.67)$$

segue que

$$H_i = -\frac{4\pi}{2^{2\mu}(r+1)!} \frac{\Gamma(r+2\mu)}{\Gamma^2(\mu)C_r^{\mu'}(x_i)C_{r+1}^\mu(x_i)}. \quad (4.68)$$

O coeficiente  $H_i$  também pode ser definido por (4.11),

$$\begin{aligned} H_i &= \frac{2^{2\mu-2}}{r!(r+\mu-1)} \frac{(2r+2\mu-1)(2r+2\mu-2)}{(r+\mu-\frac{1}{2})} \frac{\Gamma^2(\mu+\frac{1}{2})\Gamma(r+2\mu-1)}{\Gamma^2(2\mu)C_r^{\mu'}(x_i)C_{r-1}^\mu(x_i)}, \\ &= \frac{2^{2\mu-2}}{r!(r+\mu-1)} \frac{2(r+\mu-\frac{1}{2})2(r+\mu-1)}{(r+\mu-\frac{1}{2})} \frac{\Gamma^2(\mu+\frac{1}{2})\Gamma(r+2\mu-1)}{\Gamma^2(2\mu)C_r^{\mu'}(x_i)C_{r-1}^\mu(x_i)}, \\ H_i &= \frac{2^{2\mu}}{r!} \frac{\Gamma^2(\mu+\frac{1}{2})}{\Gamma^2(2\mu)} \frac{\Gamma(r+2\mu-1)}{C_r^{\mu'}(x_i)C_{r-1}^\mu(x_i)}. \end{aligned}$$

Contudo, por (4.67),

$$H_i = \frac{4\pi}{2^{2\mu}r!} \frac{\Gamma(r+2\mu-1)}{\Gamma^2(\mu)C_r^{\mu'}(x_i)C_{r-1}^\mu(x_i)}. \quad (4.69)$$

O erro é dado por (4.7),

$$E_r = \frac{2^{2(\mu+r)}r!\Gamma(r+2\mu)\Gamma^2(r+\mu+\frac{1}{2})}{2(r+\mu)(2r)!\Gamma^2(2r+2\mu)} f^{(2r)}(\xi), \quad \xi \in (-1, 1). \quad (4.70)$$

Fazendo  $x = x_i$  em (2.153),

$$(1-x_i^2)C_r^{\mu'}(x_i) = -rx_iC_r^\mu(x_i) + (r+2\mu-1)C_{r-1}^\mu(x_i) = (r+2\mu)x_iC_r^\mu(x_i) - (r+1)C_{r+1}^\mu(x_i),$$

$$(1-x_i^2)C_r^{\mu'}(x_i) = (r+2\mu-1)C_{r-1}^\mu(x_i) = -(r+1)C_{r+1}^\mu(x_i).$$

Observando o resultado anterior os coeficientes (4.68) e (4.69) tornam-se iguais a

$$H_i = \frac{4\pi}{2^{2\mu}r!} \frac{\Gamma(r+2\mu)}{\Gamma^2(\mu)(1-x_i^2)(C_r^{\mu'}(x_i))^2}. \quad (4.71)$$

Como os polinômios de Gegenbauer são funções pares ou ímpares e os zeros são simétricos com relação à origem, então  $(C_r^{\mu'}(x_i))^2 = (C_r^{\mu'}(x_{r+1-i}))^2$ . Logo,  $H_i = H_{r+1-i}$

Por outro lado, notando a equação de recorrência para os polinômios  $C_r^{\mu*}(x)$ , (2.154) a (2.156), tem-se, pelo Teorema 4.3, que

$$H_i = \frac{2^{2\mu}\Gamma(\mu+\frac{1}{2})}{\Gamma(2\mu+1)} \mathbf{v}_{i,1}^2, \quad (4.72)$$

sendo  $\mathbf{v}_{i,1}$  o primeiro componente do autovetor  $\mathbf{v}_i$  normalizado da matriz de Jacobi

$$\mathbf{J}_r = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & 0 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & 0 & \sqrt{\beta_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{\beta_{r-1}} & 0 \end{bmatrix}, \beta_m = \frac{m(m+2\mu-1)}{4(m+\mu)(m+\mu-1)}, \quad m = 1, \dots, r-1. \quad (4.73)$$

## 5 *Algoritmos e implementações da quadratura de Gauss*

Os capítulos anteriores mostraram que as fórmulas de quadratura de Gauss consistem de um somatório que avalia  $f(x)$  nos zeros  $x_i$  do polinômio ortogonal junto dos coeficientes  $H_i$ . Há diversas formas para se obter  $x_i$  e  $H_i$ . Este trabalho apresenta duas formas: uma é por meio dos autovalores e autovetores da matriz de Jacobi e a outra é calculando os zeros por meio do método de Newton e os coeficientes por meio de fórmulas. Este capítulo destina-se à implementação dos algoritmos para integração e irá utilizar estes dois métodos diferentes a fim de comparar a eficiência entre eles.

O capítulo inicia-se com os algoritmos para zeros e coeficientes que não usam a matriz de Jacobi seguido dos algoritmos para integração, compondo as Seções 5.1 a 5.3. A Seção 5.4 apresenta experimentos numéricos para cada quadratura de Gauss usando estes algoritmos. A Seção 5.5 apresenta os algoritmos para  $x_i$  e  $H_i$  com uso da matriz  $\mathbf{J}_r$  e sobre eles serão realizados os mesmos experimentos. A Seção 5.6 destina-se a validar os algoritmos para zeros e coeficientes e, na Seção 5.7, é desenvolvido um esquema para a escolha dos algoritmos mais eficientes para uma determinada integral.

### 5.1 Algoritmos para zeros $x_i$ e coeficientes $H_i$

Os algoritmos para o cálculo dos  $r$  zeros  $x_i$  dos polinômios ortogonais e dos coeficientes  $H_i$  das respectivas quadraturas, sem fazer uso da matriz de Jacobi (Figuras 9 a 16), serão agora tratados.

O parâmetro de entrada é o número  $r$  de zeros do polinômio ortogonal e, quando existentes, os parâmetros  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\mu$ . Os parâmetros de saída são o vetor  $X$  com os zeros  $x_i$  e o vetor  $H$  com os coeficientes  $H_i$ .

Os algoritmos seguem a seguinte rotina:

1. Aproximação inicial para o zero;
2. Refinamento pelo método de Newton;
3. Cálculo do zero e do respectivo coeficiente.

Somente os casos dos zeros dos polinômios de Chebyshev dispensam o método de Newton, pois possuem fórmulas trigonométricas (2.128) e (2.141) para gerá-los diretamente. Para os demais algoritmos, as aproximações iniciais dos zeros para o método de Newton são propostas por Stroud e Secrest<sup>1</sup> citado por Press *et al* (1997), exceto as aproximações para os zeros do polinômio de Legendre, dadas por (2.54).

Os  $r$  zeros  $x_i$ , exceto para os polinômios de Laguerre, de Laguerre generalizado e de Jacobi, são simétricos com relação à origem (Corolário 2.9.1) e, nesses casos, é necessário calcular apenas os zeros não negativos.

As fórmulas para os coeficientes  $H_i$  utilizadas nos algoritmos de cada quadratura são aquelas em (4.19), (4.24), (4.27), (4.35), (4.43), (4.54), (4.63) e (4.71). As mesmas estão em Szegö (1975).

Os coeficientes (4.19), (4.35), (4.63) e (4.71) possuem a propriedade  $H_i = H_{r+1-i}$ , então, nestes casos, o valor de  $H_i$  também é atribuído a  $H_{r+1-i}$ . Excepcionalmente, os coeficientes  $H_i$  de Chebyshev de 1ª espécie (4.54), para um dado  $r$ , são todos iguais.

---

<sup>1</sup>Stroud, A.H., e Secrest, D. 1966, Gaussian Quadrature Formulas (Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall).

```

Algoritmo zero_h_legendre
{Objetivo Calcular os zeros  $x_i$  e os coeficientes  $H_i$  de Gauss-Legendre}
parâmetro de entrada  $r$  {número de zeros}
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {zeros e coeficientes}
{ $X(1)$  é o menor e  $X(r)$  é o maior zero}
início algoritmo
1   $m \leftarrow \lfloor (r + 1)/2 \rfloor$  {os zeros são simétricos, calcula-se apenas os não negativos}
2  para  $i \leftarrow 1$  até  $m$  faça
3       $x \leftarrow \cos(\pi * (i - 0,25)/(r + 0,5))$ 
      {aproximação do  $i$ -ésimo zero não negativo, por (2.54),  $x_i > x_{i+1}$ }
4      repita
5           $p1 \leftarrow 1$ 
6           $p2 \leftarrow 0$ 
7          para  $j \leftarrow 0$  até  $r - 1$  faça
8               $p3 \leftarrow p2$ 
9               $p2 \leftarrow p1$ 
10              $p1 \leftarrow ((2 * j + 1) * x * p2 - j * p3)/(j + 1)$ 
             {polinômio de Legendre no ponto  $x$ , por (2.53)}
11         fim para
12          $pp \leftarrow r * (x * p1 - p2)/(x^2 - 1)$ 
         {derivada do polinômio de Legendre no ponto  $x$ , por (2.55)}
13          $x1 \leftarrow x$  {método de Newton para se calcular os zeros}
14          $x \leftarrow x1 - (p1/pp)$ 
15         se  $|x - x1| < 10^{-15}$  então interrompa
16         fim se
17     fim repita
18      $X(r + 1 - i) \leftarrow x$  {zero não negativo}
19      $X(i) \leftarrow -x$  {zero simétrico}
20      $H(r + 1 - i) \leftarrow 2/((1 - x^2) * pp^2)$  {(4.19)}
21      $H(i) \leftarrow H(r + 1 - i)$   $\{H_i = H_{r+1-i}\}$ 
22 fim para
fim algoritmo

```

Figura 9: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Legendre.

```

Algoritmo zero_h_laguerre_gen
{Objetivo Calcular os zeros  $x_i$  e os coeficientes  $H_i$  de Gauss-Laguerre generalizada}
parâmetros de entrada  $r$  e  $\alpha$  {número de zeros e parâmetro  $\alpha > -1$ }
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {zeros e coeficientes}
{ $X(1)$  é o menor e  $X(r)$  é o maior zero}
início algoritmo
1   para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
2     se  $i = 1$  então
3        $x \leftarrow (1 + \alpha) * (3 + 0,92 * \alpha) / (1 + 2,4 * r + 1,8 * \alpha)$  { $x_i < x_{i+1}$ }
4     senão, se  $i = 2$ 
5        $x \leftarrow X(1) + (15 + 6,25 * \alpha) / (1 + 0,9 * \alpha + 2,5 * r)$ 
6     senão
7        $ai \leftarrow i - 2$ 
8        $x \leftarrow X(i - 1) + ((1 + 2,55 * ai) / (1,9 * ai) + 1,26 * ai * \alpha / (1 + 3,5 * ai))$ 
           $* (X(i - 1) - X(i - 2)) / (1 + 0,3 * \alpha)$ 
9     fim se
10    para  $k \leftarrow 1$  até 10 faça {máximo de 10 iterações no método de Newton}
11       $p1 \leftarrow 1$ 
12       $p2 \leftarrow 0$ 
13      para  $j \leftarrow 0$  até  $r - 1$  faça
14         $p3 \leftarrow p2$ 
15         $p2 \leftarrow p1$ 
16         $p1 \leftarrow ((-x + \alpha + 2 * j + 1) * p2 - (\alpha + j) * p3) / (j + 1)$ 
          {polinômio de Laguerre generalizado no ponto  $x$ , por (2.70)}
17      fim para
18       $pp \leftarrow (r * p1 - (r + \alpha) * p2) / x$ 
          {derivada do polinômio de Laguerre generalizado no ponto  $x$ , por (2.71)}
19       $x1 \leftarrow x$  {método de Newton para se calcular os zeros}
20       $x \leftarrow x1 - (p1/pp)$ 
21      se  $|x - x1| < 10^{-15}$  então interrompa
22      fim se
23    fim para
24     $X(i) \leftarrow x$ 
25     $H(i) \leftarrow \Gamma(\alpha + r + 1) / (r! * x * pp^2)$  {(4.24)}
26  fim para
fim algoritmo

```

Figura 10: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Laguerre generalizada.

```

Algoritmo zero_h_laguerre
{Objetivo Calcular os zeros  $x_i$  e os coeficientes  $H_i$  de Gauss-Laguerre}
parâmetro de entrada  $r$  {número de zeros}
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {zeros e coeficientes}
{ $X(1)$  é o menor e  $X(r)$  é o maior zero}
início algoritmo
1   para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
2     se  $i = 1$  então
3        $x \leftarrow 3/(1 + 2,4 * r)$  { $x_i < x_{i+1}$ }
4     senão, se  $i = 2$  então
5        $x \leftarrow X(1) + 15/(1 + 2,5 * r)$ 
6     senão
7        $ai \leftarrow i - 2$ 
8        $x \leftarrow X(i - 1) + (1 + 2,55 * ai)/(1,9 * ai) * (X(i - 1) - X(i - 2))$ 
9     fim se
10  para  $k \leftarrow 1$  até 10 faça {máximo de 10 iterações no método de Newton}
11     $p1 \leftarrow 1$ 
12     $p2 \leftarrow 0$ 
13    para  $j \leftarrow 0$  até  $r - 1$ 
14       $p3 \leftarrow p2$ 
15       $p2 \leftarrow p1$ 
16       $p1 \leftarrow ((-x + 2 * j + 1) * p2 - j * p3)/(j + 1)$ 
        {polinômio de Laguerre no ponto  $x$ , por (2.75)}
17    fim para
18     $pp \leftarrow r * (p1 - p2)/x$ 
        {derivada do polinômio de Laguerre no ponto  $x$ , por (2.76)}
19     $x1 \leftarrow x$  {método de Newton para se calcular os zeros}
20     $x \leftarrow x1 - (p1/pp)$ 
21    se  $|x - x1| < 10^{-15}$  então interrompa
22    fim se
23  fim para
24   $X(i) \leftarrow x$ 
25   $H(i) \leftarrow 1/(x * pp^2)$  {(4.27)}
26  fim para
fim algoritmo

```

Figura 11: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Laguerre.

```

Algoritmo zero_h_hermite
{Objetivo Calcular os zeros  $x_i$  e os coeficientes  $H_i$  de Gauss-Hermite}
parâmetro de entrada  $r$  {número de zeros}
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {zeros e coeficientes}
{ $X(1)$  é o maior e  $X(r)$  é o menor zero}
início algoritmo
1   $m \leftarrow \lfloor (r+1)/2 \rfloor$  {os zeros são simétricos, calcula-se apenas os não negativos}
2  para  $i \leftarrow 1$  até  $m$  faça
3    se  $i = 1$  então
4       $x \leftarrow \sqrt{2 * r + 1} - 1,85575 * (2 * r + 1)^{-0,16667}$  { $x_i > x_{i+1}$ }
5    senão, se  $i = 2$  então
6       $x \leftarrow x - 1,14 * r^{0,426}/x$ 
7    senão, se  $i = 3$  então
8       $x \leftarrow 1,86 * x - 0,86 * X(1)$ 
9    senão, se  $i = 4$  então
10      $x \leftarrow 1,91 * x - 0,91 * X(2)$ 
11   senão
12      $x \leftarrow 2 * x - X(i - 2)$ 
13   fim se
14   para  $k \leftarrow 1$  até 10 faça {máximo de 10 iterações no método de Newton}
15      $p1 \leftarrow 1$ 
16      $p2 \leftarrow 0$ 
17     para  $j \leftarrow 0$  até  $r - 1$  faça
18        $p3 \leftarrow p2$ 
19        $p2 \leftarrow p1$ 
20        $p1 \leftarrow 2 * (x * p2 - j * p3)$ 
21       {polinômio de Hermite no ponto  $x$ , por (2.89)}
22     fim para
23      $pp \leftarrow 2 * r * p2$ 
24     {derivada do polinômio de Hermite no ponto  $x$ , por (2.92)}
25      $x1 \leftarrow x$  {método de Newton para se calcular os zeros}
26      $x \leftarrow x1 - (p1/pp)$ 
27     se  $|x - x1| < 10^{-15}$  então interrompa
28     fim se
29   fim para
30    $X(i) \leftarrow x$ 
31    $X(r + 1 - i) \leftarrow -x$  {zero simétrico}
32    $H(i) \leftarrow \sqrt{\pi} * 2^{r+1} * r! / pp^2$  {(4.35)}
33    $H(r + 1 - i) \leftarrow H(i)$  { $H_i = H_{r+1-i}$ }
34 fim algoritmo

```

Figura 12: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Hermite.

```

Algoritmo zero_h_jacobi
{Objetivo Calcular os zeros  $x_i$  e os coeficientes  $H_i$  de Gauss-Jacobi}
parâmetros de entrada  $r, \alpha$  e  $\beta$  {número de zeros e parâmetros  $\alpha, \beta > -1$ }
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {zeros e coeficientes}
{ $X(1)$  é o maior e  $X(r)$  é o menor zero}
início algoritmo
1   para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
2     se  $i = 1$  então
3        $ar \leftarrow \alpha/r$  { $x_i > x_{i+1}$ }
4        $br \leftarrow \beta/r$ 
5        $r1 \leftarrow (1 + \alpha) * (2,78/(4 + r^2) + 0,768 * ar/r)$ 
6        $r2 \leftarrow 1 + 1,48 * ar + 0,96 * br + 0,452 * ar^2 + 0,83 * ar * br$ 
7        $x \leftarrow 1 - r1/r2$ 
8     senão, se  $i = 2$  então
9        $r1 \leftarrow (4,1 + \alpha)/((1 + \alpha) * (1 + 0,156 * \alpha))$ 
10       $r2 \leftarrow 1 + 0,06 * (r - 8) * (1 + 0,12 * \alpha)/r$ 
11       $r3 \leftarrow 1 + 0,012 * \beta * (1 + 0,25 * |\alpha|/r)$ 
12       $x \leftarrow x - (1 - x) * r1 * r2 * r3$ 
13    senão, se  $i = 3$  então
14       $r1 \leftarrow (1,67 + 0,28 * \alpha)/(1 + 0,37 * \alpha)$ 
15       $r2 \leftarrow 1 + 0,22 * (r - 8)/r$ 
16       $r3 \leftarrow 1 + 8 * \beta/((6,28 + \beta) * r^2)$ 
17       $x \leftarrow x - (X(1) - x) * r1 * r2 * r3$ 
18    senão, se  $i = r - 1$  então
19       $r1 \leftarrow (1 + 0,235 * \beta)/(0,766 + 0,119 * \beta)$ 
20       $r2 \leftarrow 1/(1 + 0,639 * (r - 4)/(1 + 0,71 * (r - 4)))$ 
21       $r3 \leftarrow 1/(1 + 20 * \alpha/((7,5 + \alpha) * r^2))$ 
22       $x \leftarrow x + (x - X(r - 3)) * r1 * r2 * r3$ 
23    senão, se  $i = r$  então
24       $r1 \leftarrow (1 + 0,37 * \beta)/(1,67 + 0,28 * \beta)$ 
25       $r2 \leftarrow 1/(1 + 0,22 * (r - 8)/r)$ 
26       $r3 \leftarrow 1/(1 + 8 * \alpha/((6,28 + \alpha) * r^2))$ 
27       $x \leftarrow x + (x - X(r - 2)) * r1 * r2 * r3$ 
28    senão
29       $x \leftarrow 3 * X(i - 1) - 3 * X(i - 2) + X(i - 3)$ 
30    fim se
31     $alpbet \leftarrow \alpha + \beta$ 
32    repita
33       $temp \leftarrow 2 + alpbet$ 
34       $p1 \leftarrow (\alpha - \beta + temp * x)/2$ 
35       $p2 \leftarrow 1$ 
36      para  $j \leftarrow 1$  até  $r - 1$  faça
37         $p3 \leftarrow p2$ 
38         $p2 \leftarrow p1$ 
39         $temp \leftarrow 2 * j + alpbet$ 
40         $a \leftarrow 2 * (j + 1) * (j + alpbet + 1) * temp$ 
41         $b \leftarrow (temp + 1) * ((temp + 2) * temp * x + \alpha^2 - \beta^2)$ 
42         $c \leftarrow 2 * (j + \alpha) * (j + \beta) * (temp + 2)$ 
43         $p1 \leftarrow (b * p2 - c * p3)/a$  {polinômio de Jacobi no ponto  $x$ , por (2.110)}
44      fim para
45       $temp \leftarrow 2 * r + alpbet$ 
46       $pp \leftarrow (r * (\alpha - \beta - temp * x) * p1 + 2 * (r + \alpha) * (r + \beta) * p2)/(temp * (1 - x^2))$ 
47      {derivada do polinômio de Jacobi no ponto  $x$ , por (2.112)}
48       $x1 \leftarrow x$  {método de Newton para calcular os zeros}
49       $x \leftarrow x1 - (p1/pp)$ 
50      se  $|x - x1| < 10^{-15}$  então interrompa
51    fim se
52  fim para
53   $X(i) \leftarrow x$ 
54   $H(i) \leftarrow 2^{(alpbet+1)} * \Gamma(\alpha + r + 1) * \Gamma(\beta + r + 1)/(r! * \Gamma(r + alpbet + 1) * (1 - x^2) * pp^2)$  {(4.43)}
55  fim para
fim algoritmo

```

Figura 13: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Jacobi.

**Algoritmo zero\_h\_chebyshev\_1**  
 {**Objetivo** Calcular os zeros  $x_i$  e os coeficientes  $H_i$  de Gauss-Chebyshev de 1ª espécie}  
**parâmetro de entrada**  $r$  {número de zeros}  
**parâmetros de saída**  $X$  e  $H$  {zeros e coeficientes}  
 { $X(1)$  é o menor e  $X(r)$  é o maior zero}  
 início algoritmo  
 1  $m \leftarrow \lfloor (r+1)/2 \rfloor$  {os zeros são simétricos, calcula-se apenas os não negativos}  
 2 para  $i \leftarrow 1$  até  $m$  faça  
 3  $X(i) \leftarrow -\cos(((2 * i - 1) * \pi)/(2 * r))$  {(2.128)}  
 4  $X(r+1-i) \leftarrow -X(i)$  {zero simétrico}  
 5  $H(i) \leftarrow \pi/r$  {(4.54)}  
 6  $H(r+1-i) \leftarrow H(i)$  { $H_i = H_{r+1-i}$ }  
 7 fim para  
 fim algoritmo

Figura 14: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Chebyshev de 1ª espécie.

**Algoritmo zero\_h\_chebyshev\_2**  
 {**Objetivo** Calcular os zeros  $x_i$  e os coeficientes  $H_i$  de Gauss-Chebyshev de 2ª espécie}  
**parâmetro de entrada**  $r$  {número de raízes}  
**parâmetros de saída**  $X$  e  $H$  {raízes e coeficientes}  
 { $X(1)$  é a menor e  $X(r)$  é a maior raiz}  
 início algoritmo  
 1  $m \leftarrow \lfloor (r+1)/2 \rfloor$  {os zeros são simétricos, calcula-se apenas os não negativos}  
 2 para  $i \leftarrow 1$  até  $m$  faça  
 3  $X(i) \leftarrow -\cos((i * \pi)/(r+1))$  {(2.128)}  
 4  $X(r+1-i) \leftarrow -X(i)$  {zero simétrico}  
 5  $H(i) \leftarrow (\pi/(r+1)) * (\text{sen}((i * \pi)/(r+1)))^2$  {(4.63)}  
 6  $H(r+1-i) \leftarrow H(i)$  { $H_i = H_{r+1-i}$ }  
 7 fim para  
 fim algoritmo

Figura 15: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Chebyshev de 2ª espécie.

```

Algoritmo zero_h_gegenbauer
{Objetivo Calcular os zeros  $x_i$  e os coeficientes  $H_i$  de Gauss-Gegenbauer}
parâmetros de entrada  $r$  e  $\mu$  {número de raízes e parâmetro  $\mu > -\frac{1}{2}$ ,  $\mu \neq 0$ }
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {raízes e coeficientes}
{ $X(1)$  é a maior e  $X(r)$  é a menor raiz}
início algoritmo
1   $m \leftarrow \lfloor (r+1)/2 \rfloor$  {os zeros são simétricos, calcula-se apenas os não negativos}
2   $mi = \mu - 0,5$ 
3  para  $i \leftarrow 1$  até  $m$  faça
4      se  $0 < \mu < 1$  e  $\mu \neq 0,5$  então
5          se  $\mu > 0,5$  então
6               $x \leftarrow \cos(\pi/2 * ((i - (1 - \mu) * 0,5)/(r + \mu) + i/(r + 1)))$  {(2.151)}
7          senão
8               $x \leftarrow \cos(\pi/2 * ((i - (1 - \mu) * 0,5)/(r + \mu) + (i + \mu - 0,5)/(r + 2 * \mu)))$  {(2.152)}
9          fim se
10     senão, se  $i = 1$  então
11          $mur \leftarrow mi/r$  { $x_i > x_{i+1}$ }
12          $r1 \leftarrow (1 + mi) * (2,78/(4 + r^2) + 0,768 * mur/r)$ 
13          $r2 \leftarrow 1 + 2,44 * mur + 1,282 * mur^2$ 
14          $x \leftarrow 1 - r1/r2$ 
15     senão, se  $i = 2$  então
16          $r1 \leftarrow (4,1 + mi)/((1 + mi) * (1 + 0,156 * mi))$ 
17          $r2 \leftarrow 1 + 0,06 * (r - 8) * (1 + 0,12 * mi)/r$ 
18          $r3 \leftarrow 1 + 0,012 * mi * (1 + 0,25 * |mi|/r)$ 
19          $x \leftarrow x - (1 - x) * r1 * r2 * r3$ 
20     senão, se  $i = 3$  então
21          $r1 \leftarrow (1,67 + 0,28 * mi)/(1 + 0,37 * mi)$ 
22          $r2 \leftarrow 1 + 0,22 * (r - 8)/r$ 
23          $r3 \leftarrow 1 + 8 * mi/((6,28 + mi) * r^2)$ 
24          $x \leftarrow x - (X(1) - x) * r1 * r2 * r3$ 
25     senão
26          $x \leftarrow 3 * X(i - 1) - 3 * X(i - 2) + X(i - 3)$ 
27     fim se
28     repita
29          $p1 \leftarrow 1$ 
30          $p2 \leftarrow 0$ 
31         para  $j \leftarrow 0$  até  $r - 1$  então
32              $p3 \leftarrow p2$ 
33              $p2 \leftarrow p1$ 
34              $p1 \leftarrow (2 * (j + \mu) * x * p2 + (1 - j - 2 * \mu) * p3)/(j + 1)$ 
                 {polinômio de Gegenbauer no ponto  $x$ , por (2.150)}
35         fim para
36          $pp \leftarrow (-r * x * p1 + (r + 2 * \mu - 1) * p2)/(1 - x^2)$ 
                 {derivada do polinômio de Gegenbauer no ponto  $x$ , por (2.153)}
37          $x1 \leftarrow x$  {método de Newton para calcular os zeros}
38          $x \leftarrow x1 - (p1/pp)$ 
39         se  $|x - x1| < 10^{-15}$  então interrompa
40         fim se
41     fim repita
42      $X(i) \leftarrow x$ 
43      $X(r + 1 - i) \leftarrow -x$ 
44      $H(i) \leftarrow 4 * \pi * \Gamma(r + 2 * \mu)/(2^{(2 * \mu)} * r! * \Gamma^2(\mu) * (1 - x^2) * pp^2)$  {(4.71)}
45      $H(r + 1 - i) \leftarrow H(i)$ 
46 fim para
fim algoritmo

```

Figura 16: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Gegenbauer.

## 5.2 Transferência de intervalos

Nesta seção mostra-se que as quadraturas de Gauss com função peso do tipo de Jacobi e de Laguerre podem ser utilizadas para o cálculo de integrais em intervalos  $[c, d]$  e  $[c, \infty)$ , respectivamente. A Tabela 1 mostra as integrais e os respectivos intervalos nos quais as quadraturas de Gauss são utilizadas e a Tabela 2 mostra o erro  $E_{r,g}$  nestes casos. Sem perda de generalidade, as tabelas apresentam todas as quadraturas de Gauss na variável  $t$  com integrando  $w(t)g(t)$ , sendo  $w(t)$  a função peso.

### 5.2.1 Quadraturas de Gauss no intervalo $[c, d]$

A integral  $\int_c^d (d-t)^\alpha (t-c)^\beta g(t) dt$ , com  $\alpha, \beta > -1$ , pode ser transformada em uma integral no intervalo  $[-1, 1]$  utilizando a mudança de variáveis (Figura 17), onde

$$t = \frac{(d-c)x + c + d}{2} \iff x = \frac{2t - c - d}{d - c},$$

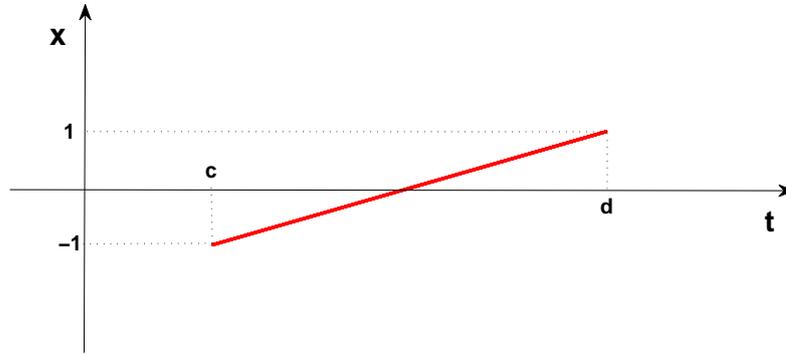


Figura 17: Transferência do intervalo  $[c, d]$  para  $[-1, 1]$  onde  $x = \frac{2t - c - d}{d - c}$ .

do seguinte modo:

$$\int_c^d (d-t)^\alpha (t-c)^\beta g(t) dt = \left(\frac{d-c}{2}\right)^{\alpha+\beta+1} \int_{-1}^1 (1-x)^\alpha (1+x)^\beta f(x) dx, \quad (5.1)$$

com  $f(x) = g\left(\frac{(d-c)x + c + d}{2}\right)$ , desde que

$$(d-t)^\alpha = \left(d - \frac{(d-c)x + c + d}{2}\right)^\alpha = \left(\frac{d-c - (d-c)x}{2}\right)^\alpha = \left(\frac{d-c}{2}\right)^\alpha (1-x)^\alpha,$$

$$(t-c)^\beta = \left(\frac{(d-c)x + c + d}{2} - c\right)^\beta = \left(\frac{d-c + (d-c)x}{2}\right)^\beta = \left(\frac{d-c}{2}\right)^\beta (1+x)^\beta,$$

$$dt = \frac{(d-c)}{2} dx.$$

Tomando  $\alpha$  e  $\beta$  iguais a 0,  $-\frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{2}$  e  $\mu - \frac{1}{2}$ , com  $\mu > -\frac{1}{2}$  e  $\mu \neq 0$ , na equação (5.1), obtém-se, respectivamente,

$$\int_c^d g(t) dt = \frac{(d-c)}{2} \int_{-1}^1 f(x) dx, \quad (5.2)$$

$$\int_c^d \frac{1}{\sqrt{(d-t)(t-c)}} g(t) dt = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) dx, \quad (5.3)$$

$$\int_c^d \sqrt{(d-t)(t-c)} g(t) dt = \left(\frac{d-c}{2}\right)^2 \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} f(x) dx, \quad (5.4)$$

$$\int_c^d [(d-t)(t-c)]^{\mu-\frac{1}{2}} g(t) dt = \left(\frac{d-c}{2}\right)^{2\mu} \int_{-1}^1 (1-x^2)^{\mu-\frac{1}{2}} f(x) dx, \quad (5.5)$$

com  $f(x) = g\left(\frac{(d-c)x + c + d}{2}\right)$ . As equações (5.1) a (5.5) mostram que algumas integrais em  $[c, d]$  podem ser transformadas em integrais das quadraturas de Gauss-Jacobi, Gauss-Legendre, Gauss-Chebyshev de 1ª e 2ª espécies e Gauss-Gegenbauer, a menos de constantes, respectivamente. Ou seja, estas quadraturas são utilizadas para o cálculo de integrais da forma  $\int_c^d w(t)g(t) dt$ , levando a uma generalização destas quadraturas quanto à função peso e ao intervalo de integração, como mostra a Tabela 1, na qual o intervalo é  $[c, d]$ .

Tabela 1: Quadraturas de Gauss.

Intervalo	Integral	Quadratura
[c, d]	$\int_c^d g(t) dt$	Gauss-Legendre
	$\int_c^d (d-t)^\alpha (t-c)^\beta g(t) dt, \alpha, \beta > -1$	Gauss-Jacobi
	$\int_c^d \frac{1}{\sqrt{(d-t)(t-c)}} g(t) dt$	Gauss-Chebyshev de 1ª espécie
	$\int_c^d \sqrt{(d-t)(t-c)} g(t) dt$	Gauss-Chebyshev de 2ª espécie
	$\int_c^d [(d-t)(t-c)]^{\mu-\frac{1}{2}} g(t) dt, \mu > -\frac{1}{2}, \mu \neq 0$	Gauss-Gegenbauer
[0, $\infty$ )	$\int_0^\infty e^{-t} t^\alpha g(t) dt, \alpha > -1$	Gauss-Laguerre generalizada
[c, $\infty$ )	$\int_c^\infty e^{-t} g(t) dt$	Gauss-Laguerre
$(-\infty, \infty)$	$\int_{-\infty}^\infty e^{-t^2} g(t) dt$	Gauss-Hermite

Observando que

$$f'(x) = \frac{d}{dx} f(x) = \frac{dt}{dx} \frac{d}{dt} g(t) = \frac{d-c}{2} g'(t),$$

então

$$f^{(2r)}(x) = \left(\frac{d-c}{2}\right)^{2r} g^{(2r)}(t). \quad (5.6)$$

Notando a igualdade (5.6) nas fórmulas de erro das quadraturas de intervalo  $[-1, 1]$ : (4.17), (4.40), (4.50), (4.59) e (4.70), obtém-se as fórmulas de erro  $E_{r,g}$  para o intervalo  $[c, d]$ , como mostra a Tabela 2.

Tabela 2: Erro  $E_{r,g}$  das quadraturas de Gauss.

Quadratura	$E_{r,g}$
Gauss-Legendre	$\frac{(d-c)^{2r+1}(r!)^4}{(2r+1)[(2r)!]^3} g^{(2r)}(\tau), \tau \in (c, d)$
Gauss-Laguerre generalizada	$\frac{r!\Gamma(\alpha+r+1)}{(2r)!} g^{(2r)}(\tau), \tau \in (0, \infty)$
Gauss-Laguerre	$\frac{(r!)^2}{e^c(2r)!} g^{(2r)}(\tau), \tau \in (c, \infty)$
Gauss-Hermite	$\frac{r!\sqrt{\pi}}{2^r} \frac{g^{(2r)}(\tau)}{(2r)!}, \tau \in (-\infty, \infty)$
Gauss-Jacobi	$\frac{(d-c)^{2r+\alpha+\beta+1} r! \Gamma(r+\alpha+1)\Gamma(r+\beta+1)\Gamma(r+\alpha+\beta+1)}{(2r)! (2r+\alpha+\beta+1)[\Gamma(2r+\alpha+\beta+1)]^2} g^{(2r)}(\tau), \tau \in (c, d)$
Gauss-Chebyshev de 1ª espécie	$\frac{2\pi(d-c)^{2r}}{2^{4r}(2r)!} g^{(2r)}(\tau), \tau \in (c, d)$
Gauss-Chebyshev de 2ª espécie	$\frac{\pi(d-c)^{2r+2}}{2^{4r+3}} \frac{g^{(2r)}(\tau)}{(2r)!}, \tau \in (c, d)$
Gauss-Gegenbauer	$\frac{(d-c)^{2r+2\mu} r! \Gamma(r+2\mu)\Gamma^2(r+\mu+\frac{1}{2})}{2(r+\mu)(2r)!\Gamma^2(2r+2\mu)} g^{(2r)}(\tau), \tau \in (c, d)$

### 5.2.2 Quadratura de Gauss no intervalo $[c, \infty)$

A integral  $\int_c^\infty e^{-t} g(t) dt$  pode ser transformada em uma integral no intervalo  $[0, \infty)$  utilizando a mudança de variáveis  $t = x + c \iff x = t - c$  (Figura 18)

do seguinte modo:

$$\int_c^\infty e^{-t} g(t) dt = e^{-c} \int_0^\infty e^{-x} f(x) dx, \quad (5.7)$$

com  $f(x) = g(x + c)$ , desde que  $e^{-t} = e^{-c} e^{-x}$  e  $dt = dx$ . A equação (5.7) mostra que uma integral em  $[c, \infty)$  pode ser transformada em uma integral da quadratura de

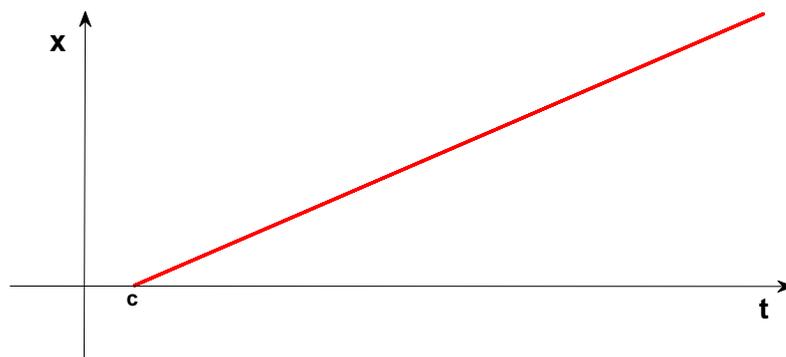


Figura 18: Transferência do intervalo  $[c, \infty)$  para  $[0, \infty)$  onde  $x = t - c$ .

Gauss-Laguerre, a menos de constante. Isto é, esta quadratura é utilizada para o cálculo de integrais da forma  $\int_c^\infty e^{-t} g(t) dt$ , generalizando o intervalo de integração de Gauss-Laguerre, como mostra a Tabela 1 na qual intervalo é  $[c, \infty)$ .

Observando que  $f'(x) = \frac{d}{dx} f(x) = \frac{dt}{dx} \frac{d}{dt} g(t) = g'(t)$ , então,

$$f^{(2r)}(x) = g^{(2r)}(t). \quad (5.8)$$

Notando a igualdade (5.8) na fórmula de erro da quadratura de Gauss-Laguerre (4.28), obtém-se a fórmula de erro  $E_{r,g}$  desta quadratura no intervalo  $[c, \infty)$  como apresenta a Tabela 2.

### 5.3 Algoritmos para integração numérica

Os algoritmos para integração numérica utilizam o cálculo dos zeros  $x_i$  e dos coeficientes  $H_i$ . As quadraturas de Gauss-Legendre, Gauss-Jacobi, Gauss-Chebyshev de 1ª e 2ª espécies e Gauss-Gegenbauer podem ser usadas para cálculos de integrais em intervalos  $[c, d]$ , assim como Gauss-Laguerre em  $[c, \infty)$ , como apresentou a Subseção 5.2. A Tabela 1 mostra as integrais e os respectivos intervalos nos quais as quadraturas de Gauss são utilizadas. Os algoritmos seguem a seguinte rotina:

1. Recebe os zeros e coeficientes;
2. Efetua o somatório da quadratura.

O parâmetro de entrada do algoritmo de integração constitui-se do número  $r$  de zeros, dos limites de integração e dos parâmetros associados ( $\alpha, \beta$  e  $\mu$ ), quando necessário. A função  $g(t)$  deve ser especificada de acordo com a linguagem de programação adotada. O parâmetro de saída é o valor da integração *integral*.

```

Algoritmo quad_legendre
{Objetivo Integrar  $w(t)g(t)$  via Gauss-Legendre}
parâmetros de entrada  $r, c$  e  $d$  {número de zeros e limites de integração}
parâmetro de saída  $integral$  {valor da integral}
início algoritmo
1   $integral \leftarrow 0$ 
2   $X \leftarrow x_i, H \leftarrow H_i, i = 1, \dots, r$  {recebe zeros e coeficientes}
3   $e1 \leftarrow (d - c)/2$ 
4   $e2 \leftarrow (d + c)/2$ 
5  para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
6       $t \leftarrow e1 * X(i) + e2$ 
7       $y \leftarrow g(t)$  {avaliar  $g(t)$ }
8       $integral \leftarrow integral + y * H(i)$ 
9  fim para
10  $integral = e1 * integral$  {(5.2)}
fim algoritmo

```

Figura 19: Algoritmo para quadratura de Gauss-Legendre.

```

Algoritmo quad_laguerre_gen
{Objetivo Integrar  $w(t)g(t)$  via Gauss-Laguerre generalizada}
parâmetros de entrada  $r$  e  $\alpha$  {número de zeros e parâmetro  $\alpha > -1$ }
parâmetro de saída  $integral$  {valor da integral}
início algoritmo
1   $integral \leftarrow 0$ 
2   $X \leftarrow x_i, H \leftarrow H_i, i = 1, \dots, r$  {recebe zeros e coeficientes}
3  para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
4       $y \leftarrow g(X(i))$  {avaliar  $g(X(i))$ }
5       $integral \leftarrow integral + y * H(i)$ 
6  fim para
fim algoritmo

```

Figura 20: Algoritmo para quadratura de Gauss-Laguerre generalizada.

```

Algoritmo quad_laguerre
{Objetivo Integrar  $w(t)g(t)$  via Gauss-Laguerre}
parâmetros de entrada  $r$  e  $c$  {número de zeros e limite inferior}
parâmetro de saída  $integral$  {valor da integral}
início algoritmo
1   $integral \leftarrow 0$ 
2   $X \leftarrow x_i, H \leftarrow H_i, i = 1, \dots, r$  {recebe zeros e coeficientes}
3  para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
4       $t \leftarrow X(i) + c$ 
5       $y \leftarrow g(t)$  {avaliar  $g(t)$ }
6       $integral \leftarrow integral + y * H(i)$ 
7  fim para
8   $integral \leftarrow e^{-c} * integral$  {(5.7)}
fim algoritmo

```

Figura 21: Algoritmo para quadratura de Gauss-Laguerre.

```

Algoritmo quad_hermite
{Objetivo Integrar  $w(t)g(t)$  via Gauss-Hermite}
parâmetro de entrada  $r$  {número de zeros}
parâmetro de saída  $integral$  {valor da integral}
início algoritmo
1    $integral \leftarrow 0$ 
2    $X \leftarrow x_i, H \leftarrow H_i, i = 1, \dots, r$  {recebe zeros e coeficientes}
3   para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
4        $y \leftarrow g(X(i))$  {avaliar  $g(X(i))$ }
5        $integral \leftarrow integral + y * H(i)$ 
6   fim para
fim algoritmo

```

Figura 22: Algoritmo para quadratura de Gauss-Hermite.

```

Algoritmo quad_jacobi
{Objetivo Integrar  $w(t)g(t)$  via Gauss-Jacobi}
parâmetros de entrada  $r, \alpha, \beta, c$  e  $d$  {número de zeros, parâmetros  $\alpha, \beta > -1$  e limites de integração}
parâmetro de saída  $integral$  {valor da integral}
início algoritmo
1    $integral \leftarrow 0$ 
2    $X \leftarrow x_i, H \leftarrow H_i, i = 1, \dots, r$  {recebe zeros e coeficientes}
3    $e1 \leftarrow (d - c)/2$ 
4    $e2 \leftarrow (d + c)/2$ 
5   para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
6        $t \leftarrow e1 * X(i) + e2$ 
7        $y \leftarrow g(t)$  {avaliar  $g(t)$ }
8        $integral \leftarrow integral + y * H(i)$ 
9   fim para
10   $integral = e1^{(\alpha+\beta+1)} * integral$  {(5.1)}
fim algoritmo

```

Figura 23: Algoritmo para quadratura de Gauss-Jacobi.

```

Algoritmo quad_chebyshev_1
{Objetivo Integrar  $w(t)g(t)$  via Gauss-Chebyshev de 1ª espécie}
parâmetros de entrada  $r, c$  e  $d$  {número de zeros e limites de integração}
parâmetros de saída  $integral$  {valor da integral}
início algoritmo
1    $integral \leftarrow 0$ 
2    $X \leftarrow x_i, H \leftarrow H_i, i = 1, \dots, r$  {recebe zeros e coeficientes}
3    $e1 \leftarrow (d - c)/2$ 
4    $e2 \leftarrow (d + c)/2$ 
5   para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
6        $t \leftarrow e1 * X(i) + e2$ 
7        $y \leftarrow g(t)$  {avaliar  $g(t)$ }
8        $integral \leftarrow integral + y * H(i)$  {(5.3)}
9   fim para
fim algoritmo

```

Figura 24: Algoritmo para quadratura de Gauss-Chebyshev de 1ª espécie.

```

Algoritmo quad_chebyshev_2
{Objetivo Integrar  $w(t)g(t)$  via Gauss-Chebyshev de 2ª espécie}
parâmetros de entrada  $r, c$  e  $d$  {número de zeros e limites de integração}
parâmetros de saída  $integral$  {valor da integral}
início algoritmo
1    $integral \leftarrow 0$ 
2    $X \leftarrow x_i, H \leftarrow H_i, i = 1, \dots, r$  {recebe zeros e coeficientes}
3    $e1 \leftarrow (d - c)/2$ 
4    $e2 \leftarrow (d + c)/2$ 
5   para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
6      $t \leftarrow e1 * X(i) + e2$ 
7      $y \leftarrow g(t)$  {avaliar  $g(t)$ }
8      $integral \leftarrow integral + y * H(i)$ 
9   fim para
10   $integral \leftarrow e1^2 * integral$  {(5.4)}
fim algoritmo

```

Figura 25: Algoritmo para quadratura de Gauss-Chebyshev de 2ª espécie.

```

Algoritmo quad_gegenbauer
{Objetivo Integrar  $w(t)g(t)$  via Gauss-Gegenbauer}
parâmetros de entrada  $r, \mu, c$  e  $d$  {número de zeros, parâmetro  $\mu > -\frac{1}{2}, \mu \neq 0$ 
e limites de integração}
parâmetros de saída  $integral$  {valor da integral}
início algoritmo
1    $integral \leftarrow 0$ 
2    $X \leftarrow x_i, H \leftarrow H_i, i = 1, \dots, r$  {recebe zeros e coeficientes}
3    $e1 \leftarrow (d - c)/2$ 
4    $e2 \leftarrow (d + c)/2$ 
5   para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
6      $t \leftarrow e1 * X(i) + e2$ 
7      $y \leftarrow g(t)$  {avaliar  $g(t)$ }
8      $integral \leftarrow integral + y * H(i)$ 
9   fim para
10   $integral \leftarrow e1^{(2*\mu)} * integral$  {(5.5)}
fim algoritmo

```

Figura 26: Algoritmo para quadratura de Gauss-Gegenbauer.

## 5.4 Implementações

Com a finalidade de validar os algoritmos para  $x_i$  e  $H_i$  da Seção 5.1 e os algoritmos para integração da Seção 5.3, são apresentados os resultados de implementações para integrais tais como aquelas descritas na Tabela 1, para vários valores de  $r$ . É necessário ressaltar que a escolha da função  $g(t)$  estará condicionada à resolução analítica da integral que será efetuada para fins de comparação com o resultado numérico da quadratura *integral*. O erro relativo *erro* também é exibido. O parâmetro *tempo(s)* é o tempo médio, em segundos, demandado na execução de um determinado  $r$ . Este parâmetro é calculado pela média aritmética dos tempos de 3000 execuções do algoritmo (para  $2 \leq r \leq 100$ ) e de 10 execuções para  $r \geq 500$ . O processador utilizado em todos experimentos realizados ao longo deste trabalho é Intel® Core™ 2 Duo.

### 5.4.1 Algumas considerações sobre o erro

Os resultados das implementações são comparados com o resultado analítico por meio do erro relativo:

$$\text{erro relativo} = \frac{|\text{resultado analítico} - \text{resultado da quadratura}|}{|\text{resultado analítico}|}.$$

A preferência do erro relativo sobre o erro absoluto

$$\text{erro absoluto} = |\text{resultado analítico} - \text{resultado da quadratura}|$$

se justifica na independência da magnitude dos resultados, diferentemente do erro absoluto que pode não ser significativo caso os resultados sejam maiores do que 1.

Na prática, realizando uma aproximação com o uso de computadores, surgem os erros cometidos pelo truncamento e pelo arredondamento. O erro de truncamento ocorre devido à aproximação de uma fórmula por outra, pois, para avaliar uma função matemática no computador, somente operações aritméticas e lógicas podem ser requeridas, por serem operações que ele é capaz de efetuar. Deste modo, para avaliar uma função como  $\text{sen}(x)$ , o computador usa uma série finita envolvendo apenas as operações aritméticas, enquanto que, o valor exato é dado pela série infinita, levando a um truncamento. O erro de arredondamento ocorre porque um número na base decimal, para o computador, é representado na base binária sendo armazenado em um número finito de *bits*. Neste caso, as operações pelo computador são realizadas nesta base tendo em vista a limitação do número de *bits* gerando os arredondamentos (Campos, 2007).

Contudo, fica claro que em todas as implementações dos algoritmos deste trabalho, o

erro calculado nas aproximações é o erro  $E_{r,g}$  da quadratura que, por sua vez, é influenciado pelos erros de truncamento e arredondamento.

### 5.4.2 Gauss-Legendre

A quadratura de Gauss-Legendre calcula integrais da forma  $\int_c^d g(t) dt$ . Os experimentos são

$$(i) \int_0^{2\pi} t \operatorname{sen}(t) dt, \quad (ii) \int_0^{2\pi} t \operatorname{sen}(15t) dt.$$

Implementa-se o algoritmo da Figura 19 para vários valores de  $r$ ,  $c = 0$  e  $d = 2\pi$  com  $g(t) = t \operatorname{sen}(t)$  e  $g(t) = t \operatorname{sen}(15t)$ , respectivamente. As resoluções analíticas são

$$(i) \int_0^{2\pi} t \operatorname{sen}(t) dt = (\operatorname{sen}(t) - t \cos(t)) \Big|_0^{2\pi} = -2\pi \approx -6,283185307179586,$$

$$(ii) \int_0^{2\pi} t \operatorname{sen}(15t) dt = \left( \frac{\operatorname{sen}(15t)}{225} - \frac{t \cos(15t)}{15} \right) \Big|_0^{2\pi} = -\frac{2\pi}{15} \approx -0,418879020478639.$$

Os resultados das implementações acompanhados dos respectivos gráficos dos integrandos estão nas Figuras 27 e 28.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	-11,061607516437542	$4,778 \times 10^0$	$2,756 \times 10^{-4}$
4	-6,333516813159698	$5,033 \times 10^{-2}$	$4,368 \times 10^{-4}$
8	-6,283185315806970	$8,627 \times 10^{-9}$	$7,956 \times 10^{-4}$
12	-6,283185307179582	$4,441 \times 10^{-15}$	$1,201 \times 10^{-3}$
16	-6,283185307179588	$1,776 \times 10^{-15}$	$1,524 \times 10^{-3}$
24	-6,283185307179582	$4,441 \times 10^{-15}$	$2,257 \times 10^{-3}$
32	-6,283185307179583	$3,553 \times 10^{-15}$	$2,990 \times 10^{-3}$
40	-6,283185307179584	$2,665 \times 10^{-15}$	$3,739 \times 10^{-3}$
50	-6,283185307179585	$1,776 \times 10^{-15}$	$4,732 \times 10^{-3}$
64	-6,283185307179585	$1,776 \times 10^{-15}$	$6,006 \times 10^{-3}$
100	-6,283185307179588	$1,776 \times 10^{-15}$	$9,558 \times 10^{-3}$

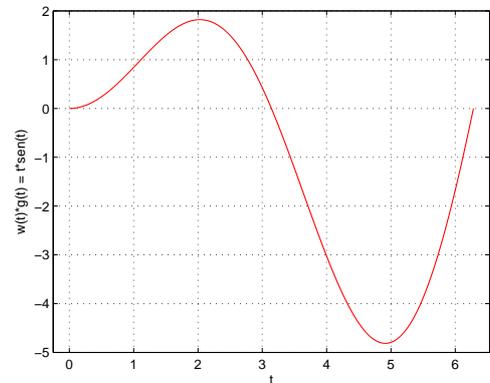


Figura 27:  $\int_0^{2\pi} t \operatorname{sen}(t) dt$  via Gauss-Legendre.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	-9,982389445556954	$9,564 \times 10^0$	$3,380 \times 10^{-4}$
4	-0,174884867026902	$2,440 \times 10^{-1}$	$5,408 \times 10^{-4}$
8	-1,040354978844508	$6,215 \times 10^{-1}$	$9,932 \times 10^{-4}$
12	4,176084918712063	$4,595 \times 10^0$	$1,492 \times 10^{-3}$
16	1,126806236160534	$1,546 \times 10^0$	$1,908 \times 10^{-3}$
24	-1,926958102526059	$1,508 \times 10^0$	$2,829 \times 10^{-3}$
32	-0,419056065363738	$1,770 \times 10^{-4}$	$3,754 \times 10^{-3}$
40	-0,418879020508601	$2,996 \times 10^{-11}$	$4,690 \times 10^{-3}$
50	-0,418879020478643	$3,941 \times 10^{-15}$	$5,933 \times 10^{-3}$
64	-0,418879020478638	$8,327 \times 10^{-16}$	$7,524 \times 10^{-3}$
100	-0,418879020478624	$1,499 \times 10^{-14}$	$1,199 \times 10^{-2}$

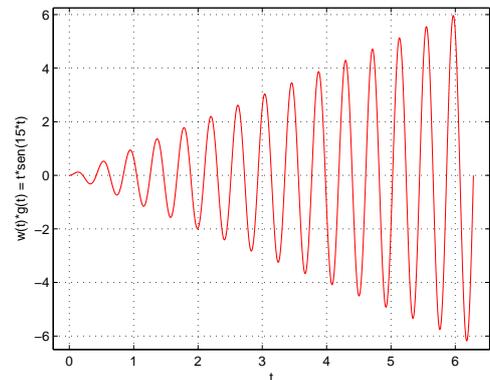


Figura 28:  $\int_0^{2\pi} t \operatorname{sen}(15t) dt$  via Gauss-Legendre.

### 5.4.3 Gauss-Laguerre generalizada

Esta quadratura calcula integrais da forma  $\int_0^\infty e^{-t} t^\alpha g(t) dt$ ,  $\alpha > -1$ . Os experimentos para este caso são

$$(i) \int_0^\infty e^{-t} t \operatorname{sen}(t) dt, \quad (ii) \int_0^\infty e^{-t} t \operatorname{sen}(3t) dt.$$

O algoritmo da Figura 20 é implementado para vários valores de  $r$  e  $\alpha = 1$  com  $g(t) = \operatorname{sen}(t)$  e  $g(t) = \operatorname{sen}(3t)$ , respectivamente. As resoluções analíticas são

$$(i) \int_0^\infty e^{-t} t \operatorname{sen}(t) dt = -\frac{1}{2} e^{-t} (t \cos(t) + \cos(t) + t \operatorname{sen}(t)) \Big|_0^\infty = \frac{1}{2} = 0,5,$$

$$(ii) \int_0^\infty e^{-t} t \operatorname{sen}(3t) dt = -\frac{1}{50} e^{-t} (15t \cos(3t) + 3 \cos(3t) + 5t \operatorname{sen}(3t) - 4 \operatorname{sen}(3t)) \Big|_0^\infty,$$

$$(ii) \int_0^\infty e^{-t} t \operatorname{sen}(3t) dt = \frac{3}{50} = 0,06.$$

Os resultados das implementações acompanhados dos respectivos gráficos dos integrandos estão nas Figuras 29 e 30.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	0,541499482284950	$4,150 \times 10^{-2}$	$2,912 \times 10^{-4}$
4	0,519921378126607	$1,992 \times 10^{-2}$	$4,472 \times 10^{-4}$
8	0,499954172469353	$4,583 \times 10^{-5}$	$8,216 \times 10^{-4}$
12	0,499999993121657	$6,878 \times 10^{-9}$	$1,196 \times 10^{-3}$
16	0,500000000339152	$3,392 \times 10^{-10}$	$1,638 \times 10^{-3}$
24	0,500000000000003	$3,109 \times 10^{-15}$	$2,579 \times 10^{-3}$
32	0,500000000000000	$3,886 \times 10^{-16}$	$3,619 \times 10^{-3}$
40	0,500000000000000	$4,441 \times 10^{-16}$	$5,044 \times 10^{-3}$
50	0,500000000000000	$0,000 \times 10^0$	$6,422 \times 10^{-3}$
64	0,499999999999999	$5,551 \times 10^{-16}$	$1,000 \times 10^{-2}$
100	0,499999999999999	$7,772 \times 10^{-16}$	$1,999 \times 10^{-2}$

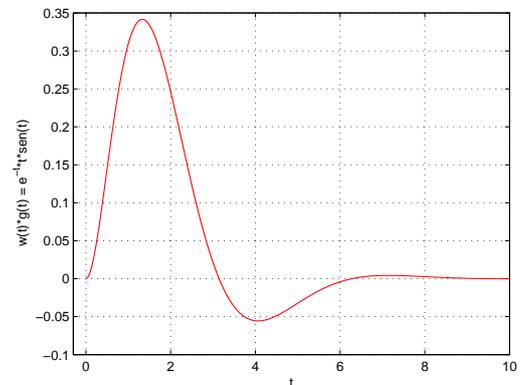


Figura 29:  $\int_0^\infty e^{-t} t \operatorname{sen}(t) dt$  via Gauss-Laguerre generalizada.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	-0,273996367128327	$3,340 \times 10^{-1}$	$3,276 \times 10^{-4}$
4	0,753697292524765	$6,937 \times 10^{-1}$	$5,252 \times 10^{-4}$
8	-0,035688078760915	$9,569 \times 10^{-2}$	$9,880 \times 10^{-4}$
12	-0,102560149593333	$1,626 \times 10^{-1}$	$1,503 \times 10^{-3}$
16	0,072914023437567	$1,291 \times 10^{-2}$	$1,997 \times 10^{-3}$
24	0,058739191643045	$1,261 \times 10^{-3}$	$3,104 \times 10^{-3}$
32	0,060106240548962	$1,062 \times 10^{-4}$	$4,326 \times 10^{-3}$
40	0,059991795934407	$8,204 \times 10^{-6}$	$5,949 \times 10^{-3}$
50	0,059999020545767	$9,795 \times 10^{-7}$	$7,613 \times 10^{-3}$
64	0,060000002824856	$2,825 \times 10^{-9}$	$1,143 \times 10^{-2}$
100	0,060000000000031	$3,068 \times 10^{-14}$	$2,273 \times 10^{-2}$

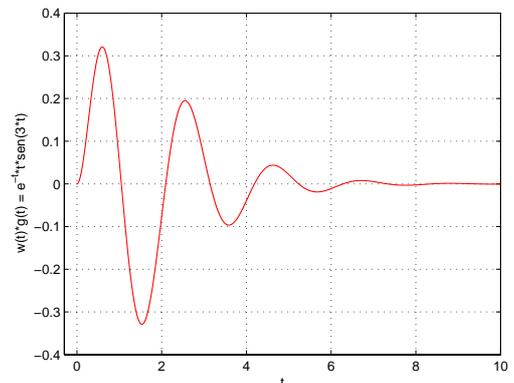


Figura 30:  $\int_0^\infty e^{-t} t \operatorname{sen}(3t) dt$  via Gauss-Laguerre generalizada.

### 5.4.4 Gauss-Laguerre

As integrais para esta quadratura são da forma  $\int_c^\infty e^{-t} g(t) dt$ . Os experimentos são

$$(i) \int_\pi^\infty e^{-t} \cos(t) dt, \quad (ii) \int_\pi^\infty e^{-t} \cos(3t) dt.$$

Implementa-se o algoritmo da Figura 21 para vários valores de  $r$  e  $c = \pi$ , sendo  $g(t) = \cos(t)$  e  $g(t) = \cos(3t)$ , respectivamente. As resoluções analíticas são

$$(i) \int_\pi^\infty e^{-t} \cos(t) dt = \frac{e^{-t}}{2} (\sin(t) - \cos(t)) \Big|_\pi^\infty = -\frac{1}{2e^\pi} \approx -0,021606959131886,$$

$$(ii) \int_\pi^\infty e^{-t} \cos(3t) dt = \frac{e^{-t}}{10} (\cos(3t) - 3\sin(3t)) \Big|_\pi^\infty = -\frac{1}{10e^\pi} \approx -0,004321391826377.$$

Os resultados das implementações acompanhados dos respectivos gráficos dos integrandos estão nas Figuras 31 e 32.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	-0,024640955052807	$3,034 \times 10^{-3}$	$2,340 \times 10^{-4}$
4	-0,021714721915837	$1,078 \times 10^{-4}$	$3,848 \times 10^{-4}$
8	-0,021607011259739	$5,213 \times 10^{-8}$	$7,176 \times 10^{-4}$
12	-0,021606958489553	$6,423 \times 10^{-10}$	$1,108 \times 10^{-3}$
16	-0,021606959133696	$1,810 \times 10^{-12}$	$1,404 \times 10^{-3}$
24	-0,021606959131886	$6,245 \times 10^{-17}$	$2,101 \times 10^{-3}$
32	-0,021606959131886	$8,674 \times 10^{-17}$	$2,834 \times 10^{-3}$
40	-0,021606959131886	$1,735 \times 10^{-16}$	$3,583 \times 10^{-3}$
50	-0,021606959131886	$6,939 \times 10^{-17}$	$5,018 \times 10^{-3}$
64	-0,021606959131886	$2,325 \times 10^{-16}$	$6,089 \times 10^{-3}$
100	-0,021606959131886	$1,665 \times 10^{-16}$	$1,092 \times 10^{-2}$

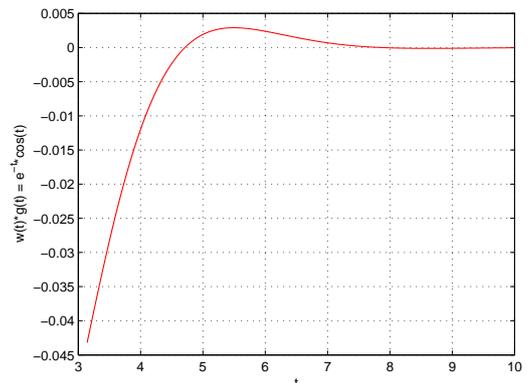


Figura 31:  $\int_\pi^\infty e^{-t} \cos(t) dt$  via Gauss-Laguerre.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	0,011168936341233	$1,549 \times 10^{-2}$	$2,860 \times 10^{-4}$
4	-0,023347450107100	$1,903 \times 10^{-2}$	$4,836 \times 10^{-4}$
8	-0,005568706069011	$1,247 \times 10^{-3}$	$8,892 \times 10^{-4}$
12	-0,002570531115081	$1,751 \times 10^{-3}$	$1,362 \times 10^{-3}$
16	-0,004233010447646	$8,838 \times 10^{-5}$	$1,742 \times 10^{-3}$
24	-0,004326659715571	$5,268 \times 10^{-6}$	$2,584 \times 10^{-3}$
32	-0,004321099539422	$2,923 \times 10^{-7}$	$3,484 \times 10^{-3}$
40	-0,004321407335112	$1,551 \times 10^{-8}$	$4,420 \times 10^{-3}$
50	-0,004321389932670	$1,894 \times 10^{-9}$	$6,011 \times 10^{-3}$
64	-0,004321391824483	$1,894 \times 10^{-12}$	$7,394 \times 10^{-3}$
100	-0,004321391826377	$3,123 \times 10^{-17}$	$1,277 \times 10^{-2}$

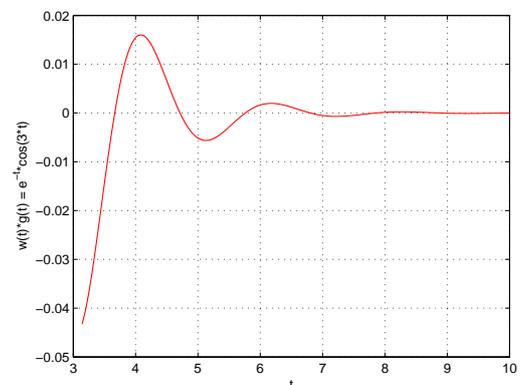


Figura 32:  $\int_\pi^\infty e^{-t} \cos(3t) dt$  via Gauss-Laguerre.

### 5.4.5 Gauss-Hermite

Nesta quadratura as integrais são do tipo  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} g(t) dt$ . Os experimentos são

$$(i) \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^3(t) dt, \quad (ii) \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^4(t) dt.$$

Implementa-se o algoritmo da Figura 22 com  $g(t) = e^{t^2} \operatorname{sech}^3(t)$  e  $g(t) = e^{t^2} \operatorname{sech}^4(t)$  para vários valores de  $r$ , respectivamente. As resoluções analíticas são

$$(i) \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^3(t) dt = \left( \frac{\sinh(t)}{2 \cosh^2(t)} + \arctan(e^t) \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} = \frac{\pi}{2} \approx 1,570796326794897,$$

$$(ii) \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^4(t) dt = \left( \frac{\sinh(t)}{3 \cosh^3(t)} + \frac{2 \sinh(t)}{3 \cosh(t)} \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} = \frac{4}{3} \approx 1,3333333333333333.$$

Os resultados das implementações acompanhados dos respectivos gráficos dos integrandos estão nas Figuras 33 e 34.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	1,458809914545095	$1,120 \times 10^{-1}$	$4,888 \times 10^{-4}$
4	1,553681762799978	$1,711 \times 10^{-2}$	$8,476 \times 10^{-4}$
8	1,569877940077360	$9,184 \times 10^{-4}$	$1,596 \times 10^{-3}$
12	1,570710842814076	$8,548 \times 10^{-5}$	$2,527 \times 10^{-3}$
16	1,570785436484143	$1,089 \times 10^{-5}$	$3,115 \times 10^{-3}$
24	1,570796011694501	$3,151 \times 10^{-7}$	$4,607 \times 10^{-3}$
32	1,570796311844880	$1,495 \times 10^{-8}$	$6,131 \times 10^{-3}$
40	1,570796325810249	$9,846 \times 10^{-10}$	$7,639 \times 10^{-3}$
50	1,570796326749253	$4,564 \times 10^{-11}$	$1,005 \times 10^{-2}$
64	1,570796326793932	$9,643 \times 10^{-13}$	$1,223 \times 10^{-2}$
100	1,570796326794895	$1,332 \times 10^{-15}$	$1,972 \times 10^{-2}$

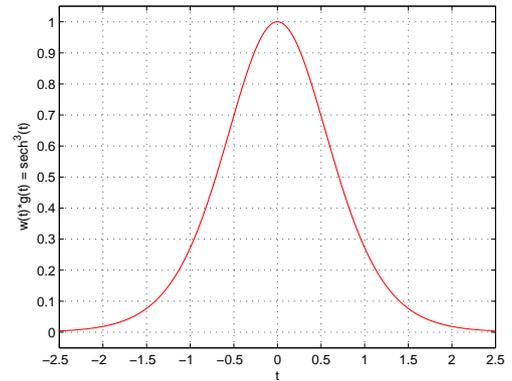


Figura 33:  $\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^3(t) dt$  via Gauss-Hermite.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	1,157242076523935	$1,761 \times 10^{-1}$	$4,888 \times 10^{-4}$
4	1,298181249968242	$3,515 \times 10^{-2}$	$8,372 \times 10^{-4}$
8	1,330782129703722	$2,551 \times 10^{-3}$	$1,596 \times 10^{-3}$
12	1,333047147655743	$2,862 \times 10^{-4}$	$2,538 \times 10^{-3}$
16	1,333291591344918	$4,174 \times 10^{-5}$	$3,115 \times 10^{-3}$
24	1,333331867429140	$1,466 \times 10^{-6}$	$4,618 \times 10^{-3}$
32	1,333333253410583	$7,992 \times 10^{-8}$	$6,136 \times 10^{-3}$
40	1,33333327466142	$5,867 \times 10^{-9}$	$7,670 \times 10^{-3}$
50	1,33333330300054	$3,033 \times 10^{-10}$	$1,019 \times 10^{-2}$
64	1,3333333326102	$7,231 \times 10^{-12}$	$1,226 \times 10^{-2}$
100	1,33333333333331	$2,665 \times 10^{-15}$	$2,032 \times 10^{-2}$

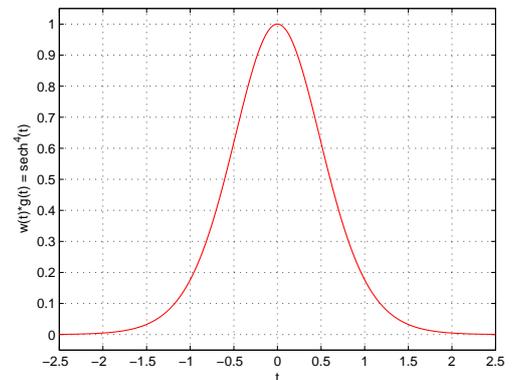


Figura 34:  $\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^4(t) dt$  via Gauss-Hermite.

### 5.4.6 Gauss-Jacobi

A quadratura de Gauss-Jacobi calcula integrais da forma  $\int_c^d (d-t)^\alpha (t-c)^\beta g(t) dt$ , com  $\alpha > -1$  e  $\beta > -1$ . Os experimentos são

$$(i) \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt, \quad (ii) \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt.$$

Implementa-se o algoritmo da Figura 23 com vários valores de  $r$ ,  $\alpha = -\frac{1}{2}$ ,  $\beta = 0$ ,  $c = 0$  e  $d = \frac{1}{2}$ , com  $g(t) = t^{\frac{5}{2}}$  e  $g(t) = t^{\frac{7}{2}}$ , respectivamente. As resoluções analíticas são

$$(i) \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt = \left( \frac{5 \arcsen(\sqrt{2t})}{64} - \sqrt{\frac{1}{2}-t} \left( \frac{t^{\frac{5}{2}}}{6} + \frac{5t^{\frac{3}{2}}}{48} + \frac{5t^{\frac{1}{2}}}{64} \right) \right) \Big|_0^{\frac{1}{2}} = \frac{5\pi}{128} \approx 0,122718463030851,$$

$$(ii) \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt = \left( \frac{35 \arcsen(\sqrt{2t})}{1024} - \sqrt{\frac{1}{2}-t} \left( \frac{t^{\frac{7}{2}}}{8} + \frac{7t^{\frac{5}{2}}}{96} + \frac{35t^{\frac{3}{2}}}{768} + \frac{35t^{\frac{1}{2}}}{1024} \right) \right) \Big|_0^{\frac{1}{2}},$$

$$(ii) \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt = \frac{35\pi}{2048} \approx 0,053689327575997.$$

Os resultados das implementações juntamente com os respectivos gráficos dos integrandos estão nas Figuras 35 e 36.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	0,122881316773058	$1,629 \times 10^{-4}$	$4,732 \times 10^{-4}$
4	0,122719447861938	$9,848 \times 10^{-7}$	$7,748 \times 10^{-4}$
8	0,122718471173918	$8,143 \times 10^{-9}$	$1,435 \times 10^{-3}$
12	0,122718463528064	$4,972 \times 10^{-10}$	$2,257 \times 10^{-3}$
24	0,122718463034952	$4,101 \times 10^{-12}$	$4,098 \times 10^{-3}$
32	0,122718463031409	$5,577 \times 10^{-13}$	$5,470 \times 10^{-3}$
40	0,122718463030970	$1,189 \times 10^{-13}$	$6,817 \times 10^{-3}$
50	0,122718463030876	$2,502 \times 10^{-14}$	$8,554 \times 10^{-3}$
64	0,122718463030859	$8,188 \times 10^{-15}$	$1,097 \times 10^{-2}$
100	0,122718463030851	$2,914 \times 10^{-16}$	$1,745 \times 10^{-2}$

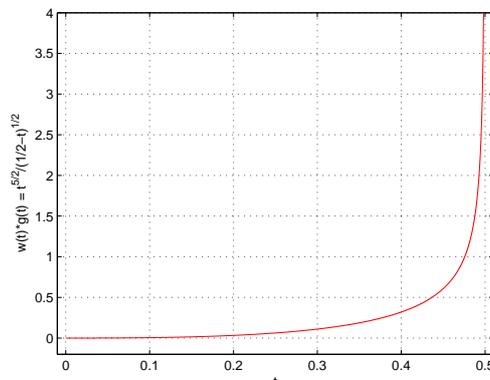


Figura 35:  $\int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt$  via Gauss-Jacobi.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	0,053414684971013	$2,746 \times 10^{-4}$	$4,628 \times 10^{-4}$
4	0,053689202115370	$1,255 \times 10^{-7}$	$7,852 \times 10^{-4}$
8	0,053689327348302	$2,277 \times 10^{-10}$	$1,446 \times 10^{-3}$
12	0,053689327569900	$6,098 \times 10^{-12}$	$2,231 \times 10^{-3}$
16	0,053689327575528	$4,691 \times 10^{-13}$	$2,777 \times 10^{-3}$
24	0,053689327575985	$1,259 \times 10^{-14}$	$4,118 \times 10^{-3}$
32	0,053689327575997	$1,735 \times 10^{-16}$	$5,491 \times 10^{-3}$
40	0,053689327575998	$4,302 \times 10^{-16}$	$6,874 \times 10^{-3}$
50	0,053689327575997	$3,469 \times 10^{-17}$	$8,585 \times 10^{-3}$
64	0,053689327575999	$1,686 \times 10^{-15}$	$1,104 \times 10^{-2}$
100	0,053689327575997	$2,290 \times 10^{-16}$	$1,758 \times 10^{-2}$

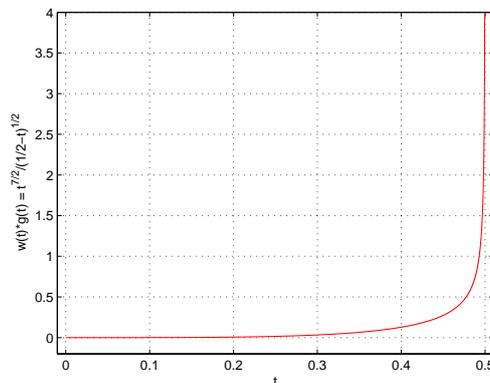


Figura 36:  $\int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt$  via Gauss-Jacobi.

### 5.4.7 Gauss-Chebyshev de 1ª espécie

Esta quadratura calcula integrais da forma  $\int_c^d \frac{1}{\sqrt{(d-t)(t-c)}} g(t) dt$ . Os experimentos são

$$(i) \int_0^1 \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{(1-t)t}} dt, \quad (ii) \int_0^1 \frac{t^{\frac{9}{2}}}{\sqrt{(1-t)t}} dt.$$

O algoritmo da Figura 24 é implementado para vários valores de  $r$ ,  $c = 0$  e  $d = 1$  com  $g(t) = t^{\frac{7}{2}}$  e  $g(t) = t^{\frac{9}{2}}$ , respectivamente. As resoluções analíticas são

$$(i) \int_0^1 \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{(1-t)t}} dt = -\frac{2}{35} (5t^3 + 6t^2 + 8t + 16)\sqrt{1-t} \Big|_0^1 = \frac{32}{35} \approx 0,914285714285714,$$

$$(ii) \int_0^1 \frac{t^{\frac{9}{2}}}{\sqrt{(1-t)t}} dt = -\frac{2}{315} (35t^4 + 40t^3 + 48t^2 + 64t + 128)\sqrt{1-t} \Big|_0^1 = \frac{256}{315} \approx 0,812698412698413.$$

Os resultados das implementações juntamente com os gráficos dos integrandos estão nas Figuras 37 e 38.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	0,904346602435046	$9,939 \times 10^{-3}$	$2,444 \times 10^{-4}$
4	0,914279039765571	$6,675 \times 10^{-6}$	$4,212 \times 10^{-4}$
8	0,914285694422971	$1,986 \times 10^{-8}$	$7,852 \times 10^{-4}$
12	0,914285713546231	$7,395 \times 10^{-10}$	$1,222 \times 10^{-3}$
16	0,914285714212872	$7,284 \times 10^{-11}$	$1,518 \times 10^{-3}$
24	0,914285714282905	$2,810 \times 10^{-12}$	$2,267 \times 10^{-3}$
32	0,914285714285434	$2,802 \times 10^{-13}$	$3,000 \times 10^{-3}$
40	0,914285714285667	$4,685 \times 10^{-14}$	$3,728 \times 10^{-3}$
50	0,914285714285706	$7,772 \times 10^{-15}$	$4,753 \times 10^{-3}$
64	0,914285714285713	$1,110 \times 10^{-15}$	$5,933 \times 10^{-3}$
100	0,914285714285714	$2,220 \times 10^{-16}$	$9,490 \times 10^{-3}$

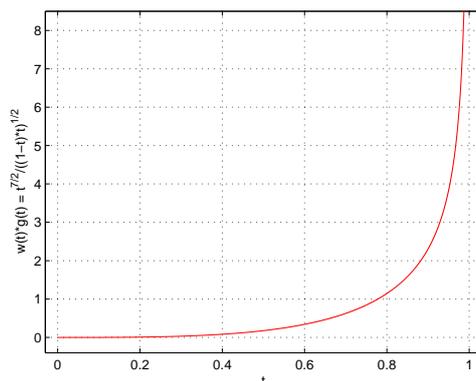


Figura 37:  $\int_0^1 \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{(1-t)t}} dt$  via Gauss-Chebyshev de 1ª espécie.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	0,770573104975677	$4,213 \times 10^{-2}$	$2,496 \times 10^{-4}$
4	0,812701165209337	$2,753 \times 10^{-6}$	$4,316 \times 10^{-4}$
8	0,812698414219070	$1,521 \times 10^{-9}$	$8,112 \times 10^{-4}$
12	0,812698412722430	$2,402 \times 10^{-11}$	$1,222 \times 10^{-3}$
16	0,812698412699723	$1,310 \times 10^{-12}$	$1,570 \times 10^{-3}$
24	0,812698412698435	$2,220 \times 10^{-14}$	$2,319 \times 10^{-3}$
32	0,812698412698414	$1,221 \times 10^{-15}$	$3,094 \times 10^{-3}$
40	0,812698412698413	$1,110 \times 10^{-16}$	$3,822 \times 10^{-3}$
50	0,812698412698413	$0,000 \times 10^0$	$4,940 \times 10^{-3}$
64	0,812698412698413	$1,110 \times 10^{-16}$	$6,100 \times 10^{-3}$
100	0,812698412698413	$1,110 \times 10^{-16}$	$9,760 \times 10^{-3}$

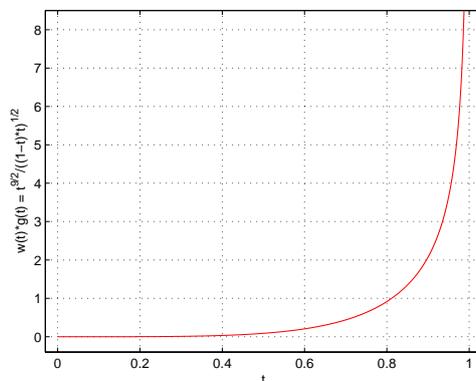


Figura 38:  $\int_0^1 \frac{t^{\frac{9}{2}}}{\sqrt{(1-t)t}} dt$  via Gauss-Chebyshev de 1ª espécie.

### 5.4.8 Gauss-Chebyshev de 2ª espécie

Esta quadratura calcula integrais da forma  $\int_c^d \sqrt{(d-t)(t-c)}g(t) dt$ . Os experimentos são

$$(i) \int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{7}{2}} dt, \quad (ii) \int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{9}{2}} dt.$$

O algoritmo da Figura 25 é implementado para vários valores de  $r$ ,  $c = 0$  e  $d = 1$ , com  $g(t) = t^{\frac{7}{2}}$  e  $g(t) = t^{\frac{9}{2}}$ , respectivamente. As resoluções analíticas são

$$(i) \int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{7}{2}} dt = -\frac{2}{3465} (315t^4 + 280t^3 + 240t^2 + 192t + 128)(1-t)^{\frac{3}{2}} \Big|_0^1,$$

$$(i) \int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{7}{2}} dt = \frac{256}{3465} \approx 0,073881673881674,$$

$$(ii) \int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{9}{2}} dt = -\frac{2}{9009} (693t^5 + 630t^4 + 560t^3 + 480t^2 + 384t + 256)(1-t)^{\frac{3}{2}} \Big|_0^1,$$

$$(ii) \int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{9}{2}} dt = \frac{512}{9009} \approx 0,056832056832057.$$

As Figuras 39 e 40 mostram os resultados das implementações além de exibir os gráficos dos integrandos.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	0,073271162674102	$6,105 \times 10^{-4}$	$2,496 \times 10^{-4}$
4	0,073881364762652	$3,091 \times 10^{-7}$	$4,212 \times 10^{-4}$
8	0,073881673386660	$4,950 \times 10^{-10}$	$7,956 \times 10^{-4}$
12	0,073881673870529	$1,115 \times 10^{-11}$	$1,212 \times 10^{-3}$
16	0,073881673880944	$7,298 \times 10^{-13}$	$1,534 \times 10^{-3}$
24	0,073881673881659	$1,495 \times 10^{-14}$	$2,288 \times 10^{-3}$
32	0,073881673881673	$9,159 \times 10^{-16}$	$3,021 \times 10^{-3}$
40	0,073881673881674	$9,714 \times 10^{-17}$	$3,770 \times 10^{-3}$
50	0,073881673881674	$1,388 \times 10^{-17}$	$4,659 \times 10^{-3}$
64	0,073881673881674	$1,388 \times 10^{-17}$	$5,985 \times 10^{-3}$
100	0,073881673881674	$4,163 \times 10^{-17}$	$9,313 \times 10^{-3}$

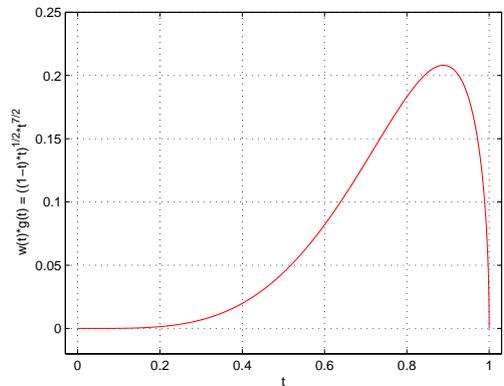


Figura 39:  $\int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{7}{2}} dt$  via Gauss-Chebyshev de 2ª espécie.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	0,054186381611634	$2,646 \times 10^{-3}$	$2,548 \times 10^{-4}$
4	0,056832203207983	$1,464 \times 10^{-7}$	$4,316 \times 10^{-4}$
8	0,056832056880266	$4,821 \times 10^{-11}$	$8,164 \times 10^{-4}$
12	0,056832056832540	$4,829 \times 10^{-13}$	$1,238 \times 10^{-3}$
16	0,056832056832075	$1,801 \times 10^{-14}$	$1,596 \times 10^{-3}$
24	0,056832056832057	$1,735 \times 10^{-16}$	$2,361 \times 10^{-3}$
32	0,056832056832057	$6,939 \times 10^{-18}$	$3,110 \times 10^{-3}$
40	0,056832056832057	$1,388 \times 10^{-17}$	$3,890 \times 10^{-3}$
50	0,056832056832057	$6,939 \times 10^{-18}$	$4,867 \times 10^{-3}$
64	0,056832056832057	$0,000 \times 10^0$	$6,167 \times 10^{-3}$
100	0,056832056832057	$0,000 \times 10^0$	$9,688 \times 10^{-3}$

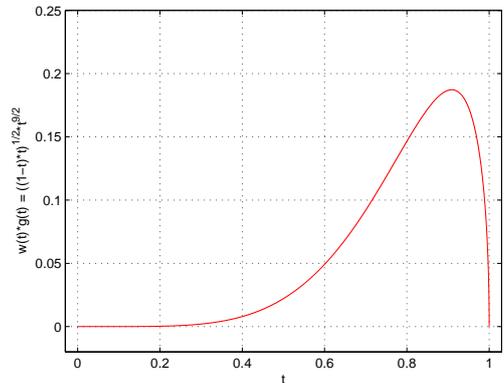


Figura 40:  $\int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{9}{2}} dt$  via Gauss-Chebyshev de 2ª espécie.

### 5.4.9 Gauss-Gegenbauer

A quadratura de Gauss-Gegenbauer calcula integrais do tipo  $\int_c^d ((d-t)(t-c))^{\mu-\frac{1}{2}} g(t) dt$ , com  $\mu > -\frac{1}{2}$ . Os experimentos são

$$(i) \int_0^1 ((1-t)t)^{\frac{3}{2}} t^{\frac{7}{2}} dt, \quad (ii) \int_0^1 ((1-t)t)^2 t^{\frac{5}{3}} dt.$$

O algoritmo da Figura 26 é implementado com vários valores de  $r$ ,  $c = 0$  e  $d = 1$ , com  $g(t) = t^{\frac{7}{2}}$  e  $g(t) = t^{\frac{5}{3}}$ , respectivamente. O parâmetro  $\mu$  é igual a 2 no primeiro caso e igual a  $\frac{5}{2}$  no segundo. As resoluções analíticas são

$$(i) \int_0^1 ((1-t)t)^{\frac{3}{2}} t^{\frac{7}{2}} dt = -\frac{2}{45045} (3003t^5 + 2310t^4 + 1680t^3 + 1120t^2 + 640t + 256)(1-t)^{\frac{5}{2}} \Big|_0^1 = \frac{512}{45045} \approx 0,011366411366411,$$

$$(ii) \int_0^1 ((1-t)t)^2 t^{\frac{5}{3}} dt = \frac{3}{2380} (119t^2 - 280t + 170)t^{\frac{14}{3}} \Big|_0^1 = \frac{27}{2380} \approx 0,011344537815126.$$

As Figuras 41 e 42 mostram os resultados das implementações além de exibir os gráficos dos integrandos.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	0,011303284254782	$6,313 \times 10^{-5}$	$3,744 \times 10^{-4}$
4	0,011366388367433	$2,300 \times 10^{-8}$	$5,668 \times 10^{-4}$
8	0,011366411345456	$2,096 \times 10^{-11}$	$1,019 \times 10^{-3}$
12	0,011366411366111	$3,003 \times 10^{-13}$	$1,534 \times 10^{-3}$
16	0,011366411366398	$1,363 \times 10^{-14}$	$1,950 \times 10^{-3}$
24	0,011366411366411	$7,286 \times 10^{-17}$	$2,881 \times 10^{-3}$
32	0,011366411366411	$7,633 \times 10^{-17}$	$3,791 \times 10^{-3}$
40	0,011366411366411	$2,238 \times 10^{-16}$	$4,690 \times 10^{-3}$
50	0,011366411366411	$6,765 \times 10^{-17}$	$5,964 \times 10^{-3}$
64	0,011366411366412	$2,064 \times 10^{-16}$	$7,540 \times 10^{-3}$
100	0,011366411366411	$2,706 \times 10^{-16}$	$1,189 \times 10^{-2}$

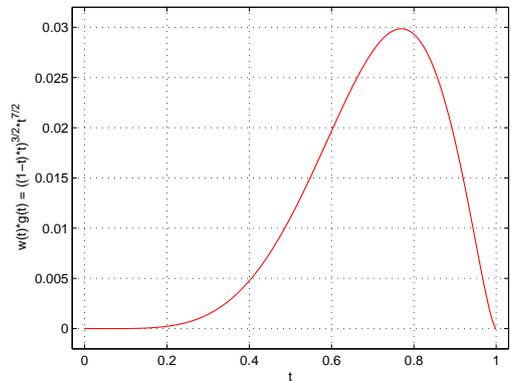


Figura 41:  $\int_0^1 ((1-t)t)^{\frac{3}{2}} t^{\frac{7}{2}} dt$  via Gauss-Gegenbauer.

$r$	<i>integral</i>	<i>erro</i>	<i>tempo(s)</i>
2	0,011337205790095	$7,332 \times 10^{-6}$	$3,640 \times 10^{-4}$
4	0,011344447002547	$9,081 \times 10^{-8}$	$5,772 \times 10^{-4}$
8	0,011344537138860	$6,763 \times 10^{-10}$	$1,040 \times 10^{-3}$
12	0,011344537785463	$2,966 \times 10^{-11}$	$1,581 \times 10^{-3}$
16	0,011344537812214	$2,912 \times 10^{-12}$	$1,960 \times 10^{-3}$
24	0,011344537815028	$9,789 \times 10^{-14}$	$2,891 \times 10^{-3}$
32	0,011344537815118	$8,302 \times 10^{-15}$	$3,832 \times 10^{-3}$
40	0,011344537815125	$1,244 \times 10^{-15}$	$4,774 \times 10^{-3}$
50	0,011344537815126	$1,648 \times 10^{-16}$	$6,011 \times 10^{-3}$
64	0,011344537815126	$2,689 \times 10^{-16}$	$7,623 \times 10^{-3}$
100	0,011344537815126	$3,816 \times 10^{-17}$	$1,193 \times 10^{-2}$

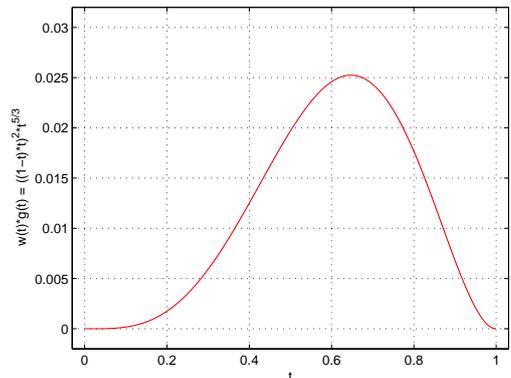


Figura 42:  $\int_0^1 ((1-t)t)^2 t^{\frac{5}{3}} dt$  via Gauss-Gegenbauer.

## 5.5 Algoritmos e implementações via matriz de Jacobi

O Teorema 4.3 mostra que é possível calcular os zeros  $x_i$  e os coeficientes  $H_i$  por meio dos autovalores e autovetores da matriz de Jacobi

$$\mathbf{J}_r = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & & \\ & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \sqrt{\beta_3} & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & & \sqrt{\beta_{r-1}} & \alpha_{r-1} \end{bmatrix},$$

onde os parâmetros  $\alpha_i$ ,  $i = 0, 1, \dots, r-1$ , e  $\beta_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, r-1$ , são os termos da equação de recorrência dos polinômios ortonormais. Estes são calculados pelas fórmulas (2.32) e (2.33) que, por sua vez, dependem apenas de resultados relacionados aos polinômios ortogonais. A obra de Golub and Welsch (1967) apresenta um procedimento para o cálculo dos autovalores e autovetores da matriz de Jacobi e é referência em vários textos que tratam do assunto. São apresentados os algoritmos para  $x_i$  e  $H_i$  com uso da matriz  $\mathbf{J}_r$  para cada quadratura de Gauss (Figuras 43 a 50). Os parâmetros de entrada são o número  $r$  de zeros e, se existentes, os parâmetros  $\alpha$ ,  $\beta$  ou  $\mu$ . Os parâmetros de saída são os vetores  $X$  e  $H$  com os zeros  $x_i$  e os coeficientes  $H_i$ , respectivamente.

Os algoritmos seguem a rotina:

1. Calcula os elementos da matriz de Jacobi;
2. Calcula os autovalores e os primeiros componentes dos autovetores normalizados, respectivamente, obtendo os zeros e os coeficientes.

**Algoritmo matriz\_legendre**  
 {**Objetivo** Calcular  $x_i$  e  $H_i$  pela matriz  $\mathbf{J}_r$  para Gauss-Legendre}  
**parâmetro de entrada**  $r$  {número de zeros}  
**parâmetros de saída**  $X$  e  $H$  {vetores com zeros e coeficientes}  
 início algoritmo  
 1  $J \leftarrow$  matriz quadrada e nula de ordem  $r$   
 2 para  $m \leftarrow 1$  até  $r-1$  faça  
 3  $J(m, m+1) \leftarrow m * 1 / \sqrt{(4 * m^2 - 1)}$  {diagonal de  $\sqrt{\beta_m}$ , por (4.21)}  
 4  $J(m+1, m) \leftarrow J(m, m+1)$  {diagonal simétrica}  
 5 fim para  
 6  $X, v \leftarrow$  autovalores e autovetores normalizados de  $J$ , respectivamente  
 7 para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça  
 8  $H(i) \leftarrow 2 * (v(i, 1))^2$  {(4.20)}  
 9 fim para  
 fim algoritmo

Figura 43: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Legendre pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

```

Algoritmo matriz_laguerregen
{Objetivo Calcular  $x_i$  e  $H_i$  pela matriz  $\mathbf{J}_r$  para Gauss-Laguerre generalizada}
parâmetros de entrada  $r$  e  $\alpha$  {número de zeros e parâmetro  $\alpha > -1$ }
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {vetores com zeros e coeficientes}
início algoritmo
1   $J \leftarrow$  matriz quadrada e nula de ordem  $r$ 
2  para  $m \leftarrow 1$  até  $r - 1$  faça
3       $J(m, m) \leftarrow \alpha + 2 * m + 1$  { $\alpha_0$  a  $\alpha_{r-2}$ , por (4.26)}
4       $J(m, m + 1) \leftarrow \sqrt{((\alpha + i) * i)}$  {diagonal de  $\sqrt{\beta_m}$ , por (4.26)}
5       $J(m + 1, m) \leftarrow J(m, m + 1)$  {diagonal simétrica}
6  fim para
7   $J(m, m) \leftarrow \alpha + 2 * r - 1$  { $\alpha_{r-1}$ , por (4.26)}
8   $X, v \leftarrow$  autovalores e autovetores normalizados de  $J$ , respectivamente
9   $k \leftarrow \Gamma(\alpha + 1)$ 
10 para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
11      $H(i) \leftarrow k * (v(i, 1))^2$  {(4.25)}
12 fim para
fim algoritmo

```

Figura 44: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Laguerre generalizada pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

```

Algoritmo matriz_laguerre
{Objetivo Calcular  $x_i$  e  $H_i$  pela matriz  $\mathbf{J}_r$  para Gauss-Laguerre}
parâmetro de entrada  $r$  {número de zeros}
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {vetores com zeros e coeficientes}
início algoritmo
1   $J \leftarrow$  matriz quadrada e nula de ordem  $r$ 
2  para  $m \leftarrow 1$  até  $r - 1$  faça
3       $J(m, m) \leftarrow 2 * m + 1$  { $\alpha_0$  a  $\alpha_{r-2}$ , por (4.30)}
4       $J(m, m + 1) \leftarrow i$  {diagonal de  $\sqrt{\beta_m}$ , por (4.30)}
5       $J(m + 1, m) \leftarrow J(m, m + 1)$  {diagonal simétrica}
6  fim para
7   $J(m, m) \leftarrow 2 * r - 1$  { $\alpha_{r-1}$ }
8   $X, v \leftarrow$  autovalores e autovetores normalizados de  $J$ , respectivamente
9  para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
10      $H(i) \leftarrow (v(i, 1))^2$  {(4.29)}
11 fim para
fim algoritmo

```

Figura 45: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Laguerre pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

```

Algoritmo matriz_hermite
{Objetivo Calcular  $x_i$  e  $H_i$  pela matriz  $\mathbf{J}_r$  para Gauss-Hermite}
parâmetro de entrada  $r$  {número de zeros}
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {vetores com zeros e coeficientes}
início algoritmo
1   $J \leftarrow$  matriz quadrada e nula de ordem  $r$ 
2  para  $m \leftarrow 1$  até  $r - 1$  faça
3       $J(m, m + 1) \leftarrow \sqrt{(m/2)}$  {diagonal de  $\sqrt{\beta_m}$ , por (4.37)}
4       $J(m + 1, m) \leftarrow J(m, m + 1)$  {diagonal simétrica}
5  fim para
6   $X, v \leftarrow$  autovalores e autovetores normalizados de  $J$ , respectivamente
7  para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
8       $H(i) \leftarrow \pi^{0,5} * (v(i, 1))^2$  {(4.36)}
9  fim para
fim algoritmo

```

Figura 46: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Hermite pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

```

Algoritmo matriz_jacobi
{Objetivo Calcular  $x_i$  e  $H_i$  pela matriz  $\mathbf{J}_r$  para Gauss-Jacobi}
parâmetros de entrada  $r, \alpha$  e  $\beta > \{-1\}$  {número de zeros e parâmetros  $\alpha, \beta > -1$ }
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {vetores com zeros e coeficientes}
início algoritmo
1    $J \leftarrow$  matriz quadrada e nula de ordem  $r$ 
2    $J(1,1) \leftarrow (\beta - \alpha)/(\alpha + \beta + 2)$   $\{\alpha_0, \text{ por (4.45)}\}$ 
3   se  $r > 1$  então
4      $J(1,2) \leftarrow 2 * \sqrt{(\alpha + 1) * (\beta + 1)/((\alpha + \beta + 3) * (\alpha + \beta + 2)^2)}$   $\{\sqrt{\beta_1}, \text{ por (4.45)}\}$ 
5      $J(2,1) \leftarrow J(1,2)$ 
6      $J(r,r) \leftarrow (\beta^2 - \alpha^2)/((2 * r + \alpha + \beta - 2) * (2 * r + \alpha + \beta))$   $\{\alpha_{r-1}, \text{ por (4.45)}\}$ 
7     para  $m \leftarrow 2$  até  $r - 1$  faça
8        $J(m,m) \leftarrow (\beta^2 - \alpha^2)/((2 * m + \alpha + \beta - 2) * (2 * m + \alpha + \beta))$ 
           $\{\alpha_1 \text{ a } \alpha_{r-2}, \text{ por (4.46)}\}$ 
9        $J(m,m+1) \leftarrow 2 * \sqrt{m * (m + \alpha) * (m + \beta) * (m + \alpha + \beta)}$ 
           $/ \sqrt{((2 * m + \alpha + \beta - 1) * (2 * m + \alpha + \beta + 1) * (2 * m + \alpha + \beta)^2)}$ 
           $\{\sqrt{\beta_2} \text{ a } \sqrt{\beta_{r-1}}, \text{ por (4.47)}\}$ 
10       $J(m+1,m) \leftarrow J(m,m+1)$  {diagonal simétrica}
11    fim para
12  fim se
13   $X, v \leftarrow$  autovalores e autovetores normalizados de  $J$ , respectivamente
14   $k \leftarrow 2^{\alpha+\beta+1} * \Gamma(\alpha + 1) * \Gamma(\beta + 1)/\Gamma(\alpha + \beta + 2)$ 
15  para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
16     $H(i) \leftarrow k * (v(i,1))^2$  {(4.44)}
17  fim para
fim algoritmo

```

Figura 47: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Jacobi pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

```

Algoritmo matriz_chebyshev_1
{Objetivo Calcular  $x_i$  e  $H_i$  pela matriz  $\mathbf{J}_r$  para Gauss-Chebyshev de 1ª espécie}
parâmetro de entrada  $r$  {número de zeros}
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {vetores com zeros e coeficientes}
início algoritmo
1    $J \leftarrow$  matriz quadrada e nula de ordem  $r$ 
2   se  $r > 1$  então
3      $J(1,2) \leftarrow \sqrt{(0,5)}$   $\{\sqrt{\beta_1}, \text{ por (4.56)}\}$ 
4      $J(2,1) \leftarrow J(1,2)$ 
5     para  $m \leftarrow 2$  até  $r - 1$  faça
6        $J(m,m+1) \leftarrow 0,5$   $\{\sqrt{\beta_2} \text{ a } \beta_{r-1}, \text{ por (4.56)}\}$ 
7        $J(m+1,m) \leftarrow J(m,m+1)$  {diagonal simétrica}
8     fim para
9  fim se
10   $X \leftarrow$  autovalores de  $J$ 
11  para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
12     $H(i) \leftarrow \pi/r$  {(4.55)}
13  fim para
fim algoritmo

```

Figura 48: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Chebyshev de 1ª espécie pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

```

Algoritmo matriz_chebyshev_2
{Objetivo Calcular  $x_i$  e  $H_i$  pela matriz  $\mathbf{J}_r$  para Gauss-Chebyshev de 2ª espécie}
parâmetro de entrada  $r$  {número de zeros}
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {vetores com zeros e coeficientes}
início algoritmo
1    $J \leftarrow$  matriz quadrada e nula de ordem  $r$ 
2   se  $r > 1$  então
3     para  $m \leftarrow 1$  até  $r - 1$  faça
4        $J(m, m + 1) \leftarrow 0,5$  {diagonal de  $\sqrt{\beta_m}$ , por (4.65)}
5        $J(m + 1, m) \leftarrow J(m, m + 1)$  {diagonal simétrica}
6     fim para
7   fim se
8    $X, v \leftarrow$  autovalores e autovetores normalizados de  $J$ , respectivamente
9    $k \leftarrow \pi/2$ 
10  para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
11     $H(i) \leftarrow k * (v(i, 1))^2$  {(4.64)}
12  fim para
fim algoritmo

```

Figura 49: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Chebyshev de 2ª espécie pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

```

Algoritmo matriz_gegenbauer
{Objetivo Calcular  $x_i$  e  $H_i$  pela matriz  $\mathbf{J}_r$  para Gauss-Gegenbauer}
parâmetros de entrada  $r$  e  $\mu$  {número de zeros e parâmetro  $\mu > -0,5$ ,  $\mu \neq 0$ }
parâmetros de saída  $X$  e  $H$  {vetores com zeros e coeficientes}
início algoritmo
1    $J \leftarrow$  matriz quadrada e nula de ordem  $r$ 
2   se  $r > 1$  então
3     para  $m \leftarrow 2$  até  $r - 1$  faça
4        $J(m, m + 1) \leftarrow \sqrt{m * (m + 2 * \mu - 1) / ((m + \mu) * (m + \mu - 1))} / 2$ 
        {diagonal de  $\sqrt{\beta_m}$ , por (4.73)}
5        $J(m + 1, m) \leftarrow J(m, m + 1)$  {diagonal simétrica}
6     fim para
7   fim se
8    $X, v \leftarrow$  autovalores e autovetores normalizados de  $J$ , respectivamente
9    $k \leftarrow 2^{2*\mu} * \Gamma(\mu + 0,5) / \Gamma(2 * \mu + 1)$ 
10  para  $i \leftarrow 1$  até  $r$  faça
11     $H(i) \leftarrow k * (v(i, 1))^2$  {(4.72)}
12  fim para
fim algoritmo

```

Figura 50: Algoritmo para  $x_i$  e  $H_i$  de Gauss-Gegenbauer pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

### 5.5.1 Implementações

Com os algoritmos das quadraturas numéricas (Figuras 19 a 26) são realizados os mesmos experimentos da Seção 5.4 com  $x_i$  e  $H_i$  obtidos, desta vez, pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

As Tabelas 3 a 18 mostram os resultados dos experimentos juntamente com o tempo  $tempo\_jac$ , em segundos, demandado pela execução. O parâmetro  $tempo\_jac$  é calculado pela média aritmética dos tempos demandados por várias execuções para cada valor de  $r$ , sendo 3000 execuções para  $2 \leq r < 500$ , 10 execuções para  $500 \leq r \leq 750$  e 1 execução para  $r \geq 1000$ . O erro relativo é dado por  $erro\_jac$ . Paralelamente é mostrado o erro relativo  $erro$  e o tempo  $tempo$  das implementações das Subseções 5.4.2 a 5.4.9.

Tabela 3:  $\int_0^{2\pi} t \sen(t) dt$  via Gauss-Legendre pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$1,776 \times 10^{-15}$	$4,441 \times 10^{-15}$	$1,295 \times 10^{-3}$	$1,201 \times 10^{-3}$
50	$7,105 \times 10^{-15}$	$1,776 \times 10^{-15}$	$7,077 \times 10^{-3}$	$4,732 \times 10^{-3}$
100	$4,441 \times 10^{-15}$	$1,776 \times 10^{-15}$	$2,190 \times 10^{-2}$	$9,558 \times 10^{-3}$
500	$4,619 \times 10^{-14}$	$4,441 \times 10^{-15}$	$9,672 \times 10^{-1}$	$5,616 \times 10^{-2}$
750	$2,753 \times 10^{-14}$	$1,776 \times 10^{-15}$	$3,468 \times 10^0$	$9,360 \times 10^{-2}$
1000	$2,487 \times 10^{-14}$	$7,105 \times 10^{-15}$	$8,309 \times 10^0$	$1,326 \times 10^{-1}$
1500	$0,000 \times 10^0$	$1,776 \times 10^{-14}$	$2,884 \times 10^1$	$2,293 \times 10^{-1}$
2000	$2,665 \times 10^{-14}$	$4,441 \times 10^{-15}$	$6,770 \times 10^1$	$3,323 \times 10^{-1}$

Tabela 4:  $\int_0^{2\pi} t \sen(15t) dt$  via Gauss-Legendre pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$4,595 \times 10^0$	$4,595 \times 10^0$	$1,565 \times 10^{-3}$	$1,492 \times 10^{-3}$
50	$1,893 \times 10^{-14}$	$3,941 \times 10^{-15}$	$8,294 \times 10^{-3}$	$5,933 \times 10^{-3}$
100	$3,075 \times 10^{-14}$	$1,499 \times 10^{-14}$	$2,414 \times 10^{-2}$	$1,199 \times 10^{-2}$
500	$1,960 \times 10^{-14}$	$7,383 \times 10^{-15}$	$9,734 \times 10^{-1}$	$7,176 \times 10^{-2}$
750	$1,872 \times 10^{-13}$	$7,827 \times 10^{-15}$	$3,462 \times 10^0$	$1,076 \times 10^{-1}$
1000	$1,040 \times 10^{-13}$	$5,496 \times 10^{-15}$	$8,376 \times 10^0$	$1,638 \times 10^{-1}$
1500	$7,710 \times 10^{-14}$	$2,054 \times 10^{-15}$	$2,875 \times 10^1$	$2,683 \times 10^{-1}$
2000	$2,814 \times 10^{-13}$	$4,996 \times 10^{-15}$	$6,778 \times 10^1$	$3,822 \times 10^{-1}$

Tabela 5:  $\int_0^{\infty} e^{-t} t \sen(t) dt$  via Gauss-Laguerre generalizada pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$6,878 \times 10^{-9}$	$6,878 \times 10^{-9}$	$1,113 \times 10^{-3}$	$1,196 \times 10^{-3}$
50	$0,000 \times 10^0$	$0,000 \times 10^0$	$6,422 \times 10^{-3}$	$6,422 \times 10^{-3}$
100	$7,772 \times 10^{-16}$	$7,772 \times 10^{-16}$	$2,041 \times 10^{-2}$	$1,999 \times 10^{-2}$
500	$1,665 \times 10^{-16}$	não resolveu	$1,075 \times 10^0$	—
1000	$2,220 \times 10^{-16}$	não resolveu	$9,986 \times 10^0$	—

Tabela 6:  $\int_0^{\infty} e^{-t} t \operatorname{sen}(3t) dt$  via Gauss-Laguerre generalizada pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$1,626 \times 10^{-1}$	$1,626 \times 10^{-1}$	$1,503 \times 10^{-3}$	$1,503 \times 10^{-3}$
50	$9,795 \times 10^{-7}$	$9,795 \times 10^{-7}$	$7,597 \times 10^{-3}$	$7,613 \times 10^{-3}$
100	$3,068 \times 10^{-14}$	$3,068 \times 10^{-14}$	$2,292 \times 10^{-2}$	$2,273 \times 10^{-2}$
500	$1,256 \times 10^{-15}$	não resolveu	$1,058 \times 10^0$	–
1000	$1,596 \times 10^{-16}$	não resolveu	$9,890 \times 10^0$	–

Tabela 7:  $\int_{\pi}^{\infty} e^{-t} \cos(t) dt$  via Gauss-Laguerre pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$6,423 \times 10^{-10}$	$6,423 \times 10^{-10}$	$1,144 \times 10^{-3}$	$1,108 \times 10^{-3}$
50	$2,776 \times 10^{-17}$	$6,939 \times 10^{-17}$	$6,256 \times 10^{-3}$	$5,018 \times 10^{-3}$
100	$0,000 \times 10^0$	$1,665 \times 10^{-16}$	$1,975 \times 10^{-2}$	$1,092 \times 10^{-2}$
500	$2,776 \times 10^{-17}$	não resolveu	$1,033 \times 10^0$	–
1000	$6,939 \times 10^{-18}$	nao resolveu	$9,541 \times 10^0$	–

Tabela 8:  $\int_{\pi}^{\infty} e^{-t} \cos(3t) dt$  via Gauss-Laguerre pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$1,751 \times 10^{-3}$	$1,751 \times 10^{-3}$	$1,383 \times 10^{-3}$	$1,362 \times 10^{-3}$
50	$1,894 \times 10^{-9}$	$1,894 \times 10^{-9}$	$7,368 \times 10^{-3}$	$6,011 \times 10^{-3}$
100	$5,638 \times 10^{-17}$	$3,123 \times 10^{-17}$	$2,209 \times 10^{-2}$	$1,277 \times 10^{-2}$
500	$8,674 \times 10^{-18}$	não resolveu	$1,078 \times 10^0$	–
1000	$9,541 \times 10^{-18}$	não resolveu	$9,722 \times 10^0$	–

Tabela 9:  $\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^3(t) dt$  via Gauss-Hermite pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$8,548 \times 10^{-5}$	$8,548 \times 10^{-5}$	$2,236 \times 10^{-3}$	$2,527 \times 10^{-3}$
50	$4,564 \times 10^{-11}$	$4,564 \times 10^{-11}$	$1,081 \times 10^{-2}$	$1,005 \times 10^{-2}$
100	$1,998 \times 10^{-15}$	$1,332 \times 10^{-15}$	$2,954 \times 10^{-2}$	$1,972 \times 10^{-2}$
200	$2,220 \times 10^{-16}$	não resolveu	$1,108 \times 10^{-1}$	–
300	$0,000 \times 10^0$	não resolveu	$2,870 \times 10^{-1}$	–

Tabela 10:  $\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^4(t) dt$  via Gauss-Hermite pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$2,862 \times 10^{-4}$	$2,862 \times 10^{-4}$	$2,382 \times 10^{-3}$	$2,538 \times 10^{-3}$
50	$3,033 \times 10^{-10}$	$3,033 \times 10^{-10}$	$1,149 \times 10^{-2}$	$1,019 \times 10^{-2}$
100	$3,553 \times 10^{-15}$	$2,665 \times 10^{-15}$	$3,046 \times 10^{-2}$	$2,032 \times 10^{-2}$
200	$4,441 \times 10^{-16}$	não resolveu	$1,123 \times 10^{-1}$	–
300	$0,000 \times 10^0$	não resolveu	$2,855 \times 10^{-1}$	–

Tabela 11:  $\int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt$  via Gauss-Jacobi pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$4,972 \times 10^{-10}$	$4,972 \times 10^{-10}$	$1,498 \times 10^{-3}$	$2,257 \times 10^{-3}$
50	$2,495 \times 10^{-14}$	$2,502 \times 10^{-14}$	$7,530 \times 10^{-3}$	$8,554 \times 10^{-3}$
100	$1,804 \times 10^{-16}$	$2,914 \times 10^{-16}$	$2,326 \times 10^{-2}$	$1,745 \times 10^{-2}$
500	$4,163 \times 10^{-17}$	$5,360 \times 10^{-14}$	$9,157 \times 10^{-1}$	$1,139 \times 10^{-1}$
750	$2,914 \times 10^{-16}$	$1,524 \times 10^{-14}$	$3,246 \times 10^0$	$1,872 \times 10^{-1}$
1000	$9,714 \times 10^{-17}$	$8,354 \times 10^{-15}$	$7,839 \times 10^0$	$2,496 \times 10^{-1}$
1500	$1,388 \times 10^{-17}$	$2,204 \times 10^{-13}$	$2,716 \times 10^1$	$4,524 \times 10^{-1}$
2000	$2,220 \times 10^{-16}$	$9,256 \times 10^{-15}$	$6,505 \times 10^1$	$6,599 \times 10^{-1}$

Tabela 12:  $\int_0^{\frac{1}{2}} \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{\frac{1}{2}-t}} dt$  via Gauss-Jacobi pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$6,098 \times 10^{-12}$	$6,098 \times 10^{-12}$	$1,446 \times 10^{-3}$	$2,231 \times 10^{-3}$
50	$1,388 \times 10^{-17}$	$3,469 \times 10^{-17}$	$7,602 \times 10^{-3}$	$8,585 \times 10^{-3}$
100	$1,388 \times 10^{-17}$	$2,290 \times 10^{-16}$	$2,228 \times 10^{-2}$	$1,758 \times 10^{-2}$
500	$6,245 \times 10^{-17}$	$2,340 \times 10^{-14}$	$9,142 \times 10^{-1}$	$1,076 \times 10^{-1}$
750	$1,596 \times 10^{-16}$	$7,577 \times 10^{-15}$	$3,220 \times 10^0$	$1,794 \times 10^{-1}$
1000	$1,318 \times 10^{-16}$	$4,198 \times 10^{-15}$	$7,833 \times 10^0$	$2,465 \times 10^{-1}$
1500	$1,388 \times 10^{-17}$	$9,624 \times 10^{-14}$	$2,744 \times 10^1$	$4,337 \times 10^{-1}$
2000	$1,110 \times 10^{-16}$	$4,524 \times 10^{-15}$	$6,577 \times 10^1$	$6,365 \times 10^{-1}$

Tabela 13:  $\int_0^1 \frac{t^{\frac{7}{2}}}{\sqrt{(1-t)t}} dt$  via Gauss-Chebyshev de 1ª espécie pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$7,395 \times 10^{-10}$	$7,395 \times 10^{-10}$	$1,331 \times 10^{-3}$	$1,222 \times 10^{-3}$
50	$7,772 \times 10^{-15}$	$7,772 \times 10^{-15}$	$7,332 \times 10^{-3}$	$4,753 \times 10^{-3}$
100	$2,220 \times 10^{-16}$	$2,220 \times 10^{-16}$	$2,278 \times 10^{-2}$	$9,490 \times 10^{-3}$
500	$5,551 \times 10^{-16}$	$6,661 \times 10^{-16}$	$9,734 \times 10^{-1}$	$4,524 \times 10^{-2}$
750	$0,000 \times 10^0$	$2,220 \times 10^{-16}$	$3,446 \times 10^0$	$7,488 \times 10^{-2}$
1000	$8,882 \times 10^{-16}$	$8,882 \times 10^{-16}$	$8,377 \times 10^0$	$9,984 \times 10^{-2}$
1500	$1,110 \times 10^{-16}$	$3,331 \times 10^{-16}$	$2,836 \times 10^1$	$1,466 \times 10^{-1}$
2000	$5,551 \times 10^{-16}$	$4,441 \times 10^{-16}$	$6,728 \times 10^1$	$1,950 \times 10^{-1}$

Tabela 14:  $\int_0^1 \frac{t^{\frac{9}{2}}}{\sqrt{(1-t)t}} dt$  via Gauss-Chebyshev de 1ª espécie pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$2,402 \times 10^{-11}$	$2,402 \times 10^{-11}$	$1,342 \times 10^{-3}$	$1,222 \times 10^{-3}$
50	$0,000 \times 10^0$	$0,000 \times 10^0$	$7,556 \times 10^{-3}$	$4,940 \times 10^{-3}$
100	$2,220 \times 10^{-16}$	$1,110 \times 10^{-16}$	$2,344 \times 10^{-2}$	$9,760 \times 10^{-3}$
500	$1,110 \times 10^{-16}$	$2,220 \times 10^{-16}$	$9,766 \times 10^{-1}$	$4,680 \times 10^{-2}$
750	$1,110 \times 10^{-16}$	$3,331 \times 10^{-16}$	$3,469 \times 10^0$	$6,864 \times 10^{-2}$
1000	$2,220 \times 10^{-16}$	$5,551 \times 10^{-16}$	$8,268 \times 10^0$	$9,360 \times 10^{-2}$
1500	$6,661 \times 10^{-16}$	$8,882 \times 10^{-16}$	$2,861 \times 10^1$	$1,420 \times 10^{-1}$
2000	$1,110 \times 10^{-16}$	$1,110 \times 10^{-16}$	$6,744 \times 10^1$	$1,903 \times 10^{-1}$

Tabela 15:  $\int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{7}{2}} dt$  via Gauss-Chebyshev de 2ª espécie pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$1,115 \times 10^{-11}$	$1,115 \times 10^{-11}$	$1,388 \times 10^{-3}$	$1,212 \times 10^{-3}$
50	$1,388 \times 10^{-16}$	$1,388 \times 10^{-17}$	$7,332 \times 10^{-3}$	$4,659 \times 10^{-3}$
100	$1,388 \times 10^{-16}$	$4,163 \times 10^{-17}$	$2,203 \times 10^{-2}$	$9,313 \times 10^{-3}$
500	$3,469 \times 10^{-16}$	$4,163 \times 10^{-17}$	$9,812 \times 10^{-1}$	$4,212 \times 10^{-2}$
750	$2,776 \times 10^{-16}$	$2,776 \times 10^{-17}$	$3,371 \times 10^0$	$6,864 \times 10^{-2}$
1000	$1,110 \times 10^{-16}$	$8,327 \times 10^{-17}$	$8,315 \times 10^0$	$9,048 \times 10^{-2}$
1500	$1,388 \times 10^{-16}$	$6,939 \times 10^{-17}$	$2,836 \times 10^1$	$1,404 \times 10^{-1}$
2000	$1,943 \times 10^{-16}$	$4,163 \times 10^{-17}$	$6,694 \times 10^1$	$1,856 \times 10^{-1}$

Tabela 16:  $\int_0^1 \sqrt{(1-t)t} t^{\frac{9}{2}} dt$  via Gauss-Chebyshev de 2ª espécie pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$4,829 \times 10^{-13}$	$4,829 \times 10^{-13}$	$1,394 \times 10^{-3}$	$1,238 \times 10^{-3}$
50	$1,041 \times 10^{-16}$	$6,939 \times 10^{-18}$	$7,420 \times 10^{-3}$	$4,867 \times 10^{-3}$
100	$9,714 \times 10^{-17}$	$0,000 \times 10^0$	$2,256 \times 10^{-2}$	$9,688 \times 10^{-3}$
500	$2,567 \times 10^{-16}$	$1,388 \times 10^{-17}$	$9,766 \times 10^{-1}$	$5,148 \times 10^{-2}$
750	$2,012 \times 10^{-16}$	$0,000 \times 10^0$	$3,424 \times 10^0$	$7,800 \times 10^{-2}$
1000	$1,180 \times 10^{-16}$	$0,000 \times 10^0$	$8,174 \times 10^0$	$9,984 \times 10^{-2}$
1500	$2,012 \times 10^{-16}$	$4,857 \times 10^{-17}$	$2,827 \times 10^1$	$1,544 \times 10^{-1}$
2000	$1,943 \times 10^{-16}$	$4,163 \times 10^{-17}$	$6,669 \times 10^1$	$1,903 \times 10^{-1}$

Tabela 17:  $\int_0^1 ((1-t)t)^{\frac{3}{2}} t^{\frac{7}{2}} dt$  via Gauss-Gegenbauer pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$3,003 \times 10^{-13}$	$3,003 \times 10^{-13}$	$1,357 \times 10^{-3}$	$1,534 \times 10^{-3}$
50	$1,388 \times 10^{-17}$	$6,765 \times 10^{-17}$	$7,441 \times 10^{-3}$	$5,964 \times 10^{-3}$
100	$6,939 \times 10^{-18}$	$2,706 \times 10^{-16}$	$2,228 \times 10^{-2}$	$1,189 \times 10^{-2}$
500	$2,602 \times 10^{-17}$	$4,522 \times 10^{-15}$	$9,734 \times 10^{-1}$	$7,332 \times 10^{-2}$
750	$1,388 \times 10^{-17}$	$6,386 \times 10^{-15}$	$3,416 \times 10^0$	$1,092 \times 10^{-1}$
1000	$1,735 \times 10^{-17}$	$2,498 \times 10^{-15}$	$8,284 \times 10^0$	$1,560 \times 10^{-1}$
1500	$8,674 \times 10^{-18}$	$8,446 \times 10^{-15}$	$2,816 \times 10^1$	$2,402 \times 10^{-1}$
2000	$9,021 \times 10^{-17}$	$1,327 \times 10^{-14}$	$6,667 \times 10^1$	$3,416 \times 10^{-1}$

Tabela 18:  $\int_0^1 ((1-t)t)^2 t^{\frac{5}{3}} dt$  via Gauss-Gegenbauer pela matriz  $\mathbf{J}_r$ .

$r$	$erro\_jac$	$erro$	$tempo\_jac(s)$	$tempo(s)$
12	$2,966 \times 10^{-11}$	$2,966 \times 10^{-11}$	$1,373 \times 10^{-3}$	$1,581 \times 10^{-3}$
50	$1,613 \times 10^{-16}$	$1,648 \times 10^{-16}$	$7,405 \times 10^{-3}$	$6,011 \times 10^{-3}$
100	$5,204 \times 10^{-18}$	$3,816 \times 10^{-17}$	$2,228 \times 10^{-2}$	$1,193 \times 10^{-2}$
500	$1,041 \times 10^{-17}$	$4,937 \times 10^{-15}$	$9,812 \times 10^{-1}$	$6,708 \times 10^{-2}$
750	$1,214 \times 10^{-17}$	$5,208 \times 10^{-15}$	$3,460 \times 10^0$	$1,123 \times 10^{-1}$
1000	$6,072 \times 10^{-17}$	$6,816 \times 10^{-15}$	$8,299 \times 10^0$	$1,591 \times 10^{-1}$
1500	$5,725 \times 10^{-17}$	$1,728 \times 10^{-14}$	$2,816 \times 10^1$	$2,340 \times 10^{-1}$
2000	$3,123 \times 10^{-17}$	$1,680 \times 10^{-14}$	$6,727 \times 10^1$	$3,526 \times 10^{-1}$

Conclui-se que numa integração com o emprego da matriz de Jacobi  $\mathbf{J}_r$ , o tempo necessário é superior àquele apresentado na estratégia anterior, onde foi utilizado o método de Newton, principalmente para valores muito grandes de  $r$ . Por exemplo, com exceção de Gauss-Hermite, Gauss-Laguerre e Gauss-Laguerre generalizada, o tempo gasto pela matriz  $\mathbf{J}_r$  em  $r = 2000$  zeros é superior a 1 minuto, enquanto que, o outro método gastou menos de 1 segundo. Esta disparidade é conseqüência do alto custo computacional no cálculo dos autovalores e autovetores da matriz de Jacobi, ao passo que, os outros métodos calculam os zeros e os coeficientes da quadratura pelo método de Newton quando não possuem fórmulas diretas para eles (Figuras 14 e 15). Além disto, quando os zeros são simétricos, o método de Newton é usado somente para os zeros não negativos, enquanto que, a matriz de Jacobi calcula todos zeros separadamente. Todavia, para integrações de Gauss-Hermite, Gauss-Laguerre e Gauss-Laguerre generalizada, a matriz de Jacobi é indispensável, pois os outros métodos falham a partir de um determinado valor de  $r$ , o que será tratado na Seção 5.6. Por isto, os experimentos apresentados a seguir fazem uso da matriz de Jacobi somente nas quadraturas de Gauss-Hermite, Gauss-Laguerre e Gauss-Laguerre generalizada.

Os autovalores e autovetores foram calculados pela função `eig` do MATLAB. Caso os algoritmos que usam a matriz de Jacobi sejam utilizados numa outra linguagem de programação, sugere-se as rotinas `DSTEQR` ou `DSTEDC` do LAPACK (Anderson *et al*, 1999), baseadas nos algoritmos *QR* com deslocamento implícito e algoritmo divide e conquista de Cuppen, respectivamente.

## 5.6 Validação dos algoritmos para zeros e coeficientes

Os algoritmos para determinação de  $x_i$  e  $H_i$  que são baseados no método de Newton, requerem boas aproximações iniciais para  $x_i$ , exceto no caso de Gauss-Chebyshev de 1ª e 2ª espécies que, por sua vez, possuem uma fórmula geradora os zeros  $x_i$ . Estes algoritmos para Gauss-Hermite, Gauss-Laguerre e Gauss-Laguerre generalizada apresentam um limite máximo para o número  $r$  de zeros. No caso de Gauss-Laguerre e Gauss-Laguerre generalizada, com  $\alpha = 1$ , o número máximo de zeros é  $r = 365$ , pois quando  $r \geq 366$ , ocorre que  $p_1$  (linha 16 das Figuras 10 e 11) é calculado pela subtração de dois valores superiores ao maior número de ponto flutuante representável pelo computador, que é aproximadamente  $1,7977 \times 10^{308}$  para variáveis de 8 bytes (Campos, 2000), resultando em falha do algoritmo<sup>2</sup>. No caso de Gauss-Hermite, para  $r \geq 114$ , o valor de  $pp^2$  também

<sup>2</sup>Ocorrem falhas como esta para diversos valores de  $\alpha$  em Gauss-Laguerre generalizada.

é superior a este valor (linha 30 da Figura 12), neste caso é aconselhável que  $r$  seja, no máximo, 113.

Ressalta-se que o método de Newton para os zeros dos polinômios de Laguerre, Laguerre generalizado e de Hermite é usado até 10 vezes porque alguns zeros  $x_i$  podem requerer muitas iterações para serem refinados com a precisão  $10^{-15}$ . Os zeros em tais algoritmos são obtidos com o método de Newton que, por sua vez, fornece os zeros quando for atendida a precisão ou, então, ao fim da 10ª iteração. A Figura 51 mostra o percentual de zeros que seriam calculados pelo método de Newton quando fosse atendida a precisão deste método, caso o parâmetro de precisão fosse  $10^{-15}$  e  $10^{-14}$  em `zero_h_hermite` (linha 25 da Figura 12) para cada valor de  $r \leq 113$ .

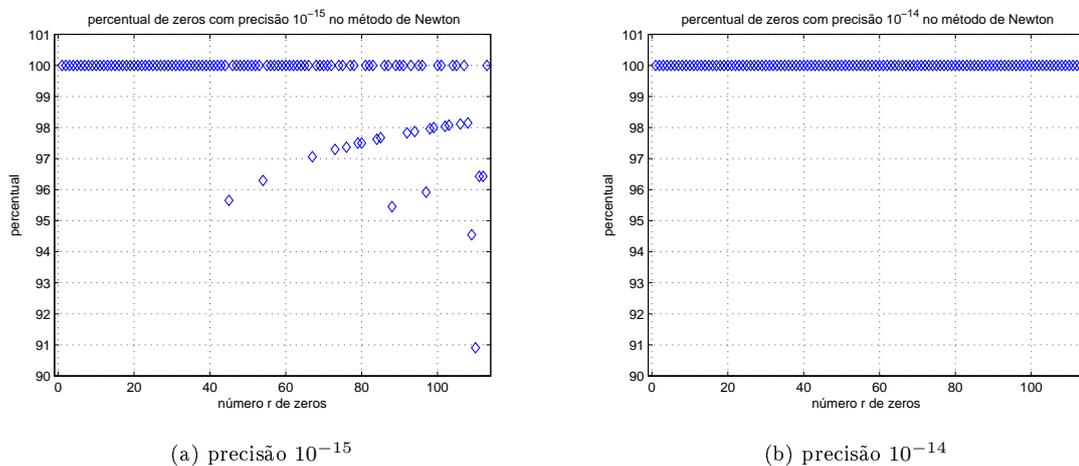


Figura 51: Percentual de zeros com precisão  $10^{-15}$  e  $10^{-14}$  em `zero_h_hermite`.

Por exemplo, na Figura 51 (a) tem-se que, para  $r = 80$ , cerca de 97,5% destes 80 zeros foram calculados com a precisão  $10^{-15}$  e os demais zeros foram obtidos na 10ª iteração do método de Newton (linhas 14 a 27 da Figura 12). Em (b), tem-se que para todos valores de  $r$ , 100% dos zeros foram calculados com precisão  $10^{-14}$ . Portanto, a Figura 51 mostra que o algoritmo `zero_h_hermite` (com precisão  $10^{-15}$  e máximo de 10 iterações no método de Newton) fornece, no mínimo, 90% dos zeros com precisão de  $10^{-15}$  e os outros zeros são obtidos na 10ª iteração, sendo fornecidos com precisão de  $10^{-14}$ .

Agora, a Figura 52 mostra o percentual dos zeros que seriam calculados pelo método de Newton quando fosse atendida a precisão deste método caso este parâmetro fosse  $10^{-15}$ ,  $10^{-14}$ ,  $10^{-13}$  e  $10^{-12}$  em `zero_h_laguerre`<sup>3</sup> em cada valor de  $r \leq 365$  (linha 21 da Figura 11). Verifica-se que este algoritmo (com precisão  $10^{-15}$  e máximo de 10

<sup>3</sup>O algoritmo `zero_h_laguerre_gen`,  $1 < \alpha \leq 8$ , apresenta percentuais muito próximos aos de `zero_h_laguerre`.

iterrações no método de Newton) fornece mais de 75% dos zeros com precisão de  $10^{-15}$  e o restante dos zeros é obtido na  $10^a$  iterração sendo fornecidos com precisão de, no mínimo,  $10^{-12}$ .

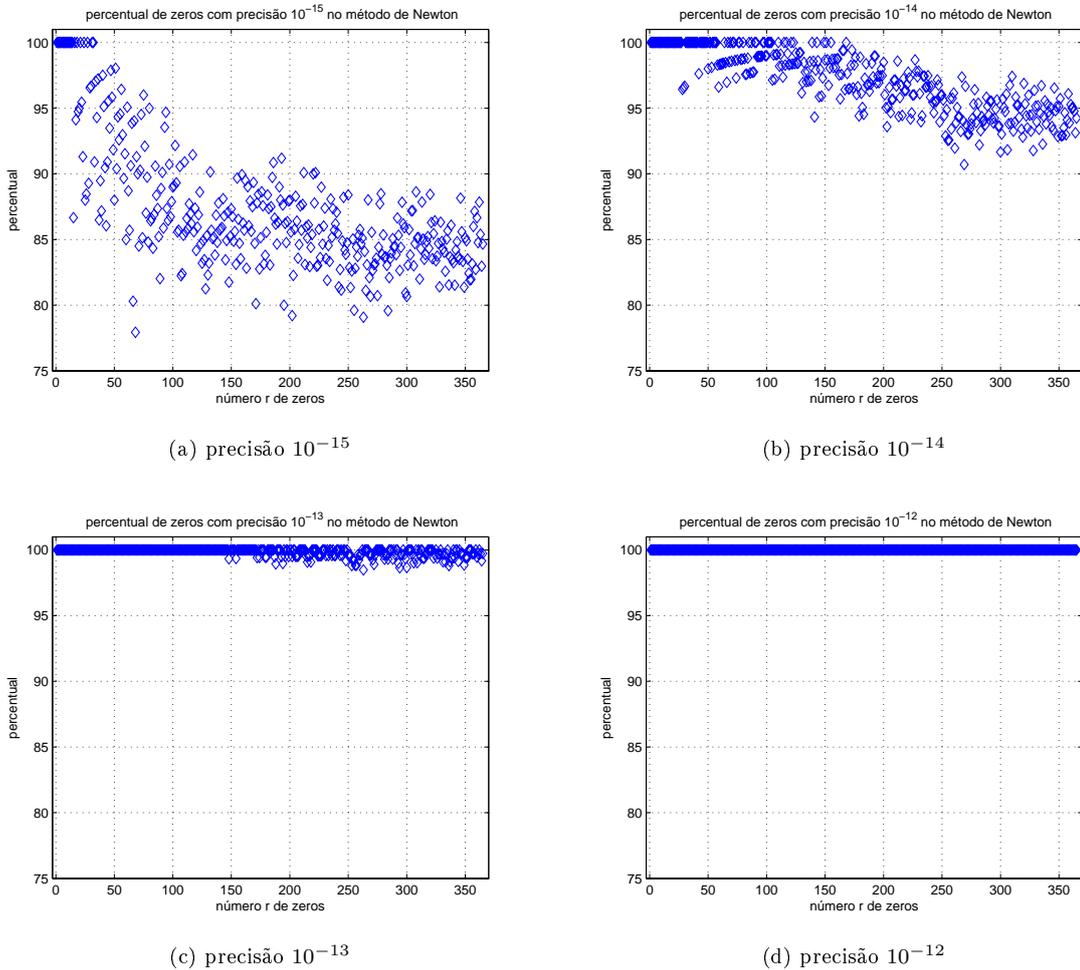


Figura 52: Percentual de zeros com precisão  $10^{-15}$  a  $10^{-12}$  em `zero_h_laguerre`.

Os demais algoritmos que utilizam o método de Newton foram testados para  $r$  até 20.000 e não apresentaram nenhuma restrição (inclusive os casos `zero_h_chebyshev_1` e `zero_h_chebyshev_2`). Por isto, não restringe-se o número de iterrações no método de Newton de tais algoritmos.

Os algoritmos que usam a matriz de Jacobi não apresentaram limites para o número de zeros uma vez que, essencialmente, calculam autovalores e autovetores. Todavia, como foi mostrado, demandam mais tempo de execução do que os outros algoritmos.

## 5.7 A escolha do método mais eficiente

As quadraturas de Gauss com base nos polinômios ortogonais de medidas clássicas distinguem-se, primeiramente, quanto ao intervalo de integração: finito  $[c, d]$ , semi-infinito  $[c, \infty)$  ou duplamente infinito  $(-\infty, \infty)$ . Havendo mais de uma quadratura para um tipo de intervalo, ela será definida ao especificar-se a função peso  $w(t)$ . Para isto, inicialmente, é necessário reescrever a função integrando  $F(t)$  na seguinte forma

$$F(t) = w(t)g(t), \quad (5.9)$$

sendo  $w(t)$  contínua no intervalo aberto e  $g(t)$  contínua no intervalo fechado de integração.

*A priori*, a função  $g(t)$  poderia ser descontínua nos extremos de integração, pois a quadratura faz avaliações desta função em pontos interiores deste intervalo. Porém, se  $g(t)$  fosse descontínua, ela não poderia ser bem aproximada por um polinômio e o método da quadratura não seria eficiente. Por isto, assume-se que  $g(t)$  deve ser contínua no intervalo fechado de integração.

A Tabela 19 mostra como deverá ser  $w(t)$  para cada tipo de intervalo:  $[c, d]$ ,  $[c, \infty)$  e  $(-\infty, \infty)$ . A função  $w(t)$ , nos intervalos  $[c, d]$  e  $[0, \infty)$ , serve para atender às possíveis singularidades de  $F(t)$  nos extremos de integração.

Tabela 19:  $w(t)$  em cada intervalo de integração.

Intervalo	$w(t)$
$[c, d]$	$(d - t)^\alpha (t - c)^\beta$ , $\alpha > -1$ e $\beta > -1$
$[c, \infty)$	$\begin{cases} e^{-t} t^\alpha, & \alpha > -1, \text{ se } c = 0, \\ e^{-t}, & \text{se } c \neq 0 \end{cases}$
$(-\infty, \infty)$	$e^{-t^2}$

Uma vez encontrada  $w(t)$ , a função  $g(t)$  é obtida pela equação (5.9).

Se o intervalo for duplamente infinito, a função peso é do tipo de Gauss-Hermite, ficando definida a quadratura.

Se o intervalo for semi-infinito  $[c, \infty)$ , a função  $w(t)$  é do tipo de Gauss-Laguerre ou Gauss-Laguerre generalizada. Neste caso, se  $c = 0$ , usa-se a generalizada, cuja função peso colabora para a suavidade de  $g(t)$  porque possui parâmetro  $\alpha > -1$ ; caso  $c \neq 0$ , só será possível utilizar Gauss-Laguerre (Subseção 5.2.2).

Por fim, se o intervalo for limitado, a função  $w(t)$  é do tipo de Jacobi e deve-se usar uma

das quadraturas apresentadas na Tabela 1 com intervalo  $[c, d]$  que são casos particulares da função peso de Jacobi. Elas se distinguem conforme os valores dos parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$ , segundo a Tabela 20.

Tabela 20:  $w(t)$  do tipo Jacobi.

$\alpha > -1$ e $\beta > -1$	quadratura
$\alpha = \beta = 0$	Gauss-Legendre
$\alpha = \beta = -\frac{1}{2}$	Gauss-Chebyshev de 1ª espécie
$\alpha = \beta = \frac{1}{2}$	Gauss-Chebyshev de 2ª espécie
$\alpha = \beta \neq 0, \pm\frac{1}{2}$	Gauss-Gegenbauer, $\mu = \alpha + \frac{1}{2}$
$\alpha \neq \beta$	Gauss-Jacobi

Há dois fatores que determinaram a escolha das quadraturas mais eficientes: a convergência da quadratura e os algoritmos mais eficientes.

A questão da convergência está associada ao comportamento da função  $g(t)$ : como a fórmula de erro da quadratura de Gauss apresenta derivada de ordem  $2r$  da função  $g(t)$  (Tabela 2), então o método de Gauss é exato para polinômios de grau até  $2r - 1$ . Logo, quanto melhor  $g(t)$  puder ser aproximada por um polinômio, melhor será a convergência da quadratura. Em outras palavras, quanto mais suave for  $g(t)$ , melhor será a convergência e a função peso tem por finalidade deixar  $g(t)$  mais simples e mais suave. Para isto, basta reescrever o integrando na forma  $w(t)g(t)$  com  $w(t)$  assumindo uma das formas mostradas na Tabela 19. Davis e Rabinowitz (1984) apresentam um bom exemplo do decréscimo da convergência quando a suavidade de  $g(t)$  decresce ao utilizar Gauss-Legendre nas integrais:

$$(i) \int_0^1 g(t) dt, \quad \text{onde } g(t) = \begin{cases} (t+2)^{-1}, & \text{se } 0 \leq t \leq e-2, \\ 0, & \text{se } e-2 \leq t \leq 1, \end{cases}$$

$$(ii) \int_0^1 \sqrt{t} dt \quad \text{e} \quad (iii) \int_0^1 \sqrt{t^3} dt.$$

A primeira integral apresenta baixíssima convergência e a segunda converge mais lentamente do que a terceira. A obra referenciada aponta que a qualidade da convergência está diretamente ligada com a suavidade de  $g(t)$ : a função da primeira integral não é contínua em  $[0, 1]$ ; na segunda integral,  $\sqrt{t}$  é contínua em  $[0, 1]$ , mas a sua derivada não o é; na última integral,  $\sqrt{t^3}$  é contínua em  $[0, 1]$ , mas a segunda derivada desta função não o é. É evidente que a primeira função deveria ser integrada em dois intervalos separadamente.

Por outro lado, as singularidades de  $g(t)$  poderiam ser evitadas reescrevendo o integrando na forma  $w(t)g(t)$  como na Tabela 19 e depois identificando os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$ :

$$\begin{aligned} \text{(ii)} \quad \int_0^1 \sqrt{t} dt &= \int_0^1 (1-t)^0 (t-0)^{\frac{1}{2}} dt \rightarrow \text{Gauss-Jacobi com } g(t) = 1, \alpha = 0 \text{ e } \beta = \frac{1}{2} \\ \text{(iii)} \quad \int_0^1 \sqrt{t^3} dt &= \int_0^1 (1-t)^0 (t-0)^{\frac{3}{2}} dt \rightarrow \text{Gauss-Jacobi com } g(t) = 1, \alpha = 0 \text{ e } \beta = \frac{3}{2}. \end{aligned}$$

Nestes casos, como  $g(t)$  são funções constantes, o método de Gauss-Jacobi fornece resultados exatos, uma vez que, para  $r = 1$ , tem-se que  $g^{2r}(t) = g^2(t) = 0$ , ou seja, o erro  $E_{r,g} = 0$ .

Há ainda a questão dos algoritmos para as integrais de intervalo limitado que determinou a elaboração da Tabela 20. A quadratura de Gauss-Jacobi deve ser usada somente nos casos em que  $\alpha \neq \beta$ , uma vez que as outras quadraturas são elaboradas especificamente para determinados valores de  $\alpha$  e  $\beta$ , cujos algoritmos são mais eficientes do que o de Gauss-Jacobi: os algoritmos de funções peso de Chebyshev possuem fórmulas para gerar diretamente os zeros e basicamente efetuam um somatório para a integração (Figuras 14, 15, 24 e 25); os zeros de Gauss-Legendre e Gauss-Gegenbauer,  $0 < \mu < 1$ ,  $\mu \neq \frac{1}{2}$ , possuem boas aproximações trigonométricas e o método de Newton é usado somente  $\lfloor (r+1)/2 \rfloor$  vezes (Figuras 9 e 16); os zeros para Gauss-Jacobi são todos refinados através do método de Newton com aproximações iniciais mais grosseiras (Figura 13) e, além disto, as fórmulas deste algoritmo requerem mais adições e multiplicações do que nos outros casos. Concluindo, fica claro que usar Gauss-Jacobi nos casos em que  $\alpha = \beta$  seria contraproducente diante das outras quadraturas. O mesmo procede para Gauss-Gegenbauer quando  $\alpha = \beta = 0$  ou  $\alpha = \beta = \frac{1}{2}$  que seriam os casos das funções pesos de Chebyshev de 1ª espécie e Legendre.

Portanto, para escolher a quadratura mais convergente cujo algoritmo é mais eficiente basta reescrever o integrando na forma  $w(t)g(t)$  e, caso necessário, definir os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$ .

### 5.7.1 Método mais eficiente para integração numérica

Reunindo as conclusões sobre a quadratura melhor convergente e o respectivo algoritmo mais eficiente com a validação dos algoritmos para  $x_i$  e  $H_i$  (Seção 5.6), elaborou-se um algoritmo para identificar a quadratura com o respectivo método para cálculo dos zeros e coeficientes da forma mais eficiente, dados a função  $F(t) = w(t)g(t)$  e os parâmetros:  $c$ ,  $d$ ,  $\alpha$  e  $\beta$ .

```

1  se intervalo for  $[c, d]$  então
2    se  $\alpha = \beta$  então
3      se  $\alpha = 0$  então
4        quad_legendre com zero_h_legendre
5      senão se  $\alpha = -0,5$  então
6        quad_chebyshev_1 com zero_h_chebyshev_1
7      senão se  $\alpha = 0,5$  então
8        quad_chebyshev_2 com zero_h_chebyshev_2
9      senão
10       quad_gegenbauer com zero_h_gegenbauer
11     fim se
12   senão
13     quad_jacobi com zero_h_jacobi
14   fim se
15 senão se o intervalo for  $[c, \infty)$  então
16   se  $c = 0$  então
17     quad_laguerre_gen com matriz_laguerre_gen
18   senão
19     quad_laguerre com matriz_laguerre
20   fim se
21 senão {o intervalo será  $(-\infty, \infty)$ }
22   quad_hermite com matriz_hermite
23   fim se

```

Figura 53: Procedimento para escolha do método mais eficiente.

### 5.7.2 Casos especiais de integrando no infinito

Há casos de integrais com intervalos de integração semi-infinito ou duplamente infinito em que o integrando  $F(t)$  não tem nada a ver com a função peso, por exemplo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+t^2} dt \quad \text{e} \quad \int_1^{\infty} \frac{\cos(\pi t/2)}{\sqrt{t}} dt.$$

Nestas situações, deve-se usar  $g(t) = \frac{F(t)}{w(t)}$ , ou seja,

$$g(t) = \frac{e^{t^2}}{(1+t^2)} \quad \text{e} \quad g(t) = \frac{e^t \cos(\pi t/2)}{\sqrt{t}},$$

para ter

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} \frac{e^{t^2}}{(1+t^2)} dt \quad \text{e} \quad \int_1^{\infty} e^{-t} \frac{e^t \cos(\pi t/2)}{\sqrt{t}},$$

nas quadraturas de Gauss-Hermite e Gauss-Laguerre, respectivamente. Este tratamento foi realizado, por exemplo, nos experimentos de Gauss-Hermite (Subseção 5.4.5). Entretanto, há ressalvas: o valor de  $r$  não pode ser muito alto – os valores dos zeros do

polinômio de Hermite (pertencentes a  $(-\infty, \infty)$ ) crescerão em módulo à medida que  $r$  aumenta e  $e^{t^2}$  tenderá ao infinito rapidamente, levando a falhas nas avaliações de  $g(t)$  no somatório. O mesmo tipo de falha ocorrerá em Gauss-Laguerre e Gauss-Laguerre generalizada, pois seus zeros (pertencentes a  $(0, \infty)$ ) farão com que  $e^t$  tenda ao infinito. Experimentos executados com integrando deste tipo mostram que há falhas se  $r$  for maior que 380 em Gauss-Hermite e for maior que 190 no caso de Gauss-Laguerre. Conclui-se que as integrais de intervalos semi ou duplamente infinito que não apresentam as funções pesos de Hermite e de Laguerre<sup>4</sup> correm o risco de não serem resolvidas com as respectivas quadraturas de Gauss.

Todavia, é possível evitar tais restrições nestas quadraturas, aproximando a integral dada por uma soma de integrais com limites finitos:

$$\int_0^\infty F(t) dt = \int_0^{d_1} F(t) dt + \int_{d_1}^{d_2} F(t) dt + \dots + \int_{d_{n-1}}^{d_n} F(t) dt, \quad (5.10)$$

sendo interrompida na  $n$ -ésima integral quando esta estiver próxima de zero. Cada uma das integrais é calculada com a quadratura de Gauss de limite  $[c, d]$ . Para integrais com limite duplamente infinito:

$$\int_{-\infty}^\infty F(t) dt = \int_{-\infty}^0 F(t) dt + \int_0^\infty F(t) dt,$$

recaindo no caso anterior da equação (5.10).

A obra de Davis e Rabinowitz (1984) apresenta uma bela explanação sobre aproximações de integrais com intervalo infinito, inclusive mostrando integrais em tais intervalos que podem ser calculadas com uso de integrais com intervalos finitos por meio de mudanças de variáveis.

---

<sup>4</sup>O mesmo se dá para vários valores de  $\alpha$  em Gauss-Laguerre generalizada.

## 6 *Quadratura iterativa*

Este capítulo apresenta a técnica da quadratura iterativa. Trata-se de um esquema de integração iterativo e não adaptativo, proposto por Campos (2007) para a quadratura de Gauss-Legendre. Este método pode ser aplicado com sucesso às outras quadraturas de Gauss, conforme mostram os experimentos realizados.

### 6.1 Algoritmo gauss\_iterativo

As Tabelas 27 a 42 da Seção 5.4 mostram que as quadraturas de Gauss tendem a aproximar as integrais com grau crescente de precisão à medida que o número de zeros  $r$  aumenta. Isto era esperado tendo em vista os teoremas que garantem as convergências (Teoremas 4.4, 4.5, 4.6 e observações). Ilustrando melhor este fato, a Tabela 21 exhibe o

$$\text{erro relativo}_i = \frac{|\text{resultado analítico} - \text{integral}_i|}{|\text{resultado analítico}|}$$

e a

$$\text{diferença relativa}_i = \frac{|\text{integral}_i - \text{integral}_{i-1}|}{|\text{integral}_i|}$$

entre dois resultados consecutivos do experimento (i) da Subseção 5.4.2:  $\int_0^{2\pi} t \text{sen}(t) dt$  para  $2 \leq r \leq 14$ .

Tabela 21: Comparação entre diferença e erro relativos.

$r$	$integral$	erro relativo	diferença relativa
2	-11,061607516437542	$1,000 \times 10^0$	—
3	-5,524853467979552	$1,207 \times 10^{-1}$	$1,002 \times 10^0$
4	-6,333516813159698	$8,011 \times 10^{-3}$	$1,277 \times 10^{-1}$
5	-6,281330066094324	$2,953 \times 10^{-4}$	$8,308 \times 10^{-3}$
6	-6,283228993156375	$6,953 \times 10^{-6}$	$3,022 \times 10^{-4}$
7	-6,283184591799723	$1,139 \times 10^{-7}$	$7,067 \times 10^{-6}$
8	-6,283185315806970	$1,373 \times 10^{-9}$	$1,152 \times 10^{-7}$
9	-6,283185307099724	$1,271 \times 10^{-11}$	$1,386 \times 10^{-9}$
10	-6,283185307180163	$9,174 \times 10^{-14}$	$1,280 \times 10^{-11}$
11	-6,283185307179575	$1,838 \times 10^{-15}$	$9,358 \times 10^{-14}$
12	-6,283185307179582	$7,068 \times 10^{-16}$	$1,131 \times 10^{-15}$
13	-6,283185307179578	$1,272 \times 10^{-15}$	$5,654 \times 10^{-16}$
14	-6,283185307179584	$4,241 \times 10^{-16}$	$8,481 \times 10^{-16}$

Verifica-se pela Tabela 21 que a diferença relativa está bem próxima do erro da iteração anterior, isto é,

$$\text{diferença relativa}_i \approx \text{erro relativo}_{i-1}.$$

Por exemplo, a diferença relativa em  $r = 4$ , é de  $1,277 \times 10^{-1}$  que é muito próxima do erro relativo em  $r = 3$ , dado por  $1,207 \times 10^{-1}$ . A fim de evidenciar esta aproximação, apresenta-se os gráficos de

$$r \times \log_{10}|\text{erro relativo}| \quad \text{e} \quad r \times \log_{10}|\text{diferença relativa}|$$

para todos experimentos da Seção 5.4:

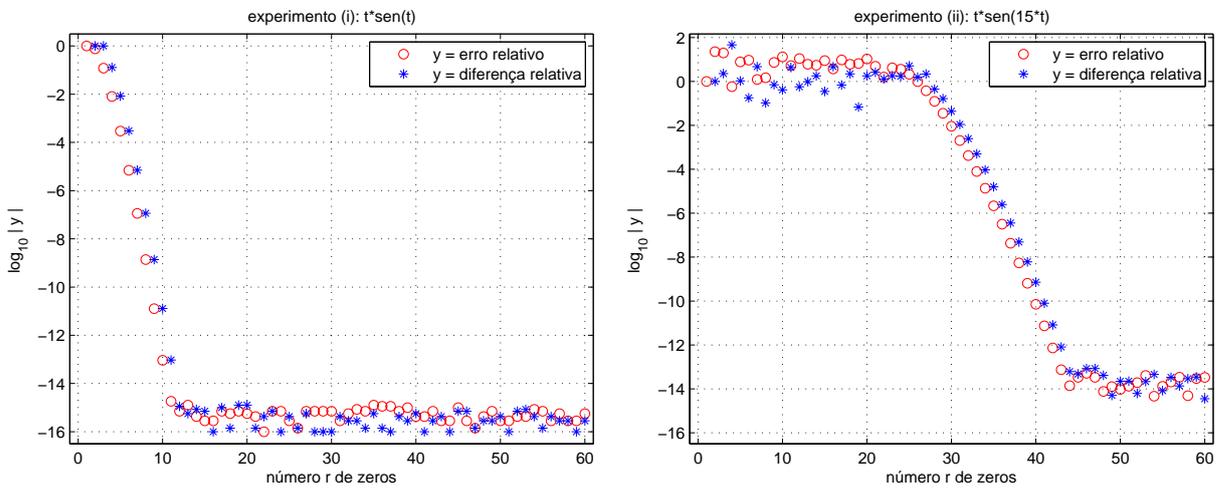


Figura 54: Diferença e erro relativos em Gauss-Legendre.

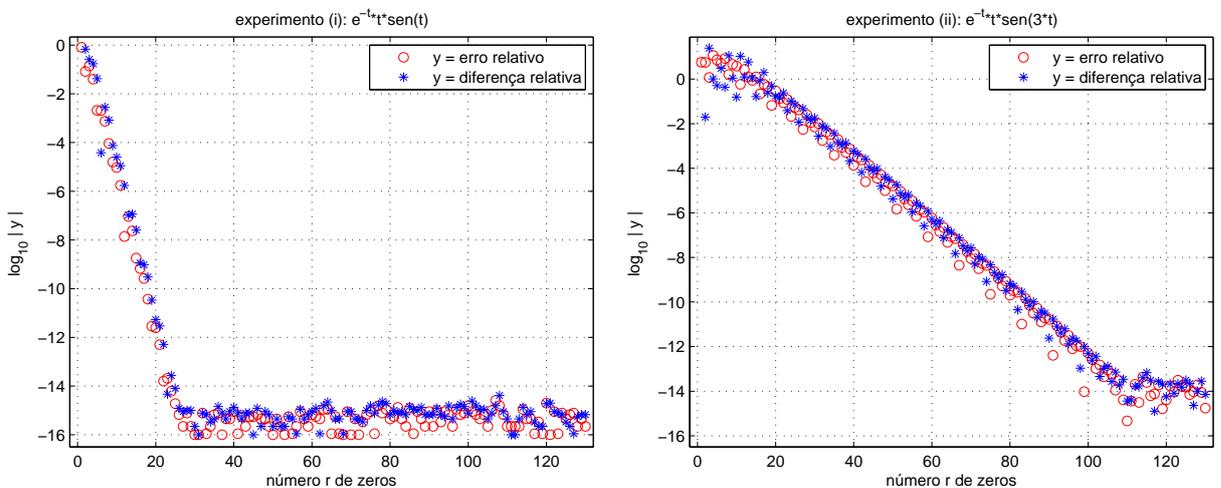


Figura 55: Diferença e erro relativos em Gauss-Laguerre generalizada.

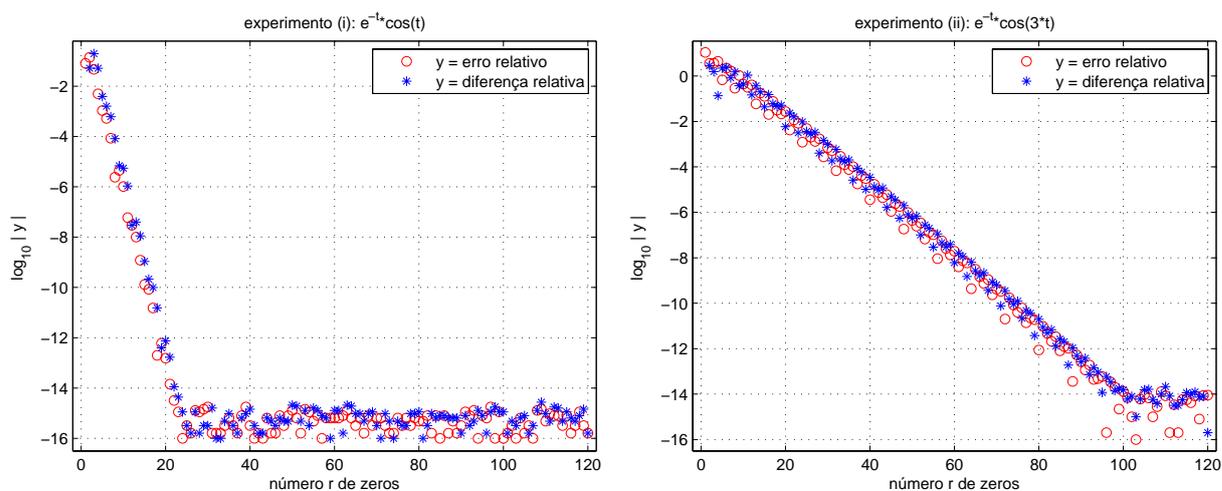


Figura 56: Diferença e erro relativos em Gauss-Laguerre.

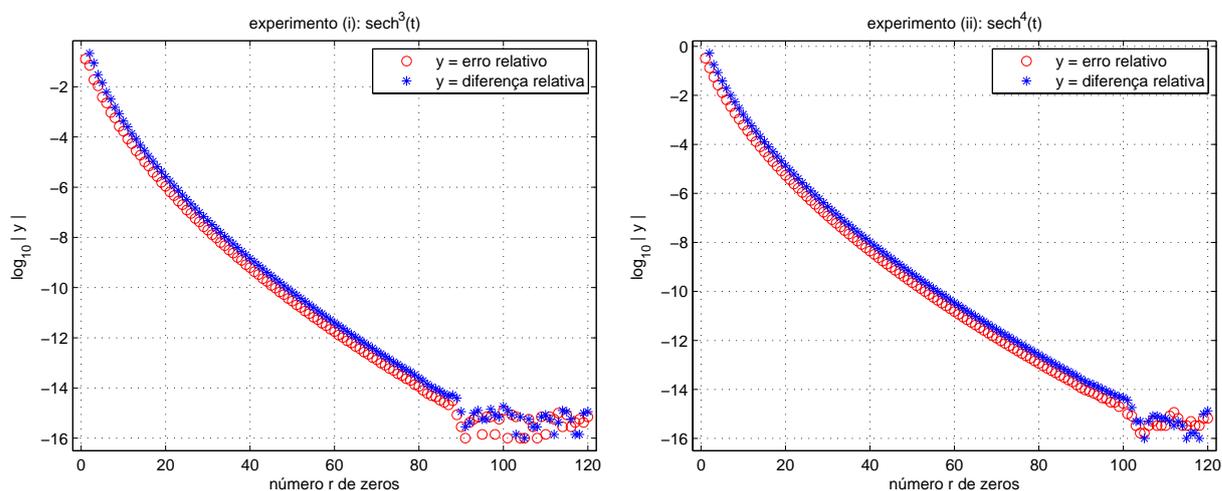


Figura 57: Diferença e erro relativos em Gauss-Hermite.

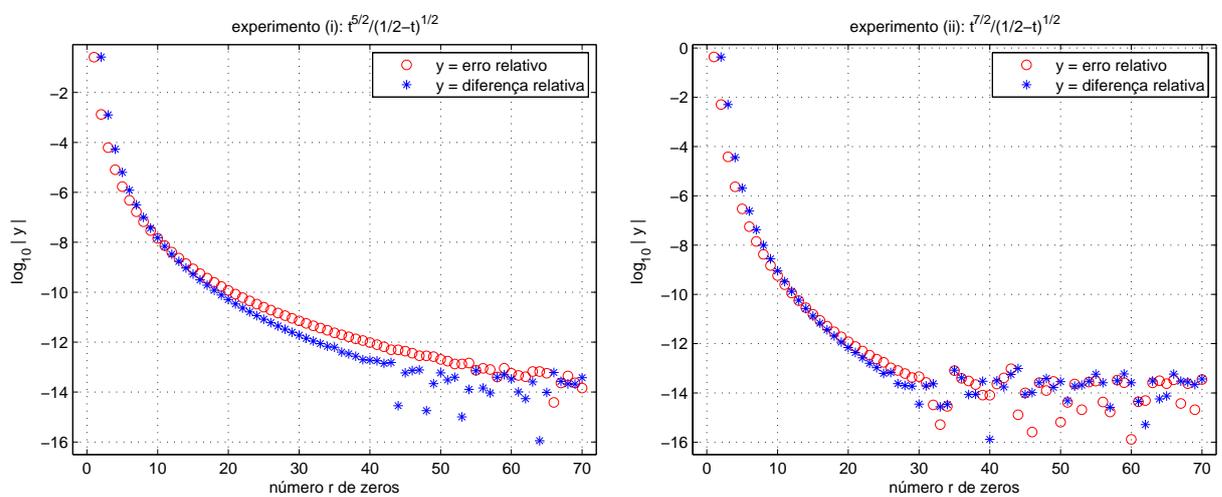


Figura 58: Diferença e erro relativos em Gauss-Jacobi.

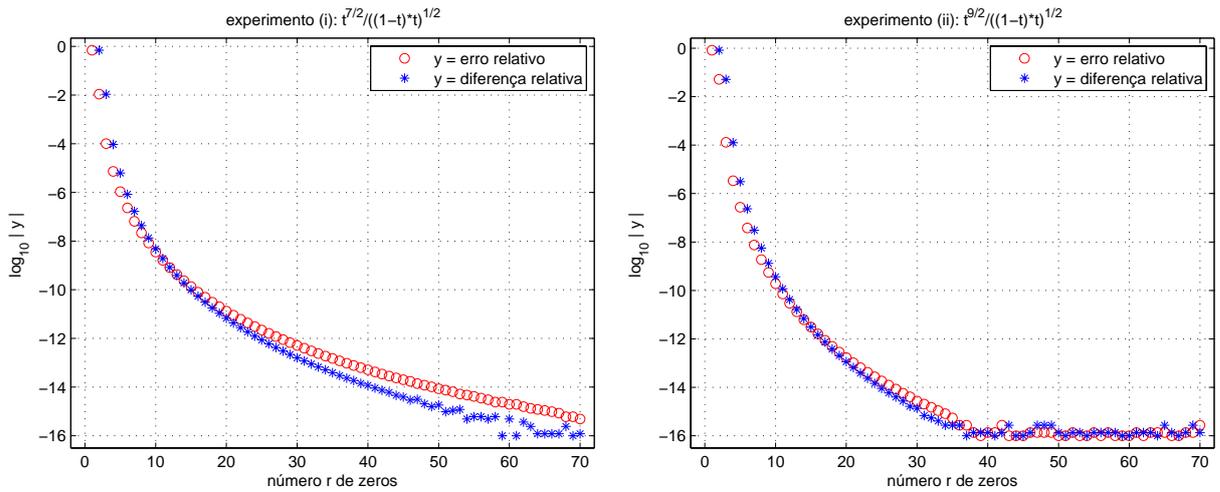


Figura 59: Diferença e erro relativos em Gauss-Chebyshev de 1ª espécie.

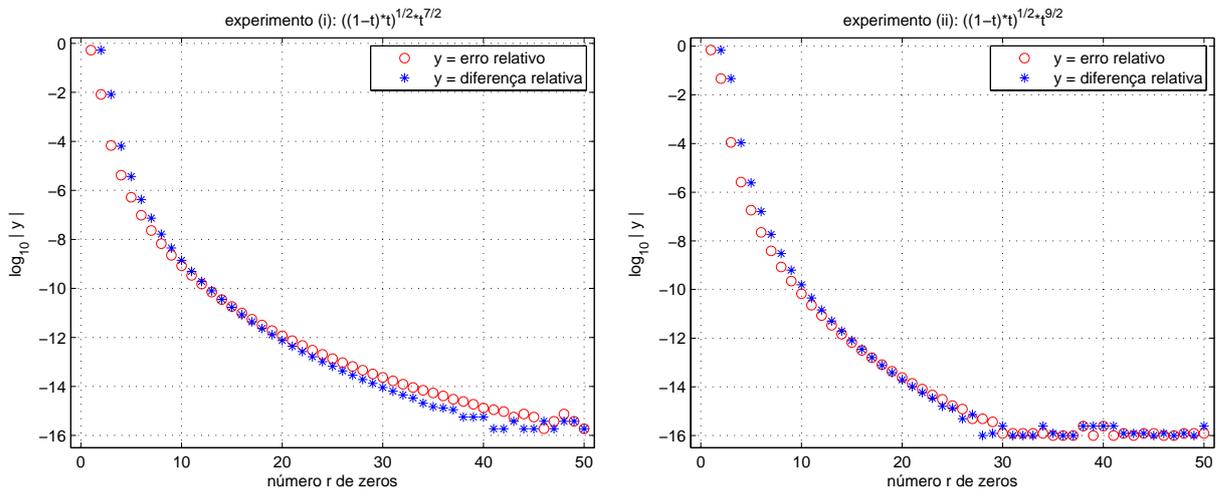


Figura 60: Diferença e erro relativos em Gauss-Chebyshev de 2ª espécie.

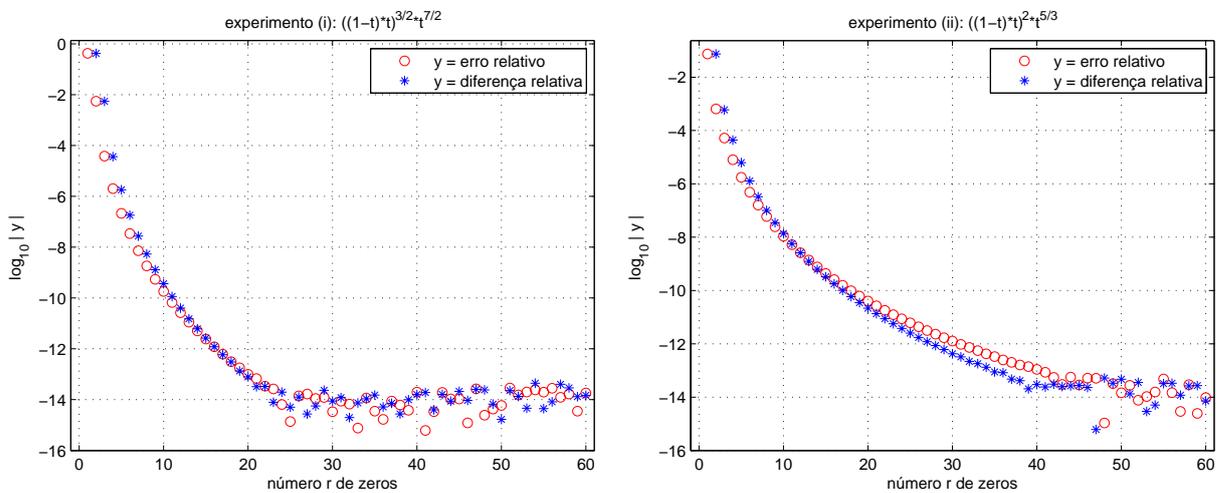


Figura 61: Diferença e erro relativos em Gauss-Gegenbauer.

Além de evidenciarem que a diferença relativa se aproxima do erro relativo anterior, as Figuras 54 a 61 mostram que a partir de um determinado valor de  $r$ , o resultado da quadratura *integral* estabiliza em torno na precisão do computador (aproximadamente  $10^{-16}$ ). Por exemplo, no caso das duas implementações de Gauss-Legendre (Figura 54), o número  $r$  necessário de zeros para esta precisão estava em torno de  $r = 12$  e  $r = 44$ . Nota-se também que quando o integrando  $w(t)g(t)$  de uma quadratura tornava-se mais oscilatório, o número  $r$  para a precisão de  $10^{-16}$  aumentava, como mostram as Figuras 54, 55 e 56. Contudo, uma vez que a diferença relativa entre valores de  $r$  consecutivos<sup>1</sup> se aproxima do erro antecessor, nota-se que o mesmo ocorre para valores não consecutivos, como indica a Tabela 22.

Tabela 22: Diferença e erro relativos com valores de  $r$  não consecutivos.

$r$	<i>integral</i>	erro relativo	dif. relativa
3	-5,524853467979552	$1,207 \times 10^{-1}$	—
5	-6,281330066094324	$2,953 \times 10^{-4}$	$1,204 \times 10^{-1}$
8	-6,283185315806970	$1,373 \times 10^{-9}$	$2,953 \times 10^{-4}$
13	-6,283185307179578	$1,272 \times 10^{-15}$	$1,373 \times 10^{-9}$
21	-6,283185307179584	$4,241 \times 10^{-16}$	$8,481 \times 10^{-16}$
34	-6,283185307179582	$7,068 \times 10^{-16}$	$2,827 \times 10^{-16}$
55	-6,283185307179582	$7,068 \times 10^{-16}$	$0,000 \times 10^0$

Mediante todas constatações de que a diferença relativa é um bom estimador para o erro cometido na integração anterior<sup>2</sup>, Campos (2007) apresenta um algoritmo para o cálculo da integral definida de uma função por meio da quadratura de Gauss-Legendre utilizando um esquema iterativo e não-adaptativo aliado à seqüência de Fibonacci:

”Inicialmente, a integral é calculada com  $n = 8$  pontos e depois com  $n = 13$  pontos. Se a diferença relativa entre os dois valores da integral for menor ou igual a uma dada tolerância então o processo termina. Caso contrário, o valor de  $n$  é incrementado, seguindo uma série de Fibonacci, e a integral é calculada novamente. O processo repete até que a diferença relativa entre os dois últimos valores da integral seja menor ou igual à tolerância predefinida” ou quando atingir o número máximo de iterações dado.<sup>3</sup>

Denomina-se por *quadratura iterativa* a quadratura obtida por meio do processo iterativo apontado acima. Com base no algoritmo citado por Campos, apresenta-se um algoritmo iterativo para todas quadraturas de Gauss. Os parâmetros de entrada da quadratura iterativa são a tolerância *toler*, o número máximo de iterações *itermax*, os limites de integração e os parâmetros associados ( $\alpha$ ,  $\beta$  ou  $\mu$ ) quando necessários. A função  $g(t)$

<sup>1</sup> $r_i = r_{i-1} + 1$

<sup>2</sup>Esta estimativa está fundamentada na aproximação em (1.2).

<sup>3</sup>De acordo com a notação adotada, deve-se entender *n pontos* por *r zeros*.

deve ser especificada de acordo com a linguagem de programação escolhida. Os parâmetros de saída são o resultado da quadratura iterativa  $integral\_iter$  e a menor diferença relativa obtida  $delta$ .

```

Algoritmo gauss_iterativo
{Objetivo Integrar  $F(t) = w(t)g(t)$  iterativamente por uma das quadraturas de Gauss}
parâmetros de entrada  $toler$  e  $itermax$  {tolerância e número máximo de iterações}
parâmetros de entrada adicionais  $c, d, \alpha, \beta$  ou  $\mu$  {parâmetros da quadratura}
parâmetros de saída  $integral\_iter$  e  $delta$ 
{valor da integral e menor diferença relativa obtida}
início algoritmo
1    $iter \leftarrow 1; r1 \leftarrow 5; r2 \leftarrow 8$ 
2    $int \leftarrow$  quadratura de Gauss( $c, d, \alpha, \beta, \mu$ ) (Figuras 19 a 26)
3   escreva  $iter, r2, int$ 
4   repita {sucessivos cálculos das integrais}
5      $iter \leftarrow iter + 1; r \leftarrow r1 + r2;$ 
6      $integral\_iter \leftarrow$  quadratura de Gauss( $c, d, \alpha, \beta, \mu$ ) (Figuras 19 a 26)
7     se  $integral\_iter \neq 0$  então
8        $delta \leftarrow |(integral\_iter - int)/(integral\_iter)|$ 
9     senão
10       $delta \leftarrow |(integral\_iter - int)|$ 
11    fim se
12    escreva  $iter, r, integral\_iter, delta$ 
13    se  $delta \leq toler$  ou  $iter = itermax$  então interrompa
14    fim se
15     $int \leftarrow integral\_iter; r1 \leftarrow r2; r2 \leftarrow r$ 
16  fim repita
fim algoritmo

```

Figura 62: Algoritmo para quadratura iterativa.

## 6.2 Programa QUAD\_ITER

O algoritmo para quadratura iterativa pode ser usado com qualquer algoritmo que forneça um resultado de integração via quadratura de Gauss (linhas 2 e 6 da Figura 62). Denomina-se por QUAD\_ITER o programa que calcula a integral por meio da quadratura iterativa usando os algoritmos para integração e os algoritmos para zeros e coeficientes segundo o esquema da Figura 53.

Com o QUAD\_ITER são realizados experimentos com integrais cujas soluções são não triviais. As integrais de intervalo finito são:

$$\begin{aligned}
 \text{(i)} \quad & \int_0^{10} e^{-t^2} dt, & \text{(ii)} \quad & \int_{-3}^4 \frac{(4-t) \operatorname{sen}(e^{2t})}{\sqrt{t+3}} dt, & \text{(iii)} \quad & \int_{-2}^{10} \frac{\cos(t^3) \operatorname{sen}(3t^2)}{\sqrt{(10-t)(t+2)}} dt, \\
 \text{(iv)} \quad & \int_0^9 \sqrt{(9-t)t} \cos(e^t) dt, & \text{(v)} \quad & \int_{-1}^8 \frac{e^{\operatorname{sen}(5t^2)}}{\sqrt[5]{(8-t)(t+1)}} dt.
 \end{aligned}$$

As integrais de intervalo semi-infinito e duplamente infinito são:

$$(vi) \int_2^{\infty} \frac{2e^{-t^2}}{\sqrt{\pi}} dt \quad (\text{complementar da função Erro (Abramowitz, 1972)}),$$

$$(vii) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2(t^2+1)} t^4 dt.$$

Primeiramente, reescreve-se o integrando na forma  $w(t)g(t)$  segundo a Tabela 19 ficando definida quadratura com os respectivos algoritmos por intermédio do esquema na Figura 53.

$$(i) \int_0^{10} (10-t)^0 (t-0)^0 e^{-t^2} dt \rightarrow \text{Gauss-Legendre, } g(t) = e^{-t^2},$$

$$(ii) \int_{-3}^4 (4-t)(t+3)^{-\frac{1}{2}} \text{sen}(e^{2t}) dt \rightarrow \text{Gauss-Jacobi, } g(t) = \text{sen}(e^{2t}), \alpha = 1, \beta = -\frac{1}{2},$$

$$(iii) \int_{-2}^{10} (10-t)^{-\frac{1}{2}} (t+2)^{-\frac{1}{2}} \cos(t^3) dt \rightarrow \text{Gauss-Chebyshev de 1ª espécie, } g(t) = \cos(t^3),$$

$$(iv) \int_0^9 (9-t)^{\frac{1}{2}} (t-0)^{\frac{1}{2}} \cos(e^t) dt \rightarrow \text{Gauss-Chebyshev de 2ª espécie, } g(t) = \cos(e^t),$$

$$(v) \int_{-1}^8 (8-t)^{-\frac{1}{3}} (t+1)^{-\frac{1}{3}} e^{\text{sen}(5t^2)} dt \rightarrow \text{Gauss-Gegenbauer, } g(t) = e^{\text{sen}(5t^2)}, \mu = -\frac{3}{10},$$

$$(vi) \int_2^{\infty} e^{-t} \frac{2e^{-t^2+t}}{\sqrt{\pi}} dt \rightarrow \text{Gauss-Laguerre, } g(t) = \frac{2e^{-t^2+t}}{\sqrt{\pi}},$$

$$(vii) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} e^{-t^4} t^4 dt \rightarrow \text{Gauss-Hermite, } g(t) = e^{-t^4} t^4,$$

Uma vez encontrada a função  $g(t)$  e parâmetros de entrada adicionais ( $c, d, \alpha, \beta, \mu$ ) é realizada a implementação do algoritmo da Figura 62 com os parâmetros  $itermax = 20$ ,  $toler = 10^{-10}$  nos experimentos (ii) e (v) e  $toler = 10^{-13}$  nos demais. Os parâmetros de saída a cada iteração, juntamente com o gráfico de cada um dos integrandos, estão apresentados nas Figuras 63 a 69.

```

-----
iter  r      integral_iter      Dif. relativa
  1   8      0.8877440105291001      -
  2  13      0.8862483444448986      1.688e-003
  3  21      0.8862269250054288      2.417e-005
  4  34      0.8862269254527531      5.048e-010
  5  55      0.8862269254527526      5.011e-016

```

```

integral_iter = 0.8862269254527526
delta = 5.011e-016
-----

```

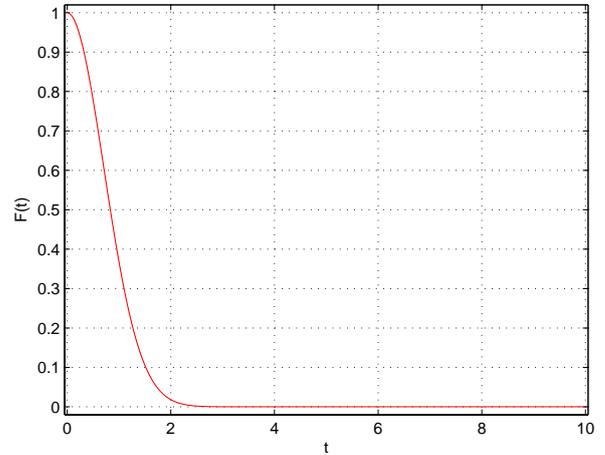


Figura 63:  $\int_0^{10} e^{-t^2} dt$  via Gauss-Legendre.

```

-----
iter  r      integral_iter      Dif. relativa
  1   8      -0.07812851991324989      -
  2  13      3.266550305591523      1.024e+000
  3  21      2.259053399002714      4.460e-001
  4  34      1.933970499994798      1.681e-001
  5  55      1.495048618372415      2.936e-001
  6  89      2.000203214087314      2.526e-001
  7 144      2.200742383334870      9.112e-002
  8 233      2.185387239928678      7.026e-003
  9 377      2.127400731798045      2.726e-002
 10 610      2.155664854199735      1.311e-002
 11 987      2.094246640598142      2.933e-002
 12 1597     2.119092645200231      1.172e-002
 13 2584     2.115832953554795      1.541e-003
 14 4181     2.115832953560206      2.557e-012

```

```

integral_iter = 2.115832953560206
delta = 2.557e-012
-----

```

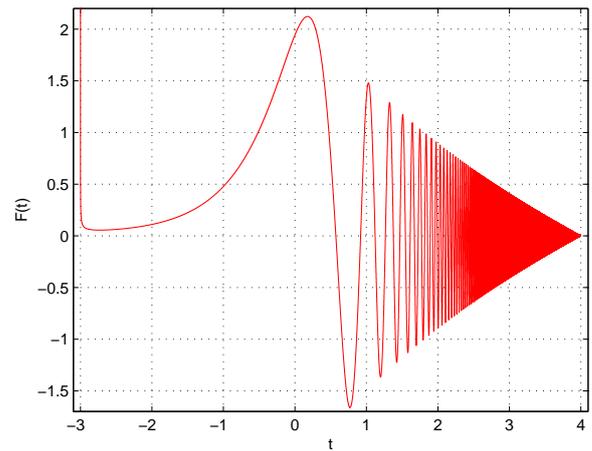


Figura 64:  $\int_{-3}^4 \frac{(4-t) \operatorname{sen}(e^{2t})}{\sqrt{t+3}} dt$  via Gauss-Jacobi.

```

-----
iter  r      integral_iter  Dif. relativa
  1   8      0.1473926750513661  -
  2  13     -0.2196673041405459  1.671e+000
  3  21      0.3020613025855041  1.727e+000
  4  34    -0.008064911290441311  3.845e+001
  5  55      0.10697865603653440  1.075e+000
  6  89      0.29448193247610280  6.367e-001
  7 144      0.02829372405781045  9.408e+000
  8 233      0.08415675489128213  6.638e-001
  9 377      0.07151373050777928  1.768e-001
10 610      0.07061369631953249  1.275e-002
11 987      0.07061369631954752  2.128e-013
12 1597     0.07061369631955113  5.110e-014

integral_iter = 0.070613696319551125
delta = 5.11e-014
-----

```

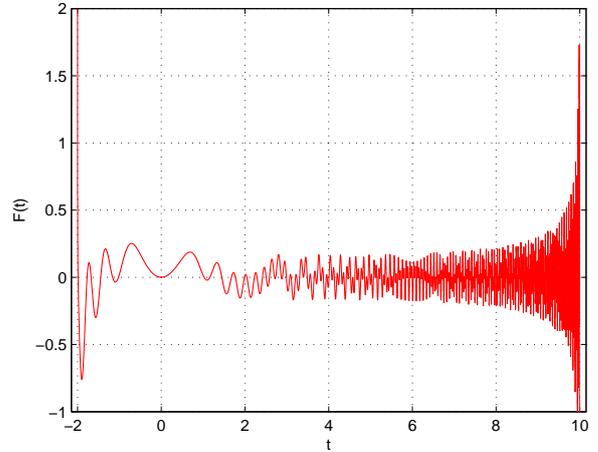


Figura 65:  $\int_{-2}^{10} \frac{\cos(t^3) \operatorname{sen}(3t^2)}{\sqrt{(10-t)(t+2)}} dt$  via Gauss-Chebyshev de 1ª espécie.

```

-----
iter  r      integral_iter  Dif. relativa
  1   8     -8.120133006394841  -
  2  13     13.74342196928454  1.591e+000
  3  21      3.768372675929315  2.647e+000
  4  34      0.5900735431030932  5.386e+000
  5  55     -1.188719647296060  1.496e+000
  6  89     -5.242270338369502  7.732e-001
  7 144      0.01037659906778598  5.042e+002
  8 233     -1.646536368853961  9.937e-001
  9 377     -0.2846686251253396  4.784e+000
10 610     -1.772020381070121  8.394e-001
11 987     -0.7287185414652631  1.432e+000
12 1597    -1.058531610407369  3.116e-001
13 2584    -1.295755986305227  1.831e-001
14 4181    -1.116439389782778  1.606e-001
15 6765    -1.094151633214090  2.037e-002
16 10946   -1.094151633214263  1.577e-013
17 17711   -1.094151633214167  8.686e-014

integral_iter = -1.094151633214167
delta = 8.686e-014
-----

```

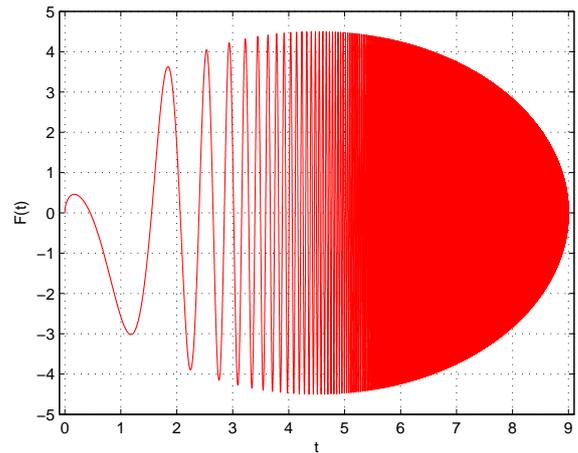


Figura 66:  $\int_0^9 \sqrt{9-t} t \cos(e^t) dt$  via Gauss-Chebyshev de 2ª espécie.

```

-----
iter  r    integral_iter    Dif. relativa
  1   8    4.702035534494718      -
  2  13    5.554806354605710    1.535e-001
  3  21    6.108773515170135    9.068e-002
  4  34    8.266131090854186    2.610e-001
  5  55    6.738412587412456    2.267e-001
  6  89    6.686016750504642    7.837e-003
  7 144    7.391653908053595    9.546e-002
  8 233    7.446910221464901    7.420e-003
  9 377    7.441574541688036    7.170e-004
 10 610    7.442040608309982    6.263e-005
 11 987    7.442032813203407    1.047e-006
 12 1597   7.442032811837043    1.836e-010
 13 2584   7.442032811802715    4.613e-012

```

```

integral_iter = 7.442032811802715
delta = 4.613e-012

```

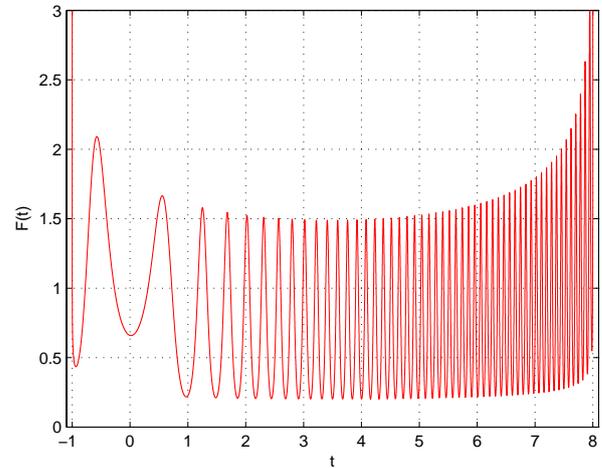


Figura 67:  $\int_{-1}^8 \frac{e^{\text{sen}(5t^2)}}{\sqrt[5]{(8-t)(t+1)}} dt$  via Gauss-Gegenbauer.

```

-----
iter  r    integral_iter    Dif. relativa
  1   8    0.004701341592952040    -
  2  13    0.004676855664743710    5.236e-003
  3  21    0.004677763949936841    1.942e-004
  4  34    0.004677735104366011    6.167e-006
  5  55    0.004677734981081800    2.636e-008
  6  89    0.004677734981047278    7.380e-012
  7 144    0.004677734981047266    2.411e-015

```

```

integral_iter = 0.004677734981047266
delta = 2.411e-015

```

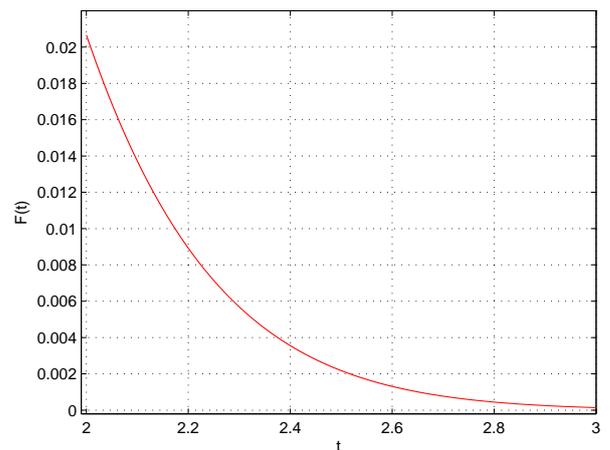


Figura 68:  $\int_2^{\infty} \frac{2e^{-t^2}}{\sqrt{\pi}} dt$  via Gauss-Laguerre.

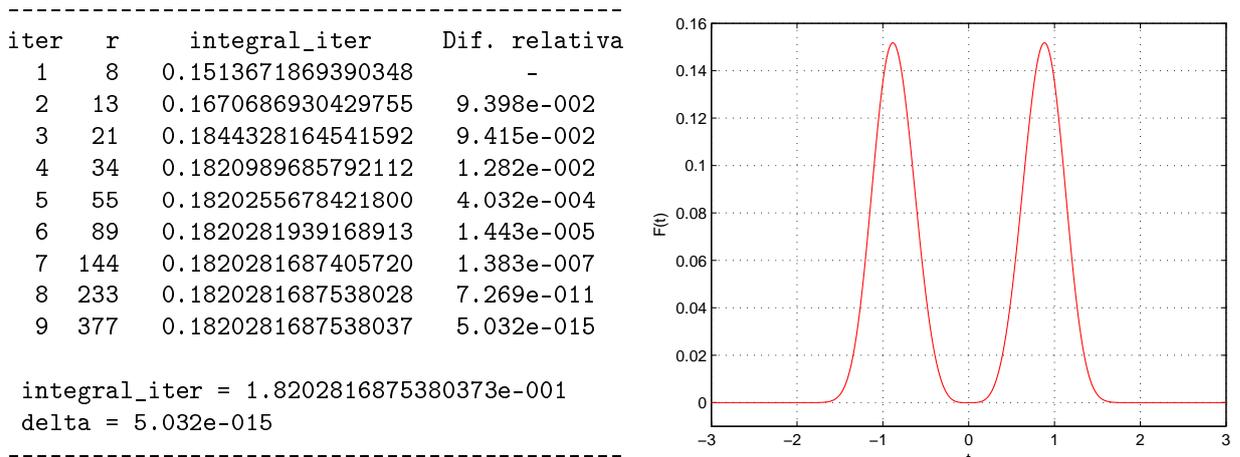


Figura 69:  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2(t^2+1)}t^4 dt$  via Gauss-Hermite.

### 6.2.1 Um caso especial

Os resultados da quadratura iterativa *integral\_iter*, *delta* e parâmetros de saída a cada iteração devem ser observados em conjunto caso o número máximo de iterações seja atingido com *delta* relativamente grande. Isto ocorrerá sempre que a integral  $\int_a^b F(t) dt$  for nula:

$$\int_0^{2\pi} \text{sen}(t) dt = \cos(0) - \cos(2\pi) = 0.$$

No presente caso, o programa QUAD\_ITER indicaria a quadratura de Gauss-Legendre com  $g(t) = \cos(t)$ ,  $c = 0$ ,  $d = 2\pi$  e os parâmetros de saída com  $\text{toler} = 10^{-13}$  e  $\text{itermax} = 8$  seriam:

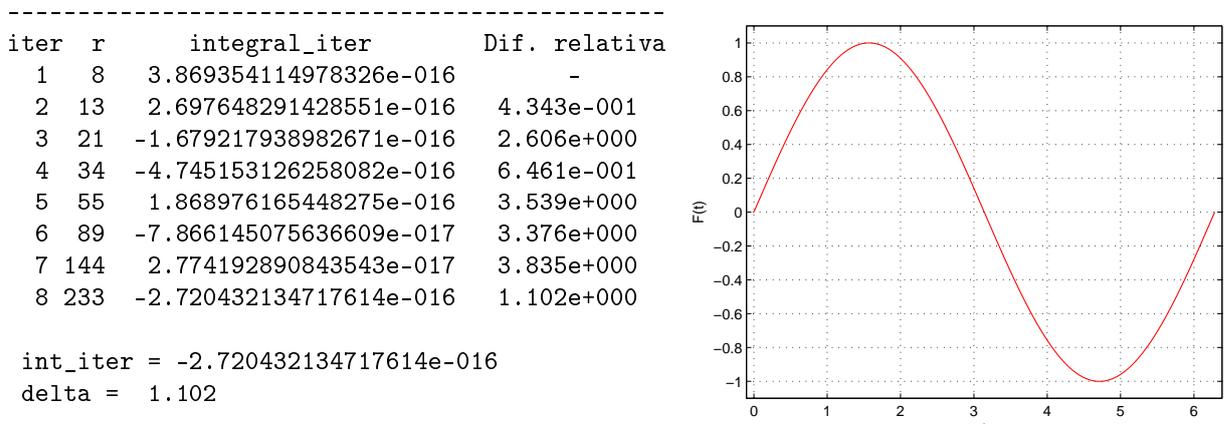


Figura 70: Integral nula via QUAD\_ITER.

Numa primeira análise, o parâmetro *delta* mostraria que o resultado não tem uma boa margem de confiança. Contudo, observando as iterações sucessivas vê-se claramente

---

que a integral converge para zero. Portanto, caso *delta* seja insignificante, até para valores grandes de  $r$ , é necessário fazer uma análise conjunta dos resultados para verificar se é o caso da integral nula. Caso a *integral\_iter* não convirja, pode ser que a quadratura necessite de um número maior para  $r$  e então, *itermax* deverá ser aumentado. Por outro lado, se a integral for de limites infinitos, é possível que a quadratura não convirja e, nesse caso, devem ser verificados os Teoremas 4.5 e 4.6 sobre convergência.

## 7 *Conclusões gerais e futuros trabalhos*

Este trabalho foi dividido em duas partes distintas: a primeira é teórica e dedicada aos polinômios ortogonais e à quadratura de Gauss. A segunda diz respeito ao emprego desta teoria na elaboração de algoritmos para integração numérica. Nela discutiu-se também a eficácia de diferentes algoritmos e apresentou-se um esquema de integração iterativo e não-adaptativo denominado por quadratura iterativa.

No presente capítulo apresentam-se as conclusões, contribuições e propostas para futuros trabalhos.

### 7.1 *Contribuição da quadratura iterativa*

A derivada de alta ordem presente nas fórmulas de erro das quadraturas de Gauss tornam estas fórmulas um parâmetro de precisão de pouca utilidade. Por exemplo, ao estimar o erro na aproximação de  $\int_{-1}^1 \frac{t \cos(3t)}{\sqrt{1-t^2}} dt$  com  $r = 5$  zeros via Gauss-Chebyshev de 1ª espécie pela sua fórmula de erro

$$E_{r,g} = \frac{2\pi}{2^{10}(10)!} \frac{d^{10}}{dt^{10}} \{t \cos(3t)\}, \quad t \in (-1, 1),$$

o cálculo da derivada poderia ser mais trabalhoso do que a própria aproximação. Por outro lado, sabendo que a quadratura de Gauss converge, tem-se que quanto maior for o número  $r$  de zeros, melhor será a precisão do resultado. Mas quantos zeros são necessários para a precisão requerida? No caso dos experimentos de Gauss-Legendre, o número de zeros necessário para se ter uma precisão com aproximadamente 15 dígitos estava em torno de 12 e 44, respectivamente (Figura 54). Em outros experimentos, também com precisão de 15 dígitos, o valor de  $r$  necessário foi mais alto, por volta de 100, para Gauss-Hermite (Figura 57). E além disso, para integrandos mais oscilatórios, o número  $r$  aumentava consideravelmente (Figuras 64 a 67). Por isto, um algoritmo que calcula uma integral via

quadratura de Gauss, desprovido de um bom estimador para o erro cometido, fornece um resultado que nem sempre pode ser confiável na medida do esperado. Todavia, existem problemas de cálculos de integrais que não necessitam de uma precisão tão alta, demandando um valor mais baixo para  $r$ , o que implica em um tempo menor de execução. Portanto, o valor ideal para o número  $r$  deve ser o menor possível capaz de atender à precisão requerida.

A quadratura iterativa é um esquema iterativo e não-adaptativo que calcula a integral seguindo a seqüência de Fibonacci até que a diferença relativa entre os dois últimos valores da integral seja menor ou igual a uma tolerância predefinida ou quando atingir o número máximo de iterações. Este esquema iterativo objetiva fornecer um resultado mais concreto quando comparado com o método original que, por sua vez, fornece um resultado apenas com o parâmetro  $E_{r,g}$  para a precisão. Em Campos (2007) este esquema iterativo foi usado para a quadratura de Gauss-Legendre e este trabalho aplicou com êxito este esquema para todas as outras quadraturas de Gauss de medidas clássicas.

Desde que a quadratura convirja, este esquema iterativo também poderá ser usado especialmente naquelas quadraturas de alta convergência, em outras palavras, nas quadraturas de com grau máximo de precisão. A quadratura iterativa também pode ser usada no cálculo das integrais múltiplas.

## 7.2 Contribuições práticas deste trabalho

Duas contribuições práticas deste trabalho podem ser destacadas. A primeira é relacionada ao trabalho de Da Costa (1998). A segunda concretizou-se na criação do software QUAD\_ITER escrito em MATLAB.

O sistema INTEGREGRE elaborado por Da Costa (1998) é uma poderosa ferramenta usada na decisão da escolha do(s) algoritmo(s) para uma dada função integrando, sendo esta escolha baseada nas informações coletadas no processo de análise dessa função. Nele é possível calcular integrais mais complexas e que usualmente não seriam resolvidas pelos métodos de Gauss com medidas  $w(t)$  clássicas. Este sistema utiliza os algoritmos NR12, NR13 e NR14 (Press *et al.*, 1997) para o cálculo de  $x_i$  e  $H_i$  para as quadraturas de Gauss-Laguerre generalizada, Gauss-Hermite e Gauss-Jacobi, respectivamente. Tais algoritmos também usam o método de Newton como os que foram apresentados: **zero\_h\_laguerre\_gen**, **zero\_h\_hermite** e **zero\_h\_jacobi** e não diferem muito destes. Como foi mostrado, os dois primeiros são impraticáveis para valores grandes de

$r$  (Seção 5.6) e os algoritmos NR12 e NR13 também apresentam um número máximo de iterações. Portanto, assim como `zero_h_laguerre_gen` e `zero_h_hermite`, os algoritmos NR12 e NR13 deveriam ser preteridos por `matriz_laguerre_gen` e `matriz_hermite`. A opção por NR14, só deveria ser feita caso  $\alpha \neq \beta$ . Portanto, a título de sugestão, poder-se-ia acoplar ao INTEGRE a rotina da Figura 53 com os respectivos algoritmos, que identificaria o método mais adequado para a determinação dos zeros e coeficientes.

Reunindo o presente estudo sobre as quadraturas de Gauss com a quadratura iterativa, elaborou-se um software, denominado QUAD\_ITER em MATLAB para calcular uma integral  $F(t)$  em um intervalo finito  $[c, d]$ , semi-infinito  $[c, \infty)$  ou duplamente infinito  $(-\infty, \infty)$ . O QUAD\_ITER calcula diversos tipos de integrais, inclusive integrais sem antiderivada explícita e integrais impróprias. Ele poderá atuar como subrotina em outros programas que necessitem do cálculo de integrais. Alternativamente, este software também pode ser usado com fins educacionais na disciplina Cálculo Numérico.

## 7.3 Zeros e coeficientes da quadratura de Gauss

Primeiramente, ressalta-se que o estudo levantado sobre as propriedades dos polinômios ortogonais contribuiu efetivamente para elaboração dos algoritmos, principalmente para os zeros e coeficientes.

O cálculo dos zeros e coeficientes pela matriz de Jacobi, embora seja correntemente usado e mais elegante (Gautschi, 2003 e Gautschi, 1994), é computacionalmente mais caro do que os outros métodos apresentados (Figuras 9 a 16) que se mostraram muito mais velozes. Além disto, o método que usa a matriz de Jacobi não é, definitivamente, o mais preciso. Em casos especiais, como Gauss-Legendre, há meios mais precisos e mais eficientes, como mostra Swarztrauber (2002) ao comparar o método da matriz de Jacobi com outros dois métodos. Por outro lado, dentre os algoritmos apresentados, a matriz de Jacobi mostrou-se mais vantajosa nos casos das quadraturas de Gauss-Laguerre, Gauss-Laguerre generalizada e Gauss-Hermite porque os outros algoritmos falham a partir de um determinado valor de  $r$ .

Portanto, dentre os algoritmos para o cálculo dos zeros e coeficientes apresentados neste trabalho, é aconselhável utilizá-los segundo o esquema da Figura 53 que indica o uso da matriz de Jacobi apenas nos casos de Gauss-Laguerre, Gauss-Laguerre generalizada e Gauss-Hermite.

Finalmente, a localização destes zeros sobre o eixo real não diz respeito somente às quadraturas, eles possuem outros empregos tais como aplicações na eletrostática, na análise de frequência etc. (Bracciali e Andrade, 2006).

## 7.4 Comparações entre quadraturas

As fórmulas de erro da quadratura de Newton-Cotes fechada com  $r + 1$  pontos para a integral  $\int_c^d g(t) dt$ , sendo  $g(t)$  contínua em  $[c, d]$ , são do tipo (Isaacson e Keller, 1966):

$$E_{r+1} = \frac{h^{r+3} g^{(r+2)}(\xi)}{(r+2)!} \int_0^r s^2(s-1)\dots(s-r) ds, \quad \text{se } r \text{ for par, ou}$$

$$E_{r+1} = \frac{h^{r+2} g^{(r+1)}(\xi)}{(r+1)!} \int_0^r s(s-1)\dots(s-r) ds, \quad \text{se } r \text{ for ímpar, com } h = \frac{d-c}{r},$$

cujo grau de precisão pode ser no máximo  $r + 1$ , assim como as fórmulas abertas com  $r + 1$  pontos. As fórmulas compostas de Newton-Cotes basicamente subdividem o intervalo de integração aplicando o método em cada subintervalo separadamente com o intuito de minimizar o erro. Apesar disto, o erro das fórmulas compostas também possuem grau, no máximo,  $r + 1$ . Com isto, espera-se que as quadraturas de Gauss sejam mais eficientes, pois com  $r + 1$  pontos elas terão grau  $2r + 1$ . As quadraturas de Gauss que se ajustam ao integrando de Newton-Cotes são as que têm medida de Jacobi com  $\alpha, \beta \geq 0$ . A fim de comparar graficamente a eficiência entre a regra do 1/3 de Simpson composta e Gauss-Legendre usando o mesmo número de pontos, apresenta-se o gráfico de  $r \times \log_{10} \left( \frac{|\text{método} - \text{exato}|}{|\text{exato}|} \right)$ , sendo *método* o resultado gerado pela regra e *exato* o resultado gerado por meio do programa QUAD\_ITER com *toler* =  $10^{-15}$ . As integrais são aquelas dos experimentos da Subseção 5.4.2:  $\int_0^{2\pi} t \sin(t) dt$  e  $\int_0^{2\pi} t \sin(15t) dt$ .

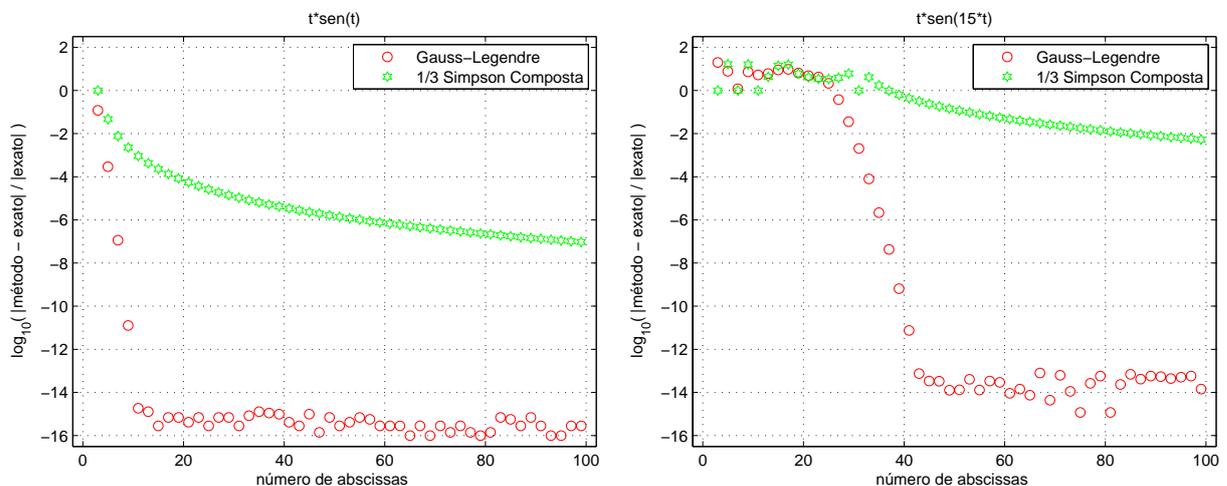


Figura 71: 1/3 de Simpson composta  $\times$  Gauss-Legendre.

Como era esperado, é evidente a superioridade do método de Gauss-Legendre que apresenta resultados que se estabilizam em torno da precisão do computador próximos a  $r = 12$  e  $r = 44$ , enquanto que, a regra de Simpson está longe de fornecer um resultado aceitável com  $r = 100$ . Existem diversas técnicas que buscam aperfeiçoar as fórmulas de Newton-Cotes. Todavia, nem tais métodos conseguem superar os de alta ordem de Gauss (Dehghan, Masjed-Jamei e Eslanchi, 2006). Conclui-se, assim como já indicado por Campos (1999), que é muito questionável o fato do método de Gauss ser freqüentemente preterido pelas regras de Newton-Cotes. Agora, apresenta-se um gráfico como o anterior na Figura 72 (a), desta vez, comparando também com a quadratura de Gauss-Chebyshev de 2ª espécie para a integral  $\int_0^{10} \sqrt{(10-t)t} \operatorname{sen}(t) dt$ .

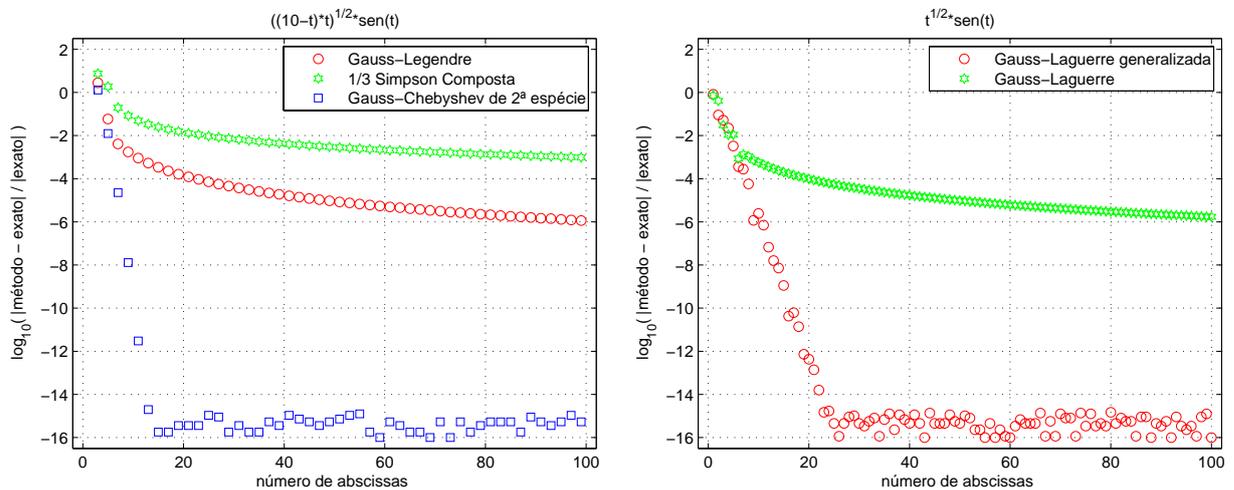
(a) Gauss-Legendre  $\times$  Gauss-Chebyshev de 2ª espécie(b) Gauss-Laguerre  $\times$  generalizada

Figura 72: Comparações entre convergências.

Novamente a regra de Newton-Cotes encontra-se muito aquém e é notável a supremacia de Gauss-Chebyshev sobre Gauss-Legendre para este integrando. Este exemplo reforça a metodologia da escolha da quadratura mais convergente apresentada na Seção 5.7 que indicaria Gauss-Chebyshev de 2ª espécie para esta integral. Veja a mesma diferença no caso de Gauss-Laguerre e Gauss-Laguerre generalizada, para  $\int_0^{\infty} t^{1/2} e^{-t} \operatorname{sen}(t) dt$ , na Figura 72 (b), onde a quadratura recomendada seria Gauss-Laguerre generalizada.

## 7.5 Trabalhos futuros

A proposição de Gauss sobre uma fórmula de quadratura com grau máximo de precisão surgiu no início do século XIX. Quando Kronrod, em 1965, tentava estimar o erro da

quadratura de Gauss, acabou deparando-se com um método que aumentava o grau de precisão para  $3r - 1$ . A idéia por trás deste método consiste basicamente em usar as  $r$  abscissas da quadratura de Gauss e, adicionalmente,  $r + 1$  novos pontos. O método de Gauss-Kronrod pode ser usado em algumas quadraturas de Gauss de intervalos finitos. A fórmula de Gauss-Kronrod para as quadraturas de Chebyshev de 1ª e 2ª espécies atinge grau de precisão  $4r - 1$ . Existem ainda outros métodos mais sofisticados com base nas quadraturas de Gauss: Gauss-Lobatto, Gauss-Radau e Gauss-Turán (Gautschi, 2003). Esta última quadratura leva em conta as derivadas de várias ordens da função integrando. Gauss-Lobatto e Gauss-Radau usam os extremos do intervalo como pontos extras no somatório da quadratura, maximizando o grau de exatidão. Há também as quadraturas de Gauss com base nos polinômios ortogonais de medidas não-clássicas, uma delas é a de medida  $w(x) = \log(x)$  que resolve integrais com singularidade logarítmica.

Os polinômios de Chebyshev de 3ª e 4ª espécies (Gautschi, 2003) têm medidas

$$w(x) = \frac{\sqrt{1+x}}{\sqrt{1-x}} \quad \text{e} \quad w(x) = \frac{\sqrt{1-x}}{\sqrt{1+x}},$$

respectivamente, sobre o intervalo  $[-1, 1]$ . Estas medidas  $w(x)$  são casos particulares da função peso de Jacobi quando  $\alpha = -\beta = \pm \frac{1}{2}$ . Um estudo semelhante ao apresentado neste trabalho poderia ser feito sobre estes dois polinômios buscando elaborar algoritmos mais eficientes do que o da quadratura de Gauss-Jacobi com tais valores de  $\alpha$  e  $\beta$ . O mesmo procederia para os polinômios de Hermite generalizados de medida  $w(x) = |x|^{2\mu} e^{-x^2}$ , com  $\mu > -\frac{1}{2}$  sobre o intervalo  $(-\infty, \infty)$ .

Nos experimentos da quadratura iterativa foram apresentados quatro casos de integrandos fortemente oscilatórios cujas integrais foram resolvidas com sucesso. Entretanto, as integrais com função peso oscilatória possuem métodos específicos de resolução (Hildebrand, 1974). Por outro lado, o método de Gauss iterativo foi útil para integrandos muito oscilatórios que inclusive apresentavam singularidades nos extremos. Nestes casos, seria curioso confrontar a eficiência do método iterativo em relação a um método cuja função peso é oscilatória.

As quadraturas de Gauss também são utilizadas para o cálculo de integrais múltiplas (Stroud, 1971) e propõe-se investigar a utilidade da quadratura iterativa nestas integrais.

É importante ressaltar que, tal como a quadratura iterativa apresentada, existem muitos outros métodos que estimam o erro cometido numa quadratura de Gauss que também são baseados em esquemas de integração iterativos. Por exemplo, a obra de Davis e Rabinowitz aponta um esquema iterativo e não-adaptativo baseado em Gauss-Kronrod,

um esquema não-iterativo e adaptativo sobre a regra do ponto médio, um esquema iterativo e adaptativo sobre a regra de Simpson, dentre outros adaptativos. A biblioteca IMSL (International Mathematical and Statistical Libraries) contém a função QDAG que é um esquema de integração não-iterativo e adaptativo baseado na regra de 21 pontos de Gauss-Kronrod (21 = 10 zeros + 11 pontos adicionais) que compara com a quadratura de Gauss clássica com os 10 zeros para estimar o erro. A vantagem em se utilizar os 10 zeros em cada fórmula decorre do fato de que a função necessita ser avaliada em apenas 21 pontos, enquanto que, se a quadratura de Gauss clássica fosse utilizada em 10 e depois em 21 zeros, somar-se-iam 31 avaliações da função. A biblioteca NAG (Numerical Algorithms Group) inclui a sub-rotina D01AHF que é um esquema adaptativo usando 1, 3, 5, 7, 15, 31, 63, 127 e 255 zeros sobre as quadraturas de Gauss, esta regra é devida a Patterson<sup>1</sup> (Burden e Faires, 2003).

Concluindo, existe um vasto campo de estudos sobre as quadraturas de Gauss. Uma proposta para futuros trabalhos é pesquisar métodos mais robustos que vêm sendo elaborados sobre as quadraturas de Gauss a fim de identificar qual deles é o mais eficiente para uma dada integração aliando isto aos esquemas de integração iterativos. Propõe-se confrontar a eficiência da quadratura iterativa com outros esquemas de integração. Também seria interessante usar o esquema iterativo proposto por Campos (2007) de forma adaptativa, por exemplo, aplicando este esquema separadamente nos subintervalos de integração. Outra proposta seria aprofundar o estudo levantado sobre os polinômios ortogonais que foi iniciado neste trabalho. Os polinômios ortogonais são ferramentas essenciais para solução de muitos problemas e vêm contribuindo nos estudos relacionados a equações diferenciais, frações contínuas, estabilidade numérica, algoritmos rápidos e super-rápidos, com aplicações que abrangem da Teoria dos Números à Teoria da Aproximação, da Combinatória à Representação de Grupos, da Mecânica Quântica à Física Estatística e da Teoria de Sistemas ao Processamento de Sinais (Bracciali e Andrade, 2006).

---

<sup>1</sup>Patterson, T.N.L. The optimum addition of points to quadrature formulae. *Mathematics of Computation* **22**, 104 (1968).

## *Referências*

- Abramowitz, M. e Stegun, I.A. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, New York, 1972.
- Askey, R. *Orthogonal Polynomials and Special Functions*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1975.
- Anderson, E., Bai, Z., Bischof, C., Blackford, S., Demmel, J., Dongarra, J., Du Croz, J., Greenbaum, A., Hammarling, S., McKenney, A. e Sorensen, D. *LAPACK Users' Guide*. 3ª ed. SIAM, Philadelphia, 1999.
- Andrade, E.X.L., Bracciali, C.F. *Frações Contínuas: propriedades e aplicações*. ed SBMAC, São Carlos, 2005.
- Berntsein, J. e Espelid, T.O. Error estimation in automatic quadrature routines, *ACM Trans. Math. Softw.* Vol 17 N° 2 (1991), 233-252.
- Bracciali, C.F. e Andrade, E.X.L. *Zeros de Polinômios Ortogonais: Interpretação Eletrostática e Análise de Freqüências*, publicação da III Biental da Sociedade Brasileira de Matemática, UFG, 2006.
- Burden, R.L. e Faires, J.D. *Análise Numérica*. Thomson, São Paulo, 2003.
- Campos, F.F. *Algoritmos Numéricos*. 2ª ed. LTC, Rio de Janeiro, 2007.
- Campos, F.F. Introdução ao Matlab, apostila DCC-UFMG, 2000.
- Campos, F.F. Por que não integração numérica via Gauss-Legendre?. V Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional, 1999, Belo Horizonte. Anais do V Encontro Regional de MAC, 1999.
- Da Costa Jr., A.E. Integre – Um sistema acoplado para o cálculo de integrais com análise de funções numéricas. Dissertação de Mestrado, UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ, 1998.
- Davis, P.J. e Rabinowitz, P. *Methods of Numerical Integration*. 2. ed. Orlando, San Diego, 1984.

- Dehghan, M., Masjed-Jamei, M. e Eslahchi, M.R. On numerical improvement of open Newton-Cotes quadrature rules, *Applied Mathematics and Computation* 175 (2006), 618-627.
- Dehghan, M., Masjed-Jamei, M. e Eslahchi, M.R. The semi-open Newton-Cotes quadrature rule and its numerical improvement, *Applied Mathematics and Computation* 171 (2005), 1129-1140.
- Eves, H. *Introdução à História da Matemática*. Unicamp, Campinas, 2004.
- Gautschi, W. Algorithm 726: ORTHPOL – A Package of Routines for Generating Orthogonal Polynomials and Gauss-Type Quadrature Rules. *ACM Transactions on Mathematical Software* Vol 20 N° 1 (1994), 21-62.
- Gautschi, W. *Orthogonal Polynomials: Computation and Approximation*. 1ª ed. Oxford University Press, 2003.
- Golub, G.H. e Welsch, J.H. Calculation of Gauss Quadrature Rules. Stanford University, Technical Report 81 (1967).
- Hildebrand, F.B. *Introduction to Numerical Analysis*. 2ª ed. McGraw-Hill, New York, 1974.
- Isaacson, E. e Keller, H.B. *Analysis of Numerical Methods*. John Wiley and Sons, New York, 1966.
- Jackson, D. *Fourier Series and Orthogonal Polynomials*. The Mathematical Association of America, Washington, 1941.
- Krylov, V.I. *Approximate Calculation of Integrals*. MacMillian, New York, 1962.
- Kythe, P.K. e Schäferkotter, M.R. *Computational Methods for Integration*. Chapman & Hall/CRC, Florida, 2005.
- Leithold, L. *O Cálculo com Geometria Analítica Vol. 1 e 2*. 3ª ed. Harbra, São Paulo, 1994.
- Press, W.H., Teulosky, S.A., Vetterling, W.T. e Flannery, B.P. *Numerical Recipes*. 2ª ed. Cambridge University Press, 1997.
- Ralston, A. e Rabinowitz, P. *A First Course in Numerical Analysis*. 2ª ed. Dover, New York, 1978.
- Stroud, A.H. *Approximate Calculation of Multiple Integrals*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1971.

Swarztrauber, P.N., On computing the points and weights for Gauss-Legendre quadratures. *SIAM J. Sci. Comput.* 24(3) (2002), 945-954.

Szegő, G. *Orthogonal Polynomials*. 4<sup>a</sup> ed. American Mathematical Society Colloquium Publications, Vol. 23, Providence, RI, 1975.

Wilf, H.S. *Mathematics for the Physical Sciences*. Dover Publications, Inc., New York, 1978.

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)