POLINÔMIOS DE JACOBI E QUADRATURA NUMÉRICA

INTRODUÇÃO

Para um melhor entendimento do método da colocação ortogonal e sua relação com o método dos resíduos ponderados (MRP), torna-se indispensável um estudo, mesmo que de caráter introdutório, das propriedades dos polinômios de Jacobi e das quadraturas numéricas correspondentes. Com isso, pode-se compreender a relação existente entre a seleção do polinômio de Jacobi adequado ao problema em foco e, em consequência, a seleção dos pontos de colocação e os métodos dos momentos e de Galerkin.

Em diferentes trabalhos de aplicação do método da colocação ortogonal, sobretudo na literatura de engenharia química, nota-se certa confusão e não sistematização na seleção desses polinômios, provocando com isto uma grande dificuldade no aprendizado do método e um não aproveitamento de seu potencial. É assim o objetivo deste documento apresentar as principais propriedades dessa família de polinômios ortogonais e das quadraturas numéricas correspondentes. Deduções de algumas destas propriedades serão evitadas, desde que não comprometam a sequência da exposição, maiores detalhes podem ser encontrados no livro de *John Villadsen :* ***"Selected Approximation Methods for Chemical Engineering Problems"*** impresso pelo *Instituttet for Kemiteknik/Numerisk Institut* do *Danmarks Tekniske Hϕjskole* (1970).

POLINÔMIOS DE JACOBI

Definição: Seja a *função peso* $\omega(x)=(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}$ com $\alpha>-1$ e $\beta>-1$ e seja o intervalo fechado [0,+1], então a *família* de polinômios de Jacobi, representado genericamente por $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ [sendo *n* o grau do polinômio e α e β os expoentes de $(1-x)$ e *x*, respectivamente, na função peso $\omega(x)$], é definida através da propriedade de *ortogonalidade* :

$$\boxed{\int_0^1\left[(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\right]\cdot P_m^{(\alpha,\beta)}(x)\cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x)\cdot dx=C_n\cdot\delta_{m,n}=\begin{cases}0 \text{ para } m\neq n\\ C_n>0 \text{ para } m=n\end{cases}}$$

O polinômio de Jacobi $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ é dito ortogonal no intervalo [0,+1] em relação à função peso $\omega(x)=(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}$. A partir da propriedade de ortogonalidade aima, pode-se determinar recursivamente qualquer termo da família a menos de uma constante. Esta constante adicional é selecionada através de uma condição de *padronização* que, neste caso particular, pode assumir uma das duas formas descritas a seguir:

i-)o coeficiente independente de *x* em $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ é igual a $(-1)^n$ e, neste caso, o polinômio é designado por *P* maiúsculo;

ii-)o coeficiente de x^n é igual a 1 e, neste caso, o polinômio é designado por *p* minúsculo, isto é: $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$.

Exemplo Ilustrativo: sejam α=1 e β=1, assim:

i-) com *n*=0, tem-se: $P_0^{(1,1)}(x)=p_0^{(1,1)}(x)=1$;

ii-) com n=1, tem-se: $P_1^{(1,1)}(x) = a \cdot x - 1$ e $p_1^{(1,1)}(x) = x - x^*$, é claro que a raiz do polinômio de Jacobi de 1^0 grau deve independer da forma de padronização, logo: $x^* = \frac{1}{a}$, para determinar a (ou x^* caso se optar pela segunda forma) utiliza-se a propriedade de ortogonalidade com n=0 e m=1, assim:

$$\int_0^1 \left[x \cdot (1-x) \right] \cdot 1 \cdot (a \cdot x - 1) \cdot dx = a \cdot \int_0^1 \left[x^2 - x^3 \right] \cdot dx - \int_0^1 \left[x - x^2 \right] \cdot dx = a \cdot \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{4} \right) - \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} \right) =$$

$$= \frac{a}{12} - \frac{1}{6} = 0 \Rightarrow a = 2 \text{ e } x^* = 0,5$$, resultando em: $P_1^{(1,1)}(x) = 2 \cdot x - 1$ e $p_1^{(1,1)}(x) = x - 0,5$.

iii-) com n=2, tem-se: $P_2^{(1,1)}(x) = a \cdot x^2 - b \cdot x + 1$ e $p_2^{(1,1)}(x) = x^2 - b^* \cdot x + c$ é claro que $b^* = \frac{b}{a}$ e $c = \frac{1}{a}$, para determinar a e b (ou b^* e c caso se optar pela segunda forma) utiliza-se a propriedade de ortogonalidade (III-1) com n=0 e m=2:

$$\int_0^1 \left[x(1-x) \right] \cdot 1 \cdot \left(a \cdot x^2 - b \cdot x + 1 \right) \cdot dx = a \cdot \int_0^1 \left(x^3 - x^2 \right) \cdot dx - b \cdot \int_0^1 \left(x^2 - x^3 \right) \cdot dx + \int_0^1 \left(x - x^2 \right) \cdot dx =$$

$$= a \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{5} \right) - b \cdot \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{4} \right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} \right) = \frac{a}{20} - \frac{b}{12} + \frac{1}{6} = 0 \Rightarrow 3 \cdot a - 5 \cdot b = -10$$

e com n=1 e m=2:

$$\int_0^1 \left[x \cdot (1-x) \right] \cdot (2 \cdot x - 1) \cdot \left(a \cdot x^2 - b \cdot x + 1 \right) \cdot dx = 2 \cdot a \cdot \int_0^1 \left(x^4 - x^5 \right) \cdot dx - (a + 2 \cdot b) \int_0^1 \left(x^3 - x^4 \right) \cdot dx +$$

$$(2 + b) \cdot \int_0^1 \left(x^2 - x^3 \right) \cdot dx - \int_0^1 \left(x - x^2 \right) \cdot dx = \frac{2 \cdot a}{30} - \frac{a + 2 \cdot b}{20} + \frac{2 + b}{12} - \frac{1}{6} = 0 \Rightarrow a - b = 0 \Rightarrow a = b,$$

como $3 \cdot a - 5 \cdot b = -10 \Rightarrow a = b = 5$.

Resultando em: $P_2^{(1,1)}(x) = 5 \cdot x^2 - 5 \cdot x + 1$ ou $p_2^{(1,1)}(x) = x^2 - x + 0,2$.

Cujas raízes são: $x_1 = \frac{1 - \sqrt{0,2}}{2}$ e $x_2 = \frac{1 + \sqrt{0,2}}{2}$

<u>Observação Importante</u>: É bastante útil para essa forma de determinação dos polinômios de Jacobi a integral definida: $\int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta} \cdot dx = \frac{\Gamma(1+\alpha) \cdot \Gamma(1+\beta)}{\Gamma(2+\alpha+\beta)}$ para $\alpha > -1$ e $\beta > -1$.

Caso os expoentes forem números inteiros positivos, tem-se:

$$\int_0^1 (1-x)^m \cdot x^n \cdot dx = \frac{m! \cdot n!}{(m+n+1)!}$$ para m e n: inteiros positivos.

<u>Exemplo proposto:</u> Gerar a partir da definição de ortogonalidade os três primeiros polinômios de Jacobi para $\alpha = \beta = -1/2$ [Sugestão: utilize nas integrais a seguinte mudança de variáveis: $x = \frac{1 - \cos(\theta)}{2}$ para $0 < \theta < \pi$]

✧✧✧✧✧✧✧✧✧

A expressão relativa à ortogonalidade dos polinômios de Jacobi pode ser reescrita na forma:

$\int_0^1 \left[(1-x)^\alpha \cdot x^\beta\right] \cdot P_m^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0$ para todo $n > m$, assim, para m=0 e n>0, em vista de $P_0^{(\alpha,\beta)}(x) = 1$, tem-se: $\boxed{\int_0^1 \left[(1-x)^\alpha \cdot x^\beta\right] \cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0 \text{ para todo } n>0}$.

Para m=1 e n>1, como $P_1^{(\alpha,\beta)}(x) = a \cdot x - 1$ com $a \neq 0$, tem-se:

$\int_0^1 \left[(1-x)^\alpha \cdot x^\beta\right] \cdot (a \cdot x - 1) \cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0$ para todo n>1.

Mas, em vista de: $\int_0^1 \left[(1-x)^\alpha \cdot x^\beta\right] \cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0$ para todo n>0, tem-se:

$a \cdot \int_0^1 \left[(1-x)^\alpha \cdot x^\beta\right] \cdot x \cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0$ para todo n>1como a≠0, tem-se:

$\boxed{\int_0^1 \left[(1-x)^\alpha \cdot x^\beta\right] \cdot x \cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0 \text{ para todo } n>1}$.

Para m=2 e n>2, como $P_2^{(\alpha,\beta)}(x) = a \cdot x^2 - b \cdot x + 1$ com $a \neq 0$, tem-se:

$\int_0^1 \left[(1-x)^\alpha \cdot x^\beta\right] \cdot \left(a \cdot x^2 - b \cdot x + 1\right) P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0$ para todo n>2

Mas, em vista de: $\int_0^1 \left[(1-x)^\alpha \cdot x^\beta\right] \cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0$ para todo n>0 e

$\int_0^1 \left[(1-x)^\alpha \cdot x^\beta\right] \cdot x \cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0$ para todo n>1, tem-se:

$a \cdot \int_0^1 \left[(1-x)^\alpha \cdot x^\beta\right] \cdot x^2 \cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0$ para todo n>2, como a≠0, tem-se:

$\boxed{\int_0^1 \left[(1-x)^\alpha \cdot x^\beta\right] \cdot x^2 \cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0 \text{ para todo } n>2}$.

Permitindo concluir, por indução, que:

$\boxed{\int_0^1 \left[(1-x)^\alpha \cdot x^\beta\right] \cdot x^m \cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0 \text{ para todo } m \text{ inteiro e menor do que } n}$.

Fundamentado na equação acima, pode-se concluir que para qualquer polinômio de grau $0 \le m < n$: $\boxed{Q_m(x) = \sum_{i=0}^{m} c_i \cdot x^i}$, tem-se: $\boxed{\int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta}\right] \cdot Q_m(x) \cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0}$

Outra propriedade importante dos polinômios de Jacobi, decorrente da propriedade de ortogonalidade expressa em termos de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x) = x^n + \sum_{j=0}^{n-1} c_j^{(n)} \cdot x^j$, diz respeito à integral: $I = \int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta}\right] \cdot \left[p_n^{(\alpha,\beta)}(x)\right]^2 \cdot dx$. Tal integral assegura que, dentre *todos* os polinômios de grau n com coeficiente de x^n igual à unidade, o polinômio de Jacobi normalizado é o que apresenta o menor valor numérico da mesma integral.

Para demonstrar essa propriedade, considera-se a função objetivo:

$$\boldsymbol{J}\left(c_0^{(n)}, c_1^{(n)}, \cdots, c_{n-1}^{(n)}\right) = \int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta}\right] \cdot \left[p_n^{(\alpha,\beta)}(x)\right]^2 \cdot dx = \int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta}\right] \cdot \left[x^n + \sum_{j=0}^{n-1} c_j^{(n)} \cdot x^j\right]^2 \cdot dx$$

Que apresenta um mínimo quando:

$$\frac{\partial \boldsymbol{J}\left(c_0^{(n)}, c_1^{(n)}, \cdots, c_{n-1}^{(n)}\right)}{\partial c_k^{(n)}} = \frac{\partial}{\partial c_k^{(n)}} \left\{ \int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta}\right] \cdot \left[x^n + \sum_{j=0}^{n-1} c_j^{(n)} \cdot x^j\right]^2 \cdot dx \right\} = 0 \text{ para } k = 0,\ 1,\ \cdots,\ n-1$$

Isto é:

$$\int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta}\right] \cdot x^k \cdot \left[x^n + \sum_{j=0}^{n-1} c_j^{(n)} \cdot x^j\right] \cdot dx = \int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta}\right] \cdot x^k \cdot p_n^{(\alpha,\beta)}(x) \cdot dx = 0 \text{ para } k = 0,\ 1,\ \cdots,\ n-1$$

O que é verdadeiro pela propriedade de ortogonalidade de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$.

<u>Exemplo Ilustrativo</u>: com α =1, β = 1 e n=2 tem-se:

$$p_2(x,b,c) = x^2 - b \cdot x + c \Rightarrow$$

$$x \cdot (1-x) \cdot \left[p_2(x,b,c)\right]^2 = -x^6 + (2 \cdot b + 1) \cdot x^5 - \left(b^2 + 2 \cdot b + 2 \cdot c\right) \cdot x^4 + \left(b^2 + 2 \cdot b \cdot c + 2 \cdot c\right) \cdot x^3 +$$
$$-\left(2 \cdot b \cdot c + c^2\right) \cdot x^2 + c^2 \cdot x$$

Logo:

$$\boldsymbol{J}(b,c) = \int_0^1 x \cdot (1-x) \cdot \left[p_2(x,b,c)\right]^2 \cdot dx = -\frac{1}{7} + \frac{2 \cdot b + 1}{6} - \frac{b^2 + 2 \cdot b + 2 \cdot c}{5} + \frac{b^2 + 2 \cdot b \cdot c + 2 \cdot c}{4} +$$
$$-\frac{2 \cdot b \cdot c + c^2}{3} + \frac{c^2}{2}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{J}(b,c)}{\partial b} = \frac{c}{3} - \frac{b}{6} + \frac{1}{10} = 0 \Rightarrow 5 \cdot b - 10 \cdot c = 3 \text{ e } \frac{\partial \boldsymbol{J}(b,c)}{\partial c} = \frac{b}{10} - \frac{c}{6} - \frac{1}{15} = 0 \Rightarrow 3 \cdot b - 5 \cdot c = 2.$$

Assim: $\begin{cases} 5\cdot b-10\cdot c=3 \\ 3\cdot b-5\cdot c=2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} b=1 \\ c=\dfrac{1}{5} \end{cases} \Rightarrow p_2(x)\equiv p_2^{(1,1)}(x)=x^2-x+\dfrac{1}{5}$

✧✧✧✧✧✧✧✧✧✧

GERAÇÃO DOS POLINÔMIOS DE JACOBI

Mostrou-se no item anterior, em exemplo ilustrativo, que os polinômios de Jacobi podem ser gerados diretamente da propriedade de ortogonalidade, entretanto tal procedimento é muito trabalhoso, pouco eficiente e de difícil programação. Neste item outras formas de geração dos polinômios de Jacobi serão apresentadas, discutindo-se, em cada caso, suas limitações e adequações

1^0 Método: A Partir da Propriedade de Ortogonalidade

Considerando a seguinte padronização de $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$:

$$\boxed{P_n^{(\alpha,\beta)}(x)=\sum_{i=0}^{n}(-1)^{n-i}\cdot\gamma_i^{(n)}\cdot x^i \quad \text{com } \gamma_0^{(n)}=1 \text{ para todo } n\geq 0}$$

Da propriedade de ortogonalidade:

$$\int_0^1\left[(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\right]\cdot x^m\cdot P_n^{(\alpha,\beta)}(x)\cdot dx=\sum_{i=0}^{n}(-1)^{n-i}\cdot\gamma_i^{(n)}\cdot\int_0^1\left[(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta+m+i}\right]\cdot dx=0 \quad \text{para todo } 0\leq m<n$$

Mas: $\displaystyle\int_0^1\left[(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta+m+i}\right]\cdot dx=\frac{\Gamma(1+\alpha)\cdot\Gamma(1+\beta+m+i)}{\Gamma(2+\alpha+\beta+m+i)}$, assim:

$$\sum_{i=0}^{n}(-1)^{n-i}\cdot\gamma_i^{(n)}\cdot\left[\frac{\Gamma(1+\alpha)\cdot\Gamma(1+\beta+m+i)}{\Gamma(2+\alpha+\beta+m+i)}\right]=\Gamma(1+\alpha)\cdot\sum_{i=0}^{n}(-1)^{n-i}\cdot\gamma_i^{(n)}\cdot\frac{\Gamma(1+\beta+m+i)}{\Gamma(2+\alpha+\beta+m+i)}=0$$

e

$$\sum_{i=0}^{n}(-1)^{n-i}\cdot\gamma_i^{(n)}\cdot\frac{\Gamma(1+\beta+m+i)}{\Gamma(2+\alpha+\beta+m+i)}=(-1)^n\cdot\gamma_0^{(n)}\cdot\frac{\Gamma(1+\beta+m)}{\Gamma(2+\alpha+\beta+m)}+(-1)^{n-1}\cdot\gamma_1^{(n)}\cdot\frac{\Gamma(2+\beta+m)}{\Gamma(3+\alpha+\beta+m)}+$$

$$+(-1)^{n-2}\cdot\gamma_2^{(n)}\cdot\frac{\Gamma(3+\beta+m)}{\Gamma(4+\alpha+\beta+m)}+(-1)^{n-3}\cdot\gamma_3^{(n)}\cdot\frac{\Gamma(3+\beta+m)}{\Gamma(4+\alpha+\beta+m)}+\cdots=0$$

Ou seja:

$$\frac{\Gamma(1+\beta+m)}{\Gamma(2+\alpha+\beta+m)}\cdot\begin{bmatrix}(-1)^n\cdot\gamma_0^{(n)}+(-1)^{n-1}\cdot\gamma_1^{(n)}\cdot\dfrac{1+\beta+m}{2+\alpha+\beta+m}+ \\ +(-1)^{n-2}\cdot\gamma_2^{(n)}\cdot\dfrac{(1+\beta+m)\cdot(2+\beta+m)}{(2+\alpha+\beta+m)\cdot(3+\alpha+\beta+m)}+\dots\end{bmatrix}=0$$

Com a padronização $\gamma_0^{(n)}\equiv 1$, obtém-se o sistema algébrico linear:

$$\boxed{\sum_{i=1}^{n}\left(-1\right)^{n-i}\cdot\prod_{j=1}^{i}\left(\frac{j+\beta+m}{j+1+\alpha+\beta+m}\right)\cdot\gamma_i^{(n)}=-\left(-1\right)^n\quad\text{para todo } m=0,\ 1,\ \cdots,\ n-1}$$

<u>Exemplo Ilustrativo</u>: sejam α=1 e β=1, assim:

i-) com n=0, tem-se $\gamma_0^{(0)}=1$, logo: $P_0^{(1,1)}(x)=p_0^{(1,1)}(x)=1$;

ii-) com n=1 e $\alpha=\beta=1$, tem-se:

$$\sum_{i=1}^{1}(\text{-}1)^{1-i}\cdot\gamma_i^{(1)}\cdot\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{\left(j+1+m\right)}{\left(j+3+m\right)}\right]=\ 1 \text{ apenas para } m=0\text{, logo:}$$

$$\gamma_1^{(1)}\cdot\frac{2}{4}=1\Rightarrow\gamma_1^{(1)}=2\text{, resultando em: } P_1^{(1,1)}(x)=2\cdot x-1$$

iii-) com n=2 e $\alpha=\beta=1$, tem-se:

$$\sum_{i=1}^{2}(\text{-}1)^{2-i}\cdot\gamma_i^{(2)}\cdot\prod_{j=1}^{i}\left[\frac{\left(j+1+m\right)}{\left(j+3+m\right)}\right]=-1 \text{ para } m=0 \text{ e } 1\text{, logo,}$$

m=0: $-\gamma_1^{(2)}\cdot\frac{2}{4}+\gamma_2^{(2)}\cdot\frac{2\cdot3}{4\cdot5}=-1$ ou seja : $3\cdot\gamma_2^{(2)}-5\cdot\gamma_1^{(2)}=-10$

m=1: $-\gamma_1^{(2)}\cdot\frac{3}{5}+\gamma_2^{(2)}\cdot\frac{3\cdot4}{5\cdot6}=-1$ ou seja : $2\cdot\gamma_2^{(2)}-3\cdot\gamma_1^{(2)}=-5$

A solução desse sistema algébrico linear é: $\gamma_2^{(2)}=\gamma_1^{(2)}=5\Rightarrow P_2^{(1,1)}(x)=5\cdot x^2-5\cdot x+1$.

<u>Exemplo proposto:</u> Gerar pelo primeiro método os três primeiros polinômios de Jacobi para $\alpha=\beta=-1/2$

✧✧✧✧✧✧✧✧✧✧

<u>2^0 Método: A Partir da Geração Recursiva dos Coeficientes do Polinômio</u>

Considerando a mesma forma de representação de $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ apresentada no primeiro método, os coeficientes $\gamma_i^{(n)}$ podem ser gerados recursivamente através de:

$$\boxed{\gamma_i^{(n)}=\frac{\left(n+1-i\right)\cdot\left(n+i+\alpha+\beta\right)}{i\cdot\left(i+\beta\right)}\cdot\gamma_{i-1}^{(n)}}\ \text{para } i\text{=1, 2, ..., } n \text{ com } \gamma_0^{(n)}\equiv1 \text{ para todo } n\geq0$$

<u>Exemplo Ilustrativo</u>: sejam α=1 e β=1, assim:

i-) com n=0, tem-se $\gamma_0^{(0)}=1$, logo: $P_0^{(1,1)}(x)=p_0^{(1,1)}(x)=1$;

ii-) com n=1 e $\alpha=\beta=1$, tem-se: $\gamma_1^{(1)}=\frac{\left(2-1\right)\cdot\left(1+1+1+1\right)}{1\cdot\left(1+1\right)}\cdot1=2\ \Rightarrow P_1^{(1,1)}(x)=2\cdot x-1$

iii-) com n=2 e $\alpha=\beta=1$, tem-se: $\gamma_i^{(2)}=\frac{\left(3-i\right)\cdot\left(4+i\right)}{i\cdot\left(i+1\right)}\gamma_{i-1}^{(2)}$ para i=1 e 2 com $\gamma_0^{(2)}\equiv1$,

i=1 $\Rightarrow\gamma_1^{(2)}=\frac{2\cdot5}{1\cdot2}\cdot1=5$ e i=2 $\Rightarrow\gamma_2^{(2)}=\frac{1\cdot6}{2\cdot3}\cdot\gamma_1^{(2)}=\gamma_1^{(2)}=5\Rightarrow P_2^{(1,1)}(x)=5\cdot x^2-5\cdot x+1$.

Exemplo proposto: Gerar pelo segundo método os três primeiros polinômios de Jacobi para $\alpha = \beta = -1/2$

✧✧✧✧✧✧✧✧✧✧

3º Método: A Partir da Geração Recursiva dos Polinômios

Considerando a segunda forma de padronização dos polinômios de Jacobi, isto é $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ na qual o coeficiente de x^n é sempre igual a 1. Pode-se gerar recursivamente $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ segundo o procedimento:

$$\boxed{p_i^{(\alpha,\beta)}(x) = \left[x - g_i(\alpha,\beta)\right] \cdot p_{i-1}^{(\alpha,\beta)}(x) - h_i(\alpha,\beta)\, p_{i-2}^{(\alpha,\beta)}(x) \quad \text{para } i = 1,\, 2,\, \cdots,\, n}$$

$$\text{com } p_{-1}^{(\alpha,\beta)}(x) \equiv 0 \quad e \quad p_1^{(\alpha,\beta)}(x) \equiv 1$$

Em que: $$g_i(\alpha,\beta) = \begin{cases} \dfrac{(\beta+1)}{(\alpha+\beta+2)} & \text{para } i = 1 \\ \dfrac{1}{2} \cdot \left[1 - \dfrac{\left(\alpha^2 - \beta^2\right)}{(2 \cdot i + \alpha + \beta - 1)^2 - 1}\right] & \text{para } i > 1 \end{cases}$$ e

$$h_i^{(\alpha,\beta)} = \begin{cases} 0 \quad \text{para } i = 1 \\ \dfrac{(\alpha+1)\cdot(\beta+1)}{(\alpha+\beta+2)^2 \cdot (\alpha+\beta+3)} & \text{para } i = 2 \\ \dfrac{(i-1)\cdot(i+\alpha-1)\cdot(i+\beta-1)\cdot(i+\alpha+\beta-1)}{(2i+\alpha+\beta-1)\cdot(2i+\alpha+\beta-2)^2\cdot(2i+\alpha+\beta-3)} & \text{para } i > 2 \end{cases}$$

Tal procedimento, em comparação com os anteriores é mais apropriado à implementação computacional e para o cálculo do valor numérico do polinômio com diferentes valores do argumento.

Os valores dos coeficientes $g_i(\alpha,\beta)$ e $h_i(\alpha,\beta)$ para i=1, 2, ..., n podem ser calculados no início do procedimento, pois independem do valor do argumento x.

Exemplo Ilustrativo: sejam α=1 e β=1, assim tem-se: $p_{-1}^{(1,1)}(x) \equiv 0 \quad e \quad p_1^{(1,1)}(x) \equiv 1$ e

$$g_1 = \frac{2}{4} = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad g_i = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{1^2 - 1^2}{(2i+1+1-1)^2 - 1}\right] = \frac{1}{2} \quad \text{para } i > 1$$

$$h_1 = 0 \;\; ; \;\; h_2 = \frac{(1+1)\cdot(1+1)}{(1+1+2)^2 \cdot (1+1+3)} = \frac{1}{20} \quad \text{e}$$

$$h_i = \frac{(i-1)\cdot(i+1-1)\cdot(i+1-1)\cdot(i+1+1-1)}{(2i+1+1-1)\cdot(2i+1+1-2)^2\cdot(2i+1+1-3)} = \frac{1}{4}\cdot\frac{\left(i^2-1\right)}{\left(4\cdot i^2 - 1\right)} \quad \text{para } i > 2.$$

Para i=3 $\Rightarrow h_3 = \frac{1}{4} \cdot \frac{(9-1)}{(4 \cdot 9 - 1)} = \frac{2}{35}$

Calculando então para i=1 : $p_1^{(1,1)}(x) = \left[x - g_1(1,1) \right] \cdot p_0^{(1,1)}(x) - h_1(1,1) \cdot p_{-1}^{(1,1)}(x) = x - \frac{1}{2}$, e para i=2:

$$p_2^{(1,1)}(x) = \left[x - g_1(1,1) \right] \cdot p_1^{(1,1)}(x) - h_2(1,1) \cdot p_0^{(1,1)}(x) = \left(x - \frac{1}{2} \right) \cdot \left(x - \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{20} = x^2 - x + \frac{1}{5}$$

e para i=3:

$$p_3^{(1,1)}(x) = \left[x - g_2(1,1) \right] \cdot p_2^{(1,1)}(x) - h_3(1,1) \cdot p_1^{(1,1)}(x) = \left(x - \frac{1}{2} \right) \cdot \left(x^2 - x + \frac{1}{5} \right) - \frac{2}{35} \cdot \left(x - \frac{1}{2} \right) =$$

$$= x^3 - \frac{3}{2} \cdot x^2 + \frac{9}{14} \cdot x - \frac{1}{14}$$

<u>Exemplo proposto:</u> Gerar pelo terceiro método os quatro primeiros polinômios de Jacobi para $\alpha = \beta = -1/2$

✧✧✧✧✧✧✧✧✧

A implementação desse método pode também ser feito através da matriz tridiagonal abaixo:

$$A = \begin{bmatrix} g_1 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -h_2 & g_2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -h_3 & g_3 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\vdots\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -h_{n-1} & g_{n-1} & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -h_n & g_n \end{bmatrix}.$$

O polinômio característico dessa matriz é $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$, isto é: $P_n^{(\alpha,\beta)}(x) = \det(x \cdot \boldsymbol{I} - \boldsymbol{A})$. Caso um método numérico de determinação de *valores característicos* de matrizes estiver disponível, tal procedimento se apresenta como uma alternativa interessante para a determinação das raízes de $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ que são os valores característicos de **A**.

✧✧✧✧✧✧✧✧✧

<u>Exemplo Ilustrativo</u>: No exemplo ilustrativo anterior determinou-se:

$g_i = \frac{1}{2}$ para todo i≥0 e $h_2 = \frac{1}{20}$ e $h_3 = \frac{2}{35}$, assim:

Para n=2 tem-se: $\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} g_1 & -1 \\ -h_2 & g_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -1 \\ -\frac{1}{20} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$ e $p_2^{(1,1)}(x) = \det \begin{bmatrix} x - \frac{1}{2} & 1 \\ \frac{1}{20} & x - \frac{1}{2} \end{bmatrix} = x^2 - x + \frac{1}{5}$.

Para n=3 tem-se: $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} g_1 & -1 & 0 \\ -h_2 & g_2 & -1 \\ 0 & -h_3 & g_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -1 & 0 \\ -\frac{1}{20} & \frac{1}{2} & -1 \\ 0 & -\frac{2}{35} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$ e

$$p_3^{(1,1)}(x)=\det\begin{bmatrix} \left(x-\frac{1}{2}\right) & 1 & 0 \\ \frac{1}{20} & \left(x-\frac{1}{2}\right) & 1 \\ 0 & \frac{2}{35} & \left(x-\frac{1}{2}\right) \end{bmatrix}=\left(x-\frac{1}{2}\right)\cdot\left(x^2-x+\frac{1}{7}\right)$$

DETERMINAÇÃO DAS RAÍZES DOS POLINÔMIOS DE JACOBI

Antes de apresentar os procedimentos numéricos de determinação das raízes de polinômios de Jacobi, caracterizar-se-á a natureza das mesmas que são todas reais, distintas e contidas no interior do intervalo (0,+1).

A caracterização da natureza das raízes pode ser feita a partir da propriedade de ortogonalidade rescrita na forma:

$$\boxed{\int_0^1 \omega(x)\cdot Q_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx=0 \text{ para todo } 0\le m<n}$$

Em que: $\omega(x)$ é uma função peso genérica que deve satisfazer a: $\omega(x)$ >0 para $0<x<1$, $Q_m(x)$ é um polinômio em x de grau inferior a n e $p_n(x)=\prod_{i=1}^{n}(x-r_i)$. Note que $p_n(x)$ é o n'ésimo membro de uma família de polinômios ortogonais no intervalo [0,+1] em relação a uma função peso genérica: $\omega(x)$.

(a)Demonstração da existência de pelo menos k $(k\le n)$ raízes reais, distintas e pertencentes ao intervalo (0,+1).

Considerando m=0 e $Q_m(x)$=1 na condição de ortogonalidade de $p_n(x)$, obtém-se: $\int_0^1 \omega(x)\cdot p_n(x)\cdot dx=0$ como $\omega(x)$ >0 para $0<x<1$, $p_n(x)$ [de acordo com o Teorema do Valor Médio] troca pelo menos uma vez de sinal no mesmo intervalo.

Sejam os k [$1<k\le n$] pontos distintos em que $p_n(x)$ troca de sinal no intervalo os pontos $r_1,\ r_2,\ \ldots,r_k$.

Para demonstrar que a multiplicidade de cada um desses pontos é unitária, considera-se a suposição contrária, isto é, que existe pelo menos uma raiz com multiplicidade igual a dois, seja essa a raiz r_1 , assim: $Q_{m-2}(x)=\dfrac{p_n(x)}{(x-r_1)^2}$ é um polinômio de grau $(m-2)$ e em vista da propriedade de ortogonalidade: $\int_0^1 \omega(x)\cdot Q_{m-2}(x)\cdot p_n(x)\cdot dx=\int_0^1 \omega(x)\cdot\dfrac{p_n(x)}{(x-r_1)^2}\cdot p_n(x)\cdot dx=0$.

No entanto: $Q_{m-2}(x)\cdot p_n(x)=\dfrac{p_n(x)}{(x-r_j)^2}\cdot p_n(x)=\left(\dfrac{p_n(x)}{x-r_j}\right)^2\geq 0$ e como ω(x) >0 para $0<x<1$, o valor da integral $\int_0^1 \omega(x)\cdot Q_{m-2}(x)\cdot p_n(x)\cdot dx$ é sempre positivo, contradizendo assim a hipótese original!

(b)<u>Demonstração que todas as raízes são reais e contidas no intervalo (0,+1)</u>

Considerando-se que *apenas* k [1<k ≤ n] raízes de $p_n(x)$ são reais, distintas e contidas no intervalo (0,+1) e sejam estes valores: $r_1,\ r_2,\ \ldots,\ r_k$. Desse modo:
$p_n(x)=\left[(x-r_1)\cdot(x-r_2)\cdots(x-r_k)\right]\cdot\left[(x-r_{k+1})\cdot(x-r_{k+2})\cdots(x-r_n)\right]$.
Considerando: o polinômio de grau k ≤ n: $Q_k(x)=(x-r_1)\cdot(x-r_2)\cdots(x-r_k)$ que tem as mesmas raízes reais e distintas de $p_n(x)$ contidas no intervalo (0,+1), e o polinômio de grau $n-k: T_{n-k}(x)=(x-r_{k+1})\cdot(x-r_{k+2})\cdots(x-r_n)$ que tem as mesmas raízes reais de $p_n(x)$ contidas fora do intervalo (0,+1) e os pares de raízes complexas $p_n(x)$, isto é : $T_{n-k}(x)>0$ em todos os pontos do intervalo (0,+1).
Desse modo: $Q_k(x)\cdot p_n(x)=\left[(x-r_1)\cdot(x-r_2)\cdots(x-r_k)\right]^2\cdot T_{n-k}(x)\geq 0$ em todos os pontos do intervalo (0,+1), resultando necessariamente em : $\int_0^1 \omega(x)\cdot Q_k(x)\cdot p_n(x)\cdot dx>0$, o que contradiz a propriedade de ortogonalidade de $p_n(x)$ caso $k<n$. Essa última integral só será positiva se: $k\equiv n$, isto é, se todas as raízes de $p_n(x)$ forem reais, distintas e contidas no interior do intervalo (0,+1).

Desse modo, todas as raízes dos polinômios da família de polinômios ortogonais caracterizados por: $\boxed{\int_0^1 \omega(x)\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx=\boldsymbol{C}_n\cdot\delta_{\text{mn}}\ \text{ para todo } n,\ m\ \geq 0}$
Em que: ω(x) é uma função peso genérica que deve satisfazer a: ω(x) >0 para $0<x<1$ e $p_n(x)=\prod_{i=1}^{n}(x-r_i)$, <u>são reais, distintas entre si e contidas no interior do intervalo de ortogonalidade, 0 < r_i < +1</u>.

Tal característica das raízes elimina no procedimento numérico de sua determinação a etapa de localização preliminar das mesmas, permitindo aplicar o método de Newton-

Raphson adotando como condição inicial: $r^{(0)}$ =0 na determinação da menor raiz [r_1] e $r^{(0)}$ = 1 na determinação da maior raiz [r_n].

<u>Aplicação Recursiva do Método de Newton-Raphson para a Determinação de Todas as Raízes de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$</u>

Depois de demonstrado que todas as raízes de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ são reais, distintas e contidas no interior do intervalo (0,+1) o método de Newton-Raphson é aplicado para a determinação das mesmas na forma:

(a) Determinação da Menor Raiz: x_1

Como 0 < r_1, aplica-se o método de Newton-Raphson diretamente a $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ adotando como condição inicial o valor nulo, assim:

$$\boxed{r_1^{(k+1)} = r_1^{(k)} - \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}\left[r_1^{(k)}\right]}{p_n'^{(\alpha,\beta)}\left[r_1^{(k)}\right]} \quad \text{para } k\text{=0, 1, } \cdots \quad \text{com } r_1^{(0)} = 0}$$

(b) Com o valor convergido da primeira raiz r_1, determina-se a raiz seguinte dividindo o polinômio original pelo monômio $\left(x - r_1\right)$assim: $\dfrac{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{x - r_1} = Q_{n-1}(x)$ é um polinômio em x de grau $\left(n-1\right)$, pois $\left(x - r_1\right)$ é um fator exato de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$.

O método de Newton-Raphson é então aplicado ao polinômio *deflatado* $Q_{n-1}(x)$ na forma:

$$r_2^{(k+1)} = r_2^{(k)} - \frac{Q_{n-1}\left[r_2^{(k)}\right]}{Q'_{n-1}\left[r_2^{(k)}\right]} \quad \text{para } k\text{=0 ,1, } \cdots \quad \text{com } r_2^{(0)} = r_1 + \delta, \text{sendo } \delta \approx 0 \ [10^{-4}, \text{ por exemplo}]\cdot$$

Entretanto, tal procedimento apresenta duas desvantagens:

❶ A determinação da segunda raiz é *afetada* pela precisão com que foi determinada a primeira raiz r_1, esse acúmulo de erro será agravado na determinação das raízes subsequentes, *carregando* assim os erros das raízes posteriores na determinação da cada nova raiz;

❷ O procedimento de divisão de polinômios é muito tedioso além de envolver grande número de operações, e isso será tanto maior quanto maior for o número de divisões.

Para evitar esses aspectos negativos, o seguinte procedimento alternativo é adotado, fundamentado na análise do termo: $\dfrac{Q_{n-1}\left(x\right)}{Q'_{n-1}\left(x\right)}$ que é a divisão do polinômio *deflatado* $Q_{n-1}\left(x\right)$ por sua derivada $Q'_{n-1}\left(x\right)$. Tal divisão é o inverso da derivada do logaritmo neperiano de $Q_{n-1}\left(x\right)$, assim:

$$Q_{n-1}(x) = \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{x - r_1} \Rightarrow \ln\left[Q_{n-1}(x)\right] = \ln\left[\frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{x - r_1}\right] = \ln\left[p_n^{(\alpha,\beta)}(x)\right] - \ln(x - r_1)$$

Derivando a última expressão em relação a x, obtém-se:

$\frac{Q'_{n-1}(x)}{Q_{n-1}(x)} = \frac{p_n'^{(\alpha,\beta)}(x)}{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)} - \frac{1}{x-r_1} = \frac{p_n'^{(\alpha,\beta)}(x)}{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}\left[1 - \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{p_n'^{(\alpha,\beta)}(x)}\cdot\left(\frac{1}{x-r_1}\right)\right]$. Invertendo os membros da última expressão, resulta: $\frac{Q_{n-1}(x)}{Q'_{n-1}(x)} = \frac{\frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{p_n'^{(\alpha,\beta)}(x)}}{1 - \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{p_n'^{(\alpha,\beta)}(x)}\cdot\left(\frac{1}{x-r_1}\right)}$

Substituindo a expressão acima no procedimento iterativo de determinação da segunda raiz, obtém-se:

$$\boxed{\begin{array}{l} r_2^{(k+1)} = r_2^{(k)} - \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}\left(r_2^{(k)}\right)}{p_n'^{(\alpha,\beta)}\left(r_2^{(k)}\right)}\left(\frac{1}{1 - \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}\left(r_2^{(k)}\right)}{p_n'^{(\alpha,\beta)}\left(r_2^{(k)}\right)}\left(\frac{1}{r_2^{(k)} - r_1}\right)}\right) \\ \text{para } k=0,\ 1,\ \cdots \text{ com } r_2^{(0)} = r_1 + \delta \end{array}}$$

Note que nesse novo procedimento, a divisão de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ por $x - r_1$ é evitada. Além disso, observa-se que à medida que $r_2^{(k)}$ converge para a solução $p_n^{(\alpha,\beta)}\left(r_2^{(k)}\right) \to 0$, o que implica em: $1 - \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}\left(r_2^{(k)}\right)}{p_n'^{(\alpha,\beta)}\left(r_2^{(k)}\right)}\left(\frac{1}{r_2^{(k)} - r_1}\right) \to 1$. Dessa forma, à medida que $r_2^{(k)}$ converge para a solução, o algoritmo numérico comporta-se de forma semelhante ao Newton-Raphson aplicado diretamente à $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ e o erro numérico resultante da determinação da primeira raiz deixa de afetar a determinação das demais.

O mesmo procedimento pode ser aplicado na determinação das demais raízes resultando em:

$$\boxed{r_m^{(k+1)} = r_m^{(k)} - \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}\left(r_m^{(k)}\right)}{p_n'^{(\alpha,\beta)}\left(r_m^{(k)}\right)}\cdot\left[\frac{1}{1 - \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}\left(r_m^{(k)}\right)}{p_n'^{(\alpha,\beta)}\left(r_m^{(k)}\right)}\cdot\sum_{j=1}^{m-1}\left(\frac{1}{r_m^{(k)} - r_j}\right)}\right] \quad \text{para } k=0,\ 1,\ \cdots \text{ com } r_m^{(0)} = r_{m-1} + \delta}$$

Nesse procedimento a forma mais adequada para a geração do polinômio de Jacobi é através do terceiro método, abaixo transcrito:

$$p_i^{(\alpha,\beta)}(x) = \left[x - g_i(\alpha,\beta)\right]\cdot p_{i-1}^{(\alpha,\beta)}(x) - h_i(\alpha,\beta)\cdot p_{i-2}^{(\alpha,\beta)}(x) \quad \text{para } i=1,\ 2,\ \cdots,\ n$$

com $p_{-1}^{(\alpha,\beta)}(x) \equiv 0$ e $p_0^{(\alpha,\beta)}(x) \equiv 1$.

A derivada do polinômio de Jacobi, necessária para a aplicação do método de Newton-Raphson, é também obtida dessa expressão segundo:

$$p_i'^{(\alpha,\beta)}(x) = \left[x - g_i(\alpha,\beta)\right] \cdot p_{i-1}'^{(\alpha,\beta)}(x) - h_i(\alpha,\beta)\, p_{i-2}'^{(\alpha,\beta)}(x) + p_{i-1}^{(\alpha,\beta)}(x) \quad \text{para } i = 1,\ 2,\ \cdots, n$$

com $p_{-1}'^{(\alpha,\beta)}(x) \equiv 0$ e $p_0'^{(\alpha,\beta)}(x) \equiv 0$.

Exemplo Ilustrativo: sejam α=1 e β=1, assim tem-se: $p_{-1}^{(1,1)}(x) \equiv 0$ e $p_1^{(1,1)}(x) \equiv 1$, do exemplo anterior tem-se: $g_i = \frac{1}{2}$ para $i \geq 1$ $h_1 = 0$; $h_2 = \frac{1}{20}$ e $h_3 = \frac{2}{35}$

Assim, com i=1: $p_1^{(1,1)}(x) = x - \frac{1}{2}$ e $p_1'^{(1,1)}(x) = 1$, com i=2:

$p_2^{(1,1)}(x) = \left(x - \frac{1}{2}\right) \cdot p_1^{(1,1)}(x) - \frac{1}{20}$ e $p_2'^{(1,1)}(x) = \left(x - \frac{1}{2}\right) \cdot p_1'^{(1,1)}(x) + p_1^{(1,1)}(x)$ e com i=3:

$p_3^{(1,1)}(x) = \left(x - \frac{1}{2}\right) \cdot p_2^{(1,1)}(x) - \frac{2}{35} \cdot p_1^{(1,1)}(x)$ e

$$p_3'^{(1,1)}(x) = \left(x - \frac{1}{2}\right) \cdot p_2'^{(1,1)}(x) - \frac{2}{35} \cdot p_1'^{(1,1)}(x) + p_2^{(1,1)}(x)$$

Primeira Raiz: $r_1^{(k+1)} = r_1^{(k)} - \dfrac{p_3^{(1,1)}\left(r_1^{(k)}\right)}{p_3'^{(1,1)}\left(r_1^{(k)}\right)}$ para k=1, 2, $\cdots$ com $r_1^{(0)} = 0$

k	$r_1^{(k)}$	p_1	p_2	q_2	p_3	q_3
0	0,000000	-0,5	0,2	-1	-0,071429	0,642857
1	0,111111	-0,388889	0,101235	-0,777778	-0,017147	0,346561
2	0,160588	-0,339412	0,0652	-0,678824	-0,002735	0,238459
3	0,172057	-0,327943	0,057547	-0,655886	-0,000132	0,215497
4	0,172671	-0,327329	0,057144	-0,654657	-0,0000004	0,214289
5	0,172673	-0,327327	0,057143	-0,654654	0,000000	0,214286

Em que: q_i= dp_i/dx

Segunda Raiz:

$$r_2^{(k+1)} = r_2^{(k)} - \frac{p_3^{(1,1)}\left(r_2^{(k)}\right)}{p_3'^{(1,1)}\left(r_2^{(k)}\right)} \left[\frac{1}{1 - \dfrac{p_3^{(1,1)}\left(r_2^{(k)}\right)}{p_3'^{(1,1)}\left(r_2^{(k)}\right)} \cdot \dfrac{1}{x_2^{(k)} - x_1}} \right] \quad \text{para } k = 1,\ 2,\ \cdots \text{ com } r_2^{(0)} = r_1 + 10^{-6}$$

Considerando: $G(x) = 1 - \dfrac{p_3^{(1,1)}(x)}{p_3'^{(1,1)}(x)} \cdot \dfrac{1}{x - r_1}$

k	$r_2^{(k)}$	p_1	p_2	q_2	p_3	q_3
0	0,172674	-0,327326	0,057142	-0,654652	0,0000002	0,214284
1	0,390892	-0,109108	-0,038095	-0,218217	0,010391	-0,071429
2	0,478178	-0,021822	-0,049524	-0,043643	0,002328	-0,105714
3	0,498716	-0,001284	-0,049998	-0,002567	0,000138	-0,107138
4	0,499995	-0,000005	-0,05	-0,000010	0,0000005	-0,107143
5	0,5	-0,0000000	-0,05	-0,000000	0,0000000	-0,107143

k	$G\left[r_2^{(k)}\right]$
0	-0,000005
1	1,666658
2	1,072071
3	1,003937
4	1,000015
5	1

Note que à medida que o procedimento numérico converge para a segunda raiz, G tende para 1(um), mostrando assim que o efeito da primeira raiz sobre a segunda torna-se desprezível à medida que o processo iterativo converge.

Terceira Raiz:

$$r_3^{(k+1)} = r_3^{(k)} - \frac{p_3^{(1,1)}\left(r_3^{(k)}\right)}{p_3'^{(1,1)}\left(r_3^{(k)}\right)}\left[\frac{1}{1-\frac{p_3^{(1,1)}\left(r_3^{(k)}\right)}{p_3'^{(1,1)}\left(r_3^{(k)}\right)}\cdot\left(\frac{1}{r_3^{(k)}-r_1}+\frac{1}{r_3^{(k)}-r_2}\right)}\right] \quad \text{para } k=1,\,2,\,\cdots \quad \text{com } r_3^{(0)} = r_2 + 10^{-6}$$

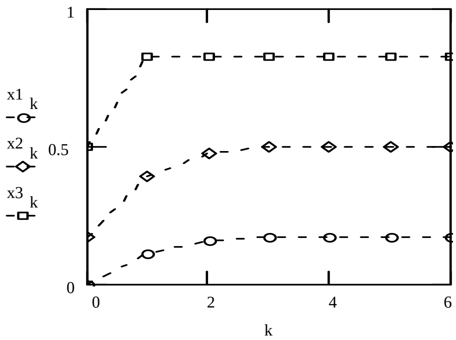
Considerando: $G(x)=1-\frac{p_3^{(1,1)}(x)}{p_3'^{(1,1)}(x)}\cdot\left(\frac{1}{x-r_1}+\frac{1}{x-r_2}\right)$

k	$r_3^{(k)}$	p_1	p_2	q_2	p_3	q_3
0	0,500001	0,000001	-0,05	0,000002	-0,0000001	-0,107143
1	0,827327	0,327327	0,57143	0,654654	-0,0000000	0,14286

k	$G\left[r_3^{(k)}\right]$
0	-0,000003
1	1,0000000

A convergência do procedimento em apenas uma iteração deve-se ao fato de o polinômio *deflatado* ser um polinômio de primeiro grau, isto é, o problema passa a ser linear.

A seguir mostram-se graficamente os processos iterativos de busca das três raízes:



Optando-se para determinar as raízes de $p_3^{(1,1)}(x)$ através dos valores característicos da matriz descrita anteriormente, tem-se:

$$A = \begin{pmatrix} 0,5 & -1,0 & 0.0 \\ -0,05 & 0,5 & -1,0 \\ 0,0 & -0,057142857 & 0,5 \end{pmatrix}$$ cujos valores característicos são:

$$\boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} 0,172673165 \\ 0,5 \\ 0,827326835 \end{pmatrix}$$ obtidos por rotina numérica apropriada.

Exemplo proposto: Calcular as raízes do polinômio de Jacobi de quarto grau com $\alpha = \beta = -1/2$

[Observação: Note que esse polinômio é na realidade o polinômio de Chebishev deslocado ao domínio de ortogonalidade $0 \le x \le +1$, sendo o intervalo de ortogonalidade original $-1 \le x \le +1$ e $T_n(x) = \cos(n \cdot \theta)$ em que θ=arccos(x)]

✧✧✧✧✧✧✧✧✧✧

QUADRATURA NUMÉRICA DA GAUSS-JACOBI

Métodos de quadratura numérica expressam, em geral, formas discretas de avaliações de integrais de variáveis *contínuas*, desse modo (após normalizar a variável de integração de modo que a integral definida de uma função qualquer permaneça entre 0 e 1), o objetivo da quadratura numérica é o cômputo de integrais do tipo:

$$\boxed{\boldsymbol{I} = \int_0^1 \omega(x) \cdot f(x) \cdot dx}$$

em que: $\omega(x)$ é uma função peso genérica que deve satisfazer $\omega(x) > 0$ para $0 < x < 1$ e $f(x)$ é uma função qualquer, contínua por partes no mesmo intervalo. Os métodos de quadratura podem assim ser classificados em dois grandes grupos:

(a) Métodos de Quadratura que Utilizam Apenas Pontos Internos

No presente caso, tem-se: $$\boxed{\boldsymbol{I} \cong \sum_{j=1}^{n} W_j \cdot f(x_j) \quad \text{em que : } 0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n < 1}$$

Os pontos discretos x_j são as abscissas e $W_j > 0$ os respectivos pesos da quadratura $\left(j = 1,\ \cdots,\ n\right)$. Método de integração numérica desse tipo é chamado de Quadratura de Gauss.

(b) Métodos de Quadratura que Utilizam Pontos Internos e Ponto(s) Externo(s)

No presente caso, têm-se os subgrupos:

(b-1) Inclui também a extremidade inferior:

$$\boxed{\boldsymbol{I} \cong \sum_{j=0}^{n} W_j \cdot f(x_j) \quad \text{em que : } 0 = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n < 1}$$

Os pontos discretos x_j são as abscissas e $W_j > 0$ os respectivos pesos da quadratura $\left(j = 0,\ 1,\ \cdots,\ n\right)$.

(b-2) Inclui também a extremidade superior:

$$\boxed{\boldsymbol{I} \cong \sum_{j=1}^{n+1} W_j \cdot f(x_j) \quad \text{em que : } 0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n < x_{n+1} = 1}$$

Os pontos discretos x_j são as abscissas e $W_j > 0$ os respectivos pesos da quadratura $\left(j = 1,\ \cdots,\ n,\ n+1\right)$.

(b-3) Inclui ambas as extremidades:

$$\boxed{\boldsymbol{I} \cong \sum_{j=0}^{n+1} W_j \cdot f(x_j) \quad \text{em que : } 0 = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n < x_{n+1} = 1}$$

Os pontos discretos x_j são as abscissas e $W_j > 0$ os respectivos pesos da quadratura $\left(j = 0,\ 1,\ \cdots,\ n,\ n+1\right)$.

Os dois primeiros métodos de integração numérica deste grupo são chamados de *Quadratura de Gauss-Radau* e o último de *Quadratura de Gauss-Lobatto*.

No caso particular de $\omega(x)=1$ e $n=1$, o método de Gauss-Lobatto recai no Método de Simpson, expresso por: $\boxed{\boldsymbol{I} \cong \frac{1}{6} \cdot f(0) + \frac{2}{3} \cdot f\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{6} \cdot f(1)}$

Considerando no método de Simpson $f\left(x\right) = x^k$ para k inteiro não negativo, $k \geq 0$, o valor exato da integral é $\boldsymbol{I} = \dfrac{1}{k+1}$ e, por inspeção, verifica-se:

k	$\boldsymbol{I}_{exato}$	$\boldsymbol{I}_{numérico}$ (método de Simpson)
0	1	1
1	1/2	1/2
2	1/3	1/3
3	1/4	1/4
4	1/5	1/4.8

Verificando-se que o método de Simpson computa de forma exata integrais de funções polinomiais de grau inferior a quatro (no máximo de terceiro grau) utilizando informações da função em apenas três pontos, o que resultaria, por interpolação de Lagrange, em um polinômio de, no máximo, segundo grau.

O problema agora reside em como determinar, em cada caso, os pontos e os pesos de quadratura que forneçam a maior precisão possível.

(a) Métodos de Quadratura que Utilizam Apenas Pontos Internos

Expressando $f\left(x\right)$ segundo a forma de interpolação de Hermite com a respectiva expressão do erro, tem-se:

$$f(x)=\sum_{j=1}^{n}\left[\ell_j\left(x\right)\right]^2\cdot f\left(x_j\right)+Q_{n-1}(x)\cdot p_n(x)+\frac{1}{\left(2\cdot n\right)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\xi}\cdot\left[p_n\left(x\right)\right]^2,$$ em que

$$Q_{n-1}(x)=\left\{\sum_{j=1}^{n}\left[f'\left(x_j\right)-2\cdot A_{jj}\cdot f(x_j)\right]\cdot\frac{\ell_j\left(x\right)}{\alpha_j}\right\}$$ [polinômio de grau n-1 em x], ξ é *algum* ponto de intervalo (0,1) e: $p_n(x)=\prod_{i=1}^{n}\left(x-x_i\right)$ [polinômio nodal, polinômio de grau n em x cujo coeficiente de x^n é igual à unidade]. Note que a informação dos valores das derivadas da função em cada um dos pontos nodais está contida em $Q_{n-1}(x)$.

O valor da integral $\boldsymbol{I}=\int_0^1\omega(x)\cdot f(x)\cdot dx$, utilizando esta expansão, será:

$$\boldsymbol{I}=\sum_{j=1}^{n}W_j\cdot f(x_j)+\left[\int_0^1\omega(x)\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx\right]+\left[\int_0^1\omega(x)\cdot\frac{1}{\left(2n\right)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\xi}.\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right]$$

Em que: $W_j=\int_0^1\omega(x)\cdot\left[\ell_j\left(x\right)\right]^2\cdot dx\;>0$ para $j=\;1,\;2,\;\cdots,\;n$.

Como: $\omega(x).\left[p_n(x)\right]^2\geq 0$ para $x\in\left[0,1\right]$, a última integral pode ser expressa [de acordo com o teorema do valor médio] na forma:

$$\int_0^1\omega(x)\cdot\frac{1}{\left(2\cdot n\right)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\xi}.\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx=\frac{1}{\left(2\cdot n\right)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\overline{\xi}}.\int_0^1\omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx,$$

onde $\overline{\xi}$ é *algum* ponto do intervalo [0,+1].

Resultando na expressão:

$$\boldsymbol{I}=\sum_{j=1}^{n}W_j\cdot f(x_j)+\left[\int_0^1\omega(x)\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx\right]+\frac{1}{\left(2\cdot n\right)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\overline{\xi}}.\left[\int_0^1\omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right]$$

É importante ressaltar que a integral computada na forma acima é **exata**, pois, até o momento, aproximação alguma foi feita para a função $f\left(x\right)$, tendo sido incluída na expansão a expressão do erro da interpolação.

As duas últimas integrais da expressão acima representam o erro da integração por quadratura simples de Gauss. Desse modo, para a forma aproximada ser a mais *precisa* possível tais termos devem assumir os menores valores possíveis. O primeiro dos termos pode ser nulo caso se adotar como pontos nodais as raízes do n'ésimo polinômio ortogonal da família:

$\int_0^1 \omega(x)\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = C_n\cdot\delta_{mn}$, essa propriedade de ortogonalidade pode também ser expressa por: $\int_0^1 \omega(x)\cdot Q_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = 0$ para todo $0 \le m < n$. Como $n-1<n$, tem-se: $\int_0^1 \omega(x)\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx \equiv 0$, e a expressão da integral assume a forma:

$$I = \sum_{j=1}^{n} W_j\cdot f(x_j) + \frac{1}{(2\cdot n)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\bar{\xi}}\cdot\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right]$$

A análise da expressão acima permite caracterizar o erro da integração por quadratura de Gauss como sendo o último termo da expressão. Assim:

$$\boxed{\mathrm{Erro}_{\mathrm{quad}} = \frac{1}{(2\cdot n)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\bar{\xi}}\cdot\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right]}$$

O que permite concluir:

(i) Termo: $\frac{1}{(2\cdot n)!} \Rightarrow$ o erro da integração decresce com o aumento de *n*;

(ii) Termo: $\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\bar{\xi}} \Rightarrow$ o erro da integração será tanto menor quanto menor for o maior valor da derivada de ordem 2·*n* de $f(x)$ no interior do intervalo, e o erro será **nulo** se $f(x)$ for um polinômio em *x* de grau inferior a 2·*n*, pois, nesse caso: $\frac{d^{2n}f(x)}{dx^{2n}} \equiv 0$ para todo valor de *x*. Além disso, é importante ressaltar que esse termo é inerentemente característico da função $f(x)$, independente da seleção dos valores das abscissas da quadratura;

(iii) Termo: $\int_0^1 \omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx \Rightarrow$ termo sempre positivo e o valor mínimo que pode assumir é o obtido quando $p_n(x)$ for o *n*'ésimo polinômio da família de polinômios ortogonais: $\int_0^1 \omega(x)\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = C_n\cdot\delta_{mn}$, além de assegurar a anulação do segundo termo do membro direito da integral.

No caso particular do peso da quadratura ser: $\omega(x) = (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}$ com $\alpha > -1$ e $\beta > -1$, $p_n(x)$ é o *n*'ésimo polinômio de Jacobi [isto é: $p_n(x) = p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$] e em vista de:

$\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot\left[p_n^{(\alpha,\beta)}(x)\right]^2\cdot dx = \int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot x^n\cdot p_n^{(\alpha,\beta)}(x)\cdot dx = \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta)}$, em que:

$\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta)} = \dfrac{n!\cdot\Gamma(n+1+\alpha)\cdot\Gamma(n+1+\beta)\cdot\Gamma(n+1+\alpha+\beta)}{(2\cdot n+1+\alpha+\beta)\cdot\left[\Gamma(2\cdot n+1+\alpha+\beta)\right]^2}$, obtém-se a fórmula de <u>Quadratura de Gauss-Jacobi</u> : $\boxed{I = \int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot f(x)\cdot dx = \sum_{j=1}^{n} W_j \cdot f(x_j) + \frac{1}{(2\cdot n)!}\left[\frac{d^{2n} f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\xi} .C_n^{(\alpha,\beta)}}$

Em que as abscissas da quadratura, $0 = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n < 1$, são as n raízes do polinômio de Jacobi $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$, $W_j = \int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot \left[\ell_j(x)\right]^2 \cdot dx \;\; > 0$ são os respectivos pesos $(j = 1, 2, \cdots, n)$ e $\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta)} = \dfrac{n!\cdot\Gamma(n+1+\alpha)\cdot\Gamma(n+1+\beta)\cdot\Gamma(n+1+\alpha+\beta)}{(2\cdot n+1+\alpha+\beta)\cdot\left[\Gamma(2\cdot n+1+\alpha+\beta)\right]^2}$.

A forma aproximada correspondente é:

$$\boxed{I = \int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot f(x)\cdot dx \cong \sum_{j=1}^{n} W_j \cdot f(x_j) \text{ com erro: Erro}_{\text{quad}} = \frac{1}{(2\cdot n)!}\left[\frac{d^{2n} f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\xi} .C_n^{(\alpha,\beta)}}$$

Os pesos da quadratura, W_j, podem ser calculados considerando na integral :

$$f_i(x) = (1-x)\cdot x\cdot\left[q_i(x)\right]^2 \quad \text{em que } q_i(x) = \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{x-x_i} \;= x^{n-1} + \cdots \text{ e } \quad q_i\left(x_j\right) = \left.\frac{dp_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{dx}\right|_{x_i} \cdot \delta_{ij}$$

Como $f_i(x)$ é um polinômio em x de grau 2.n, cujo coeficiente do termo x^{2n} é igual a -1 tem-se: $\dfrac{1}{(2\cdot n)!}\cdot\left[\dfrac{d^{2n} f_i(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\xi} = \dfrac{1}{(2\cdot n)!}\cdot\dfrac{d^{2n} f_i(x)}{dx^{2n}} = -1$ e $f_i(x_j) = (1-x_i)\cdot x_i \cdot \alpha_i^2 \cdot \delta_{ij}$,

sendo $\alpha_i = \left.\dfrac{dp_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{dx}\right|_{x_i}$. Então:

$$\int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot \left[(1-x)\cdot x\cdot q_i^2(x)\right]\cdot dx = W_i \cdot (1-x_i)\cdot x_i \cdot \alpha_i^2 - \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta)}$$

Essa mesma integração pode ser feita por partes, considerando:

$du = dx = d\left(x - x_i\right) \Rightarrow u = \left(x - x_i\right)$ e

$v = (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot \left[(1-x)\cdot x\cdot q_i^2(x)\right] = (1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta+1}\cdot q_i^2(x) \rightarrow v(0) = v(1) = 0$ e

$$dv=\frac{d\left[(1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta+1}\cdot q_i^2(x)\right]}{dx}\cdot dx=\left\{\begin{array}{l}\left[-(1+\alpha)x+(1+\beta)(1-x)\right](1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot q_i(x)+\\ +2\cdot(1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta+1}\cdot\dfrac{dq_i(x)}{dx}\end{array}\right\}q_i(x)dx=$$

$$=\left\{\left[-2-\alpha-\beta-2\cdot(n-1)\right]\cdot x^n+\cdots\right\}\cdot(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot q_i(x)\cdot dx=$$

$$=-\left[(2\cdot n+\alpha+\beta)\cdot x^n+\cdots\right]\cdot(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot\frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{(x-x_i)}\cdot dx$$

Permitindo expressar:

$u\cdot dv=-\left[(2\cdot n+\alpha+\beta)\cdot x^n+\cdots\right](1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot p_n^{(\alpha,\beta)}(x)\cdot dx\ \ e\ \ \ u(x)\cdot v(x)\Big|_{x=0}^{x=1}\equiv 0$, o que resulta em:

$\boldsymbol{I}_i=\int_0^1(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot\left[(2\cdot n+\alpha+\beta)\cdot x^n+\cdots\right]\cdot p_n^{(\alpha,\beta)}(x)\cdot dx$. Pela ortogonalidade de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$, tem-se: $\int_0^1(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot\left[(2\cdot n+\alpha+\beta)\cdot x^n+\cdots\right]\cdot p_n^{(\alpha,\beta)}(x)\cdot dx=$

$$=(2\cdot n+\alpha+\beta)\cdot\int_0^1(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot x^n\cdot p_n^{(\alpha,\beta)}(x)\cdot dx=(2\cdot n+\alpha+\beta)\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta)}$$

Logo: $\int_0^1(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot\left[(1-x)\cdot x\cdot q_i^2(x)\right]\cdot dx=(2\cdot n+\alpha+\beta)\cdot C_n^{(\alpha,\beta)}$

Igualando as duas expressões da integral, obtém-se: $\boxed{W_i=\dfrac{(2\cdot n+1+\alpha+\beta)\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta)}}{(1-x_i)\cdot x_i\cdot\alpha_i^2}}$

Note que o numerador de todos os W_i são iguais a: $(2\cdot n+1+\alpha+\beta)\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta)}=\boldsymbol{A}$, assim:

$\boxed{W_i=\dfrac{\boldsymbol{A}}{(1-x_i)\cdot x_i\cdot\alpha_i^2}\quad\text{para } i=1,\cdots,n}$, em que: $\boldsymbol{A}=(2\cdot n+1+\alpha+\beta)\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta)}$.

Outra forma de calcular esses pesos é através da consideração da integral normalizada:

$$\boldsymbol{I}=\frac{\int_0^1(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f(x)\cdot dx}{\int_0^1(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot dx}\cong\sum_{j=1}^{n}H_j\cdot f(x_j)\Rightarrow\sum_{j=1}^{n}H_j=1,\ \text{considerando:}$$

$$H_i=\frac{\boldsymbol{K}}{(1-x_i)\cdot x_i\cdot\alpha_i^2}=\boldsymbol{K}\cdot h_i\ \ \text{para } i=1,\cdots,n,\ \ \text{em que}: h_i=\frac{1}{(1-x_i)\cdot x_i\cdot\alpha_i^2}$$

Em vista de: $\sum_{i=1}^{n}H_i=1=\boldsymbol{K}\cdot\sum_{i=1}^{n}h_i\Rightarrow\boldsymbol{K}=\dfrac{1}{\sum_{i=1}^{n}h_i}$, então:

$$H_i = \frac{\boldsymbol{K}}{(1-x_i)\cdot x_i \cdot \alpha_i^2} \quad \text{para } i=1,\cdots,n, \quad \text{em que : } \boldsymbol{K} = \frac{1}{\sum\limits_{j=1}^{n} \frac{1}{(1-x_j)\cdot x_j \cdot \alpha_j^2}}$$

Desejando-se os pesos originais da quadratura, assim se procede:

$$\frac{\int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot f(x)\cdot dx}{\int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot dx} = \sum_{j=1}^{n} H_j \cdot f(x_j) = \frac{\sum\limits_{j=1}^{n} W_j \cdot f(x_j)}{\int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot dx} \Rightarrow$$

$$W_j = H_j \cdot \int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot dx = \frac{\Gamma(1+\alpha)\cdot\Gamma(1+\beta)}{\Gamma(2+\alpha+\beta)} \cdot H_j$$

(b-1) Métodos de Quadratura que Utilizam os Pontos Internos e a Extremidade Inferior

Expressando $f(x)$ segundo a forma de interpolação mista de Lagrange-Hermite com inclusão de x=0, com a respectiva expressão do erro, tem-se:

$$f(x) = \left[\frac{p_n(x)}{p_n(0)}\right]^2 \cdot f(0) + \sum_{j=1}^{n}\left\{\left[\ell_j(x)\right]^2 \cdot \frac{x}{x_j} \cdot f(x_j)\right\} + Q_{n-1}(x)\cdot x \cdot p_n(x) +$$

$$+ \frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1} f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi} \cdot x \cdot \left[p_n(x)\right]^2$$

Sendo: $Q_{n-1}(x) = \left\{\sum\limits_{j=1}^{n}\left[f'(x_j) - \left(2\cdot A_{jj} + \frac{1}{x_j}\right) f(x_j)\right] \cdot \frac{\ell_j(x)}{\alpha_j \cdot x_j}\right\}$ [polinômio de grau n−1 em x],ξ é *algum* ponto de intervalo (0,1) e: $p_n(x) = \prod\limits_{i=1}^{n}(x - x_i)$ [polinômio de grau n em x cujo coeficiente de x^n é igual a 1]. Note que os valores das derivadas da função em cada um dos pontos nodais estão contidos nos coeficientes de $Q_{n-1}(x)$.

O valor da integral $\boldsymbol{I} = \int_0^1 \omega(x)\cdot f(x)\cdot dx$, utilizando a expansão acima, será:

$$\boldsymbol{I} = \sum_{j=0}^{n} W_j \cdot f(x_j) + \left[\int_0^1 \omega(x)\cdot x \cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx\right] + \left[\int_0^1 \omega(x)\cdot x \cdot \frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1} f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi} .\left[p_n(x)\right]^2 \cdot dx\right]$$

Em que: $W_0 = \frac{1}{\left[p_n(0)\right]^2} \cdot \int_0^1 \omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2 \cdot dx \quad > 0$ e

$W_j = \frac{1}{x_j} \cdot \int_0^1 \omega(x)\cdot x \cdot \left[\ell_j(x)\right]^2 \cdot dx$ >0 para $j = 1, 2, \cdots, n$.

Como: $\omega(x)\cdot x.\left[p_n(x)\right]^2 \geq 0$ para $x \in [0,1]$ a última integral pode ser expressa [aplicando-se o teorema do valor médio] na forma:

$$\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot\frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}.\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx=\frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\bar{\xi}}.\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx$$

Em que $\bar{\xi}$ é *algum* ponto do intervalo [0,+1]. Resultando na expressão:

$$\boldsymbol{I}=\sum_{j=0}^{n}W_j\cdot f(x_j)+\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx\right]+\frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\bar{\xi}}.\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right]$$

A integral computada da forma acima é também **exata.**

Os termos: $\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx\right]+\frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\bar{\xi}}.\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right]$

representam o erro da integração por quadratura na forma expressa por $\boldsymbol{I}=\sum_{j=0}^{n}W_j\cdot f(x_j)$.

Desse modo, para esta forma aproximada ser a mais *precisa* possível, deseja-se que tais termos sejam os menores possíveis. A integral $\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx$ pode ser nula caso os pontos nodais considerados forem as raízes do *n*'ésimo polinômio ortogonal da família: $\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx=C_n\cdot\delta_{mn}$, tal propriedade de ortogonalidade pode também ser expressa na forma: $\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot Q_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx=0$ para todo $0\leq m<n$. Como $n-1<n$, assegura-se que: $\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx\equiv 0$, obtendo-se:

$$\boldsymbol{I}=\sum_{j=0}^{n}W_j\cdot f(x_j)+\frac{1}{(2\cdot n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\bar{\xi}}.\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right]$$

A análise da expressão acima permite caracterizar o erro da integração por quadratura de Radau, com inclusão da extremidade inferior, como o último termo da expressão:

$\text{Erro}_{\text{quad}}=\frac{1}{(2\cdot n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\bar{\xi}}.\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right]$, o que permite concluir:

(i) Termo: $\frac{1}{(2\cdot n+1)!}\Rightarrow$ o erro da integração decresce com o aumento de *n*;

(ii) Termo: $\left[\dfrac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\bar{\xi}}$ $\Rightarrow$ o erro da integração será tanto menor quanto menor for o maior valor da derivada de ordem (2·n+1) de $f(x)$ no interior do intervalo, e o erro será **nulo** se $f(x)$ for uma função polinomial em x de grau inferior a 2.n+1, pois nesse caso : $\dfrac{d^{2n+1}f(x)}{dx^{2n+1}} \equiv 0$ para todo valor de x. Deve-se ressaltar que o termo $\left[\dfrac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\bar{\xi}}$ é *inerente* à função $f(x)$ e seu valor independe da seleção dos valores das abscissas da quadratura;

(iii) Termo: $\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx \Rightarrow$ tal termo é sempre positivo e seu valor mínimo é obtido se $p_n(x)$ for o n'ésimo polinômio da família de polinômios ortogonais: $\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = C_n\cdot\delta_{mn}$.

No caso particular do peso da quadratura: $\omega(x)=(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}$, tem-se:

$\omega(x)\cdot x=(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta+1}$ com $\alpha>-1\ e\ \beta+1>0$, o que permite identificar: $p_n(x)$ como sendo o polinômio de Jacobi de grau n: $p_n(x)=p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x)$, resultando em:

$\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta+1}\cdot\left[p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x)\right]^2\cdot dx=\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta+1}\cdot x^n\cdot p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x)\cdot dx=\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$,em que: $\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}=\dfrac{n!\cdot\Gamma(n+1+\alpha)\cdot\Gamma(n+2+\beta)\cdot\Gamma(n+2+\alpha+\beta)}{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\cdot\left[\Gamma(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\right]^2}$

Dando origem à fórmula de <u>Quadratura de Radau com inclusão de x_0 =0</u>:

$$\boxed{\boldsymbol{I}=\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f(x)\cdot dx=\sum_{j=0}^{n} W_j\cdot f(x_j)+\frac{1}{(2\cdot n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\bar{\xi}}.\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}}$$

em que as abscissas da quadratura são: $x_0=0$ e $0<x_1<x_2<\cdots<x_n$ as n raízes do polinômio de Jacobi $p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x)$;

$$W_0=\frac{1}{\left[p_n(0)\right]^2}\int_0^1 \omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\ >0 \qquad \text{e} \qquad W_j=\frac{1}{x_j}\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot\left[\ell_j(x)\right]^2\cdot dx\ >0$$

para $j=\ 1,\ 2,\ \cdots,n$; $\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}=\dfrac{n!\cdot\Gamma(n+1+\alpha)\cdot\Gamma(n+2+\beta)\cdot\Gamma(n+2+\alpha+\beta)}{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\cdot\left[\Gamma(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\right]^2}$.

A forma aproximada correspondente é:

$\boldsymbol{I} = \int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta} \cdot f(x) \cdot dx \cong \sum_{j=0}^{n} W_j \cdot f(x_j)$, cujo erro é expresso por:

$$\text{Erro}_{\text{quad}} = \frac{1}{(2 \cdot n+1)!} \left[\frac{d^{2n+1} f(t)}{dt^{2n+1}} \right]_{t=\xi} . \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$$

Os pesos da quadratura, W_j, podem ser calculados segundo o procedimento:
(a) Peso W_0, adotando em

$\boldsymbol{I} = \int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta} \cdot f(x) \cdot dx = \sum_{j=0}^{n} W_j \cdot f(x_j) + \frac{1}{(2 \cdot n+1)!} \left[\frac{d^{2n+1} f(t)}{dt^{2n+1}} \right]_{t=\xi} . \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$ a

função: $f_0(x) = (1-x) \cdot \left[p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x) \right]^2$, $f_0(x)$ é um polinômio em x de grau $2 \cdot n+1$, cujo coeficiente do termo $x^{2 \cdot n+1}$ é igual a -1(menos um), assim :

$\frac{1}{(2 \cdot n+1)!} \left[\frac{d^{2n+1} f_0(t)}{dt^{2n+1}} \right]_{t=\xi} = -1$, $f_0(x_j) = 0$ para $j = 1, 2, \cdots, n$ e $f_0(0) = [p_n(0)]^2$ [por clareza da notação dispensou-se o sobrescrito $(\alpha, \beta+1)$ de $p_n^{(\alpha,1+\beta)}(x)$].

Obtém-se: $\boldsymbol{I}_0 = \int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta} \cdot \left[(1-x) \cdot p_n^2(x) \right] \cdot dx = W_0 \cdot \left[p_n(0) \right]^2 - \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$

A mesma integral pode ser obtida por integração por partes considerando:

$du = x^{\beta} \cdot dx \Rightarrow u(x) = \frac{x^{\beta+1}}{\beta+1} \Rightarrow$ $u(0)=0$ e

$v(x) = (1-x)^{\alpha} \cdot \left[(1-x) \cdot p_n^2(x) \right] = (1-x)^{\alpha+1} \cdot p_n^2(x) \Rightarrow v(1) = 0$. Obtém-se:

$u \cdot dv = -\left[(2 \cdot n+1+\alpha) \cdot x^n + \cdots \right] \cdot (1-x)^{\alpha} \cdot \frac{x^{\beta+1}}{\beta+1} \cdot p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x) \cdot dx$ e $u(x) \cdot v(x) \Big|_{x=0}^{x=1} \equiv 0$,

resultando em:

$$\int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta} \cdot \left[(1-x) \cdot p_n^2(x) \right] \cdot dx = \frac{1}{\beta+1} \int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta+1} \cdot \left[(2 \cdot n+1+\alpha) \cdot x^n + \cdots \right] \cdot p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x) \cdot dx$$

Pela ortogonalidade de, tem-se:

$$\int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta+1} \cdot \left[(2 \cdot n+1+\alpha) \cdot x^n + \cdots \right] \cdot p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x) \cdot dx = (2 \cdot n+1+\alpha) \cdot \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$$

Assim: $\boldsymbol{I}_0 = \int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta} \cdot \left[(1-x) \cdot p_n^2(x) \right] \cdot dx = \left(\frac{2 \cdot n+1+\alpha}{1+\beta} \right) \cdot \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$

Igualando as duas formas de $\boldsymbol{I}_0$, obtém-se:

$$\boxed{W_0 = \frac{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\cdot \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}}{(1+\beta)\cdot\left[p_n^{(\alpha,\beta+1)}(0)\right]^2}}$$

(b) <u>Peso W_i</u> para i = 1,...,n, adotando em :

$$\boldsymbol{I} = \int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot f(x)\cdot dx = \sum_{j=0}^{n} W_j \cdot f(x_j) + \frac{1}{(2\cdot n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1} f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\overline{\xi}} .\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$$, a

função $f_i(x) = (1-x)\cdot x^2 \cdot \left[q_i(x)\right]^2$ em que $q_i(x) = \dfrac{p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x)}{x-x_i} = x^{n\text{-}1} + \cdots$.

A função $f_i(x)$ é um polinômio em x de grau $2\cdot n+1$, cujo coeficiente do termo x^{2n+1} é igual a -1(menos um), isto é: $\dfrac{1}{(2\cdot n+1)!}\left[\dfrac{d^{2n+1} f_i(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\overline{\xi}} = -1$ e

$$f_i(x_j) = \begin{cases} 0 \ \text{ para } j \neq i \\ (1\text{-}x_i)\cdot x_i^2 \cdot \left[p_n'(x_i)\right]^2 \ \text{ para } j = i \end{cases}.$$

Permitindo calcular: $\boldsymbol{I}_i = \int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot f_i(x)\cdot dx = W_i \cdot (1\text{-}x_i)\cdot x_i^2 \cdot \left[p_n'(x_i)\right]^2 - \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$.

Reescrevendo a mesma integral na forma: $\boldsymbol{I}_i = \int_0^1 (1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta+2}\cdot\left[q_i(x)\right]^2\cdot dx$ e integrando por partes considerando: $du = dx = d(x-x_i) \Rightarrow u = (x-x_i)$ e

$$v(x) = (1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta+2}\cdot\left[q_i(x)\right]^2 \rightarrow v(0) = v(1) = 0$$

$$\frac{dv(x)}{dx} = (1-x)^\alpha \cdot x^{\beta+1}\cdot q_i(x)\cdot\left[-(1+\alpha)\cdot x\cdot q_i(x) + (2+\beta)\cdot(1-x)\cdot q_i(x) + 2\cdot x\cdot(1-x)\cdot\frac{dq_i(x)}{dx}\right] =$$

$$= -(1-x)^\alpha \cdot x^{\beta+1}\cdot q_i(x)\cdot\left[(2n+1+\alpha+\beta)\cdot x^n + \cdots\right]$$

Assim:

$$u\cdot dv = -\left[(2\cdot n+1+\alpha)\cdot x^n + \cdots\right](1-x)^\alpha \cdot x^{\beta+1}\cdot p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x)\cdot dx \quad e \quad u(x)\cdot v(x)\Big|_{x=0}^{x=1} \equiv 0,$$

resultando em:

$$\boldsymbol{I}_i = \int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^{\beta+1}\cdot\left[(2\cdot n+1+\alpha)\cdot x^n + \cdots\right]\cdot p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x)\cdot dx$$

. Pela ortogonalidade de $p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x)$, tem-se:

$\int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta+1} \cdot \left[(2 \cdot n+1+\alpha) \cdot x^n + \cdots\right] \cdot p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x) \cdot dx = (2 \cdot n+1+\alpha) \cdot \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$ e obtém-se: $\boldsymbol{I}_i = (2 \cdot n+1+\alpha) \cdot \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$.

Igualando as duas formas de $\boldsymbol{I}_0$, obtém-se: $\boxed{W_i = \dfrac{(2 \cdot n+2+\alpha+\beta) \cdot \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}}{(1-x_i) \cdot x_i^2 \cdot \left[p_n'(x_i)\right]^2}}$

Note que o numerador de todos os W_i (inclusive para i=0) são todos iguais a: $(2 \cdot n+2+\alpha+\beta) \cdot \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)} = \boldsymbol{A}$ e identificando: $p_{nodal}(x) = x \cdot p_n^{(\alpha,1+\beta)}(x)$ ou seja:

$p_{nodal}(x) = x \cdot p_n(x) = \prod_{k=0}^{n} (x - x_k) \Rightarrow \dfrac{dp_{nodal}(x)}{dx} = p_n(x) + x \cdot p_n'(x)$, tem-se:

$\left.\dfrac{dp_{nodal}(x)}{dx}\right|_{x=x_0=0} = p_n(0)$ e $\left.\dfrac{dp_{nodal}(x)}{dx}\right|_{x=x_i \neq 0} = x_i \cdot p_n'(x_i)$, resultando em:

$$\boxed{W_i = \frac{\boldsymbol{A}}{(1-x_i) \cdot \left[p_{nodal}'(x_i)\right]^2} \cdot \begin{cases} \left(\dfrac{1}{\beta+1}\right) & \text{para } i=0 \\ 1 & \text{para } i=1,\cdots,n \end{cases}},$$

em que: $\boldsymbol{A} = (2 \cdot n+2+\alpha+\beta) \cdot \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$.

Uma outra forma de calcular esses pesos é através da consideração da integral:

$$\boldsymbol{I} = \frac{\int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta} \cdot f(x) \cdot dx}{\int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta} \cdot dx} = \sum_{j=0}^{n} H_j \cdot f(x_j) \Rightarrow \sum_{j=0}^{n} H_j = 1,$$ considerando assim:

$$H_i = \frac{\boldsymbol{K}}{(1-x_i) \cdot \left[p_{nodal}'(x_i)\right]^2} = \boldsymbol{K} \cdot h_i \quad \text{para } i = 0,\ 1, \cdots, n.$$

Em que : $h_i = \dfrac{1}{(1-x_i) \cdot \left[p_{nodal}'(x_i)\right]^2} \cdot \begin{cases} \left(\dfrac{1}{\beta+1}\right) & \text{para } i=0 \\ 1 & \text{para } i=1,\cdots,n \end{cases}$

Mas em vista de: $\sum_{i=0}^{n} H_i = 1 = \boldsymbol{K} \cdot \sum_{i=0}^{n} h_i \Rightarrow \boldsymbol{K} = \dfrac{1}{\sum_{i=0}^{n} h_i}$.

Desejando-se os pesos originais da quadratura, assim se procede:

$$\frac{\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f(x)\cdot dx}{\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot dx} = \sum_{j=0}^{n} H_j\cdot f(x_j) = \frac{\sum_{j=0}^{n} W_j\cdot f(x_j)}{\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot dx} \Rightarrow$$

$$W_j = \left(\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot dx\right)\cdot H_j = \frac{\Gamma(1+\alpha)\cdot\Gamma(1+\beta)}{\Gamma(2+\alpha+\beta)}\cdot H_j$$

(b-2) <u>Métodos de Quadratura que Utilizam os Pontos Internos e a Extremidade Superior</u>

Expressando f(x) segundo a forma de interpolação mista de Lagrange-Hermite com inclusão de x=1, com a respectiva expressão do erro, tem-se:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n}\left\{\left[\ell_j(x)\right]^2\cdot\frac{1-x}{1-x_j}\cdot f(x_j)\right\} + \left[\frac{p_n(x)}{p_n(1)}\right]^2\cdot f(1) + Q_{n-1}(x)\cdot(1-x)\cdot p_n(x) +$$

$$-\frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}\cdot(1-x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2$$

Em que: $Q_{n-1}(x) = \left\{\sum_{j=1}^{n}\left[f'(x_j) - \left(2A_{jj} - \frac{1}{1-x_j}\right)\cdot f(x_j)\right]\cdot\frac{\ell_j(x)}{\alpha_j\cdot(1-x_j)}\right\}$ [polinômio de grau n–1 em x], ξ é *algum* ponto de intervalo (0,1) e: $p_n(x) = \prod_{i=1}^{n}(x-x_i)$ [polinômio de grau n em x cujo coeficiente de x^n é igual a 1]. Note que os valores das derivadas da função em cada um dos pontos nodais estão contidos nos coeficientes de $Q_{n-1}(x)$. O valor da integral $\boldsymbol{I} = \int_0^1 \omega(x)\cdot f(x)\cdot dx$, utilizando a expansão acima, será:

$$\boldsymbol{I} = \sum_{j=1}^{n+1} W_j\cdot f(x_j) + \int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx - \int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot\frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}.\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx$$

Em que: $W_j = \frac{1}{(1-x_j)}\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot\left[\ell_j(x)\right]^2\cdot dx\ > 0$ para $j = 1, 2, \cdots, n$ e

$$W_{n+1} = \frac{1}{\left[p_n(1)\right]^2}\int_0^1 \omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\ > 0\,.$$

Como: $\omega(x)\cdot(1-x).\left[p_n(x)\right]^2 \geq 0$ para $x\in[0,1]$, a última integral pode ser expressa por:

$$\int_0^1 \omega(x)(1-x)\frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx = \frac{1}{(2\cdot n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\overline{\xi}}\int_0^1 \omega(x)(1-x)\left[p_n(x)\right]^2 dx$$

Em que $\overline{\xi}$ é *algum* ponto do intervalo [0,+1]. Resultando na expressão:

$$I = \sum_{j=1}^{n+1} W_j \cdot f\left(x_j\right) + \int_0^1 \omega\left(x\right)\cdot\left(1-x\right)\cdot Q_{n-1}\left(x\right).p_n\left(x\right)\cdot dx - \frac{1}{\left(2n+1\right)!}\left[\frac{d^{2n+1}f\left(t\right)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}\left\{\int_0^1 \omega\left(x\right)\cdot\left(1-x\right)\cdot\left[p_n\left(x\right)\right]^2\cdot dx\right\}$$

A integral computada da forma acima é também **exata.**

Os termos: $\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot\left(1-x\right)\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx\right]$ e

$-\frac{1}{\left(2n+1\right)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}.\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot\left(1-x\right)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right]$ representam o erro da integração por quadratura na forma expressa por $\boldsymbol{I} = \sum_{j=1}^{n+1} W_j \cdot f(x_j)$.

O primeiro desses termos pode ser nulo caso se adotar como pontos nodais as raízes do n'ésimo polinômio ortogonal da família: $\int_0^1 \omega\left(x\right)\cdot\left(1-x\right)\cdot p_m\left(x\right)\cdot p_n\left(x\right)\cdot dx = \boldsymbol{C}_n \cdot \delta_{mn}$, em que propriedade de ortogonalidade pode também ser expressa por:

$\int_0^1 \omega\left(x\right)\cdot\left(1-x\right)\cdot Q_m\left(x\right)\cdot p_n\left(x\right)\cdot dx = \boldsymbol{C}_n \cdot \delta_{mn}$ para todo $0 \le m < n$. Dessa forma, como $n-1 < n$: tem-se: $\int_0^1 \omega\left(x\right)\cdot\left(1-x\right)\cdot Q_{n-1}\left(x\right).p_n\left(x\right)\cdot dx = 0$, e a expressão assume a forma:

$$\boldsymbol{I} = \sum_{j=1}^{n+1} W_j \cdot f\left(x_j\right) - \frac{1}{\left(2\cdot n+1\right)!}\left[\frac{d^{2n+1}f\left(t\right)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}.\left\{\int_0^1 \omega\left(x\right)\cdot\left(1-x\right)\cdot\left[p_n\left(x\right)\right]^2\cdot dx\right\}$$

A análise da expressão acima permite caracterizar o erro da integração por quadratura de Radau, com inclusão da extremidade superior, com sendo o último termo da expressão, assim: $\text{Erro}_{quad} = -\frac{1}{\left(2\cdot n+1\right)!}\left[\frac{d^{2n+1}f\left(t\right)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}.\left\{\int_0^1 \omega\left(x\right)\cdot\left(1-x\right)\cdot\left[p_n\left(x\right)\right]^2\cdot dx\right\}$, a análise desse termo permite concluir que:

(i) Termo: $\frac{1}{\left(2\cdot n+1\right)!} \Rightarrow$ o erro da integração decresce com o aumento de n;

(ii) Termo: $\left[\frac{d^{2n+1}f\left(t\right)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi} \Rightarrow$ o erro da integração será tanto menor quanto menor for o maior valor da derivada de ordem (2·n+1) de $f\left(x\right)$ no interior do intervalo, e o erro será **nulo** se $f\left(x\right)$ for um polinômio em x de grau inferior a (2·n+1), pois nesse caso: $\frac{d^{2n+1}f\left(x\right)}{dx^{2n+1}} \equiv 0$ para todo valor de x;

(iii) Termo: $\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx$: tal termo é sempre positivo e seu valor mínimo é obtido se $p_n(x)$ for o n'ésimo polinômio da família de polinômios ortogonais $\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = \boldsymbol{C}_n\cdot\delta_{mn}$.

No caso particular do peso da quadratura:

$\omega(x)=(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta} \Rightarrow \omega(x)\cdot(1-x)=(1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta}$ com $\alpha+1>0$ e $\beta>-1$

Identifica-se $p_n(x)$ como sendo o polinômio de Jacobi de grau n [isto é, $p_n(x)=p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)$] e em vista de:

$$\int_0^1 (1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta}\cdot\left[p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)\right]^2\cdot dx=\int_0^1 (1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta}\cdot x^n\cdot p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)\cdot dx=\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)},$$

Em que: $\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}=\dfrac{n!\cdot\Gamma(n+2+\alpha)\cdot\Gamma(n+1+\beta)\cdot\Gamma(n+2+\alpha+\beta)}{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\cdot\left[\Gamma(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\right]^2}$

Assim, a fórmula de <u>Quadratura de Radau com inclusão de $x_{n+1}=1$</u> é expressa por:

$\boldsymbol{I}=\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f(x)\cdot dx=\sum_{j=1}^{n+1} W_j\cdot f(x_j)-\dfrac{1}{(2n+1)!}\left[\dfrac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}.\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}$, em que as abscissas da quadratura são $0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n < 1$ [as <u>n</u> raízes do polinômio de Jacobi $p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)$] e $x_{n+1}=1$,

$$W_j=\frac{1}{(1-x_j)}\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot\left[\ell_j(x)\right]^2\cdot dx\ >0 \text{ para } j=1,\ 2,\ \cdots,n,$$

$$W_{n+1}=\frac{1}{\left[p_n(1)\right]^2}\int_0^1 \omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\ >0 \text{ e}$$

$$\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}=\frac{n!\cdot\Gamma(n+2+\alpha)\cdot\Gamma(n+1+\beta)\cdot\Gamma(n+2+\alpha+\beta)}{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\cdot\left[\Gamma(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\right]^2}.$$

Dando origem à fórmula de <u>Quadratura de Radau com inclusão de $x_{n+1}=1$</u>:

$\boldsymbol{I}=\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f(x)\cdot dx\cong\sum_{j=1}^{n+1} W_j\cdot f(x_j)$, cujo erro é expresso por:

$$\text{Erro}_{\text{quad}}=-\frac{1}{(2\cdot n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}$$

Os pesos da quadratura, W_j, podem ser calculados segundo o procedimento:

(a) <u>Peso W_i</u> para $i = 1,\dots, n$, adotando em

$$\boldsymbol{I} = \int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f(x)\cdot dx = \sum_{j=1}^{n+1} W_j\cdot f(x_j) - \frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi} .\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}$$ a função:

$$f_i(x) = x\cdot(1-x)^2\cdot\left[q_i(x)\right]^2$$, em que $q_i(x) = \dfrac{p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)}{x-x_i} = x^{n-1} + \cdots$. A função $f_i(x)$ é um polinômio em x de grau $2\cdot n+1$, cujo coeficiente do termo $x^{2\cdot n+1}$ é igual a $+1$ (mais um), implicando em: $\dfrac{1}{(2n+1)!}\left[\dfrac{d^{2n+1}f_i(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi} = +1$ e

$$f_i(x_j) = \begin{cases} 0 & \text{para } j \neq i \\ x_i\cdot(1-x_i)^2\cdot\left[p_n'(x_i)\right]^2 & \text{para } j = i \end{cases}.$$

Obtém-se: $\boldsymbol{I}_i = \int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f_i(x)\cdot dx = W_i\cdot x_i\cdot(1-x_i)^2\cdot\left[p_n'(x_i)\right]^2 - \boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}$.

Reescrevendo esta integral na forma: $\boldsymbol{I}_i = \int_0^1 (1-x)^{\alpha+2}\cdot x^{\beta+1}\cdot\left[q_i(x)\right]^2\cdot dx$

e integrando por partes com: $du = dx = d(x-x_i) \Rightarrow u = (x-x_i)$ e

$$v(x) = (1-x)^{\alpha+2}\cdot x^{\beta+1}\cdot\left[q_i(x)\right]^2 \rightarrow v(0) = v(1) = 0$$

$$\frac{dv(x)}{dx} = (1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta}\cdot q_i(x)\cdot\left[-(2+\alpha)\cdot x\cdot q_i(x) + (1+\beta)\cdot(1-x)\cdot q_i(x) + 2\cdot(1-x)\cdot x\cdot\frac{dq_i(x)}{dx}\right] =$$

$$= -(1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta}\cdot q_i(x)\cdot\left[(2n+1+\alpha+\beta)\cdot x^n + \cdots\right]$$

Então: $u\cdot dv = -\left[(2\cdot n+1+\alpha)\cdot x^n + \cdots\right](1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta}\cdot p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)\cdot dx$ e $u(x)\cdot v(x)\Big|_{x=0}^{x=1} \equiv 0$,

o que resulta em:

$$\boldsymbol{I}_i = \frac{1}{\beta+1}\int_0^1 (1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta}\cdot\left[(2\cdot n+1+\alpha)\cdot x^n + \cdots\right]\cdot p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)\cdot dx$$, pela ortogonalidade de $p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)$, tem-se:

$$\int_0^1 (1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta}\cdot\left[(2\cdot n+1+\alpha)\cdot x^n + \cdots\right]\cdot p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)\cdot dx = (2\cdot n+1+\alpha)\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}.$$

Logo: $\boldsymbol{I}_i = (2\cdot n+1+\alpha)\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$. Igualando-se as duas formas da integral, obtém-se:

$$\boxed{W_i = \frac{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}}{x_i\cdot(1-x_i)^2\cdot\left[p_n'(x_i)\right]^2}}$$

(b) Peso W_{n+1}, adotando em
$$\boldsymbol{I}=\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f(x)\cdot dx=\sum_{j=1}^{n+1} W_j\cdot f(x_j)-\frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\overline{\xi}}.\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}$$ a função:

$f_{n+1}(x)=x\cdot\left[p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)\right]^2$, $f_{n+1}(x)$ é um polinômio em x de grau $2\cdot n+1$, cujo coeficiente do termo $x^{2\cdot n+1}$ é igual a $+1$(mais um), implicando em: $\frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f_0(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\overline{\xi}}=1$, $f_{n+1}(x_j)=0$ para $j=1,\cdots,n$ e $f_{n+1}(1)=\left[p_n(1)\right]^2$.

Então: $\boldsymbol{I}_{n+1}=\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot\left[x\cdot p_n^2(x)\right]\cdot dx=W_{n+1}\cdot\left[p_n(1)\right]^2-\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$

A mesma integral pode ser obtida por integração por partes considerando:

$du=(1-x)^{\alpha}\cdot dx\Rightarrow u(x)=-\frac{(1-x)^{\alpha+1}}{\alpha+1}$ com $u(1)=0$ e

$v(x)=x^{\beta}\cdot\left[x\cdot p_n^2(x)\right]=x^{\beta+1}\cdot p_n^2(x)\rightarrow v(0)=0$.

Então:

$u\cdot dv=\left[(2\cdot n+1+\beta)\cdot x^n+\cdots\right]\frac{(1-x)^{\alpha+1}}{\alpha+1}\cdot x^{\beta}\cdot p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)\cdot dx$ e $u(x)\cdot v(x)\Big|_{x=0}^{x=1}\equiv 0$,

resultando em:

$\boldsymbol{I}_{n+1}=\frac{1}{\alpha+1}\int_0^1 (1-x)^{\alpha+1}\cdot x^{\beta}\cdot\left[(2\cdot n+1+\beta)\cdot x^n+\cdots\right]\cdot p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)\cdot dx$, pela ortogonalidade de $p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)$, tem-se: $\boldsymbol{I}_{n+1}=(2\cdot n+1+\beta)\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}$. Igualando-se as duas formas da integral, obtém-se: $\boxed{W_{n+1}=\frac{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}}{(1+\alpha)\cdot\left[p_n^{(\alpha+1,\beta)}(1)\right]^2}}$

Note que o numerador de todos os W_i (inclusive para i=n+1) são todos iguais a: $(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}=\boldsymbol{A}$ e identificando: $p_{nodal}(x)=(x-1)\cdot p_n^{(\alpha+1,1)}(x)$ ou, simplificando a notação:

$p_{nodal}(x)=(x-1)\cdot p_n(x)=\prod_{k=1}^{n+1}(x-x_k)\Rightarrow\frac{dp_{nodal}(x)}{dx}=p_n(x)+(x-1)\cdot p_n'(x)$, logo:

$\left.\frac{dp_{nodal}(x)}{dx}\right|_{x=x_i\neq 0}=(x_i-1)\cdot p_n'(x_i)$ e $\left.\frac{dp_{nodal}(x)}{dx}\right|_{x=x_{n+1}=1}=p_n(1)$, obtém-se:

$$\boxed{W_i = \frac{\boldsymbol{A}}{x_i \cdot \left[p'_{nodal}\left(x_i\right)\right]^2} \cdot \begin{cases} 1 \text{ para } i = 1, \cdots, n \\ \dfrac{1}{1+\alpha} \text{ para } i = n+1 \end{cases}}, \text{ em que: } \boldsymbol{A} = \frac{\left(2 \cdot n + 2 + \alpha + \beta\right) \boldsymbol{C}_n^{\left(\alpha+1,\beta\right)}}{\left(1+\alpha\right)}.$$

Outra forma de calcular esses pesos é através da consideração da integral:

$$I = \frac{\int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot f(x) \cdot dx}{\int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot dx} = \sum_{j=1}^{n+1} H_j \cdot f\left(x_j\right) \Rightarrow \sum_{j=1}^{n+1} H_j = 1, \text{ considerando assim:}$$

$$H_i = \boldsymbol{K} \cdot h_i \quad \text{para } i = 0,\ 1, \cdots, n. \text{ Em que : } h_i = \frac{1}{x_i \cdot \left[p'_{nodal}\left(x_i\right)\right]^2} \cdot \begin{cases} 1 \text{ para } i = 1, \cdots, n \\ \dfrac{1}{1+\alpha} \text{ para } i = n+1 \end{cases}$$

Mas em vista de: $\sum_{i=1}^{n+1} H_i = 1 = \boldsymbol{K} \cdot \sum_{i=1}^{n+1} h_i \Rightarrow \boldsymbol{K} = \dfrac{1}{\sum_{i=1}^{n+1} h_i}$.

Desejando-se os pesos originais da quadratura, assim se procede:

$$\frac{\int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot f(x) \cdot dx}{\int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot dx} = \sum_{j=1}^{n+1} H_j \cdot f\left(x_j\right) = \frac{\sum_{j=1}^{n+1} W_j \cdot f\left(x_j\right)}{\int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot dx} \Rightarrow$$

$$W_j = \left(\int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot dx \right) \cdot H_j = \frac{\Gamma(1+\alpha) \cdot \Gamma(1+\beta)}{\Gamma(2+\alpha+\beta)} \cdot H_j$$

<u>EXERCÍCIOS</u>:

1. Deduza as expressões dos pesos do método de quadratura de Lobatto que utiliza os pontos internos e as duas extremidades para integrais do tipo:

$$\boldsymbol{I} = \int_0^1 (1-x)^\alpha \cdot x^\beta \cdot f(x) \cdot dx \cong \sum_{i=0}^{n+1} W_i \cdot f(x_i)$$

2. Mostre como se determinam as abscissas de quadratura para o cômputo de integrais do tipo: $I = \dfrac{3}{2} \cdot \int_0^1 \left(1-x^2\right) \cdot f(x) \cdot dx$. Considere as IV possibilidades: (i) apenas pontos internos: (ii) pontos internos mais o ponto central [x=0]; (iii) pontos internos mais o ponto na superfície [x=1]; (iv)pontos internos mais o ponto central [x=0] e o ponto na superfície [x=1]. Calcule também os correspondentes pesos <u>normalizados</u>.