CAPÍTULO III - POLINÔMIOS DE JACOBI E QUADRATURA NUMÉRICA

III-i-)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 isto, pode-se compreender a relação existente entre a seleção do polinômio de Jacobi adequado ao problema em foco e, em conseqüência, 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 uma certa confusão e não sistematização na seleção destes polinômios, provocando com isto uma grande dificuldade no aprendizado do método e um não aproveitamento de seu potencial. É assim o objetivo deste capítulo apresentar as principais propriedades desta família de polinômios ortogonais e das quadraturas numéricas correspondentes. Deduções de algumas destas propriedades serão evitadas, desde que não comprometam a seqüência 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).

III-ii-)POLINÔMIOS DE JACOBI

Definição: Seja a *função peso* $\omega(x)=(1-x)^{\alpha}x^{\beta}$ com $\alpha>-1$ e $\beta>-1$ e seja o intervalo fechado [0,+1], então a *família* de polinômios de Jacobi, representado genericamente por $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ [designando *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* :

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

O polinômio de Jacobi $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ é dito ortogonal no intervalo [0,+1] em relação à função peso $\omega(x)=(1-x)^{\alpha}x^{\beta}$. A partir da propriedade de ortogonalidade (III-1), 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: $P_1^{(1,1)}(x) = ax - 1$ 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 optar-se pela segunda forma) utiliza-se a propriedade de ortogonalidade (III-1) com n=0 e m=1, assim:

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

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

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

$$\int_0^1 [x(1-x)]1(ax^2 - bx + 1)dx = a\int_0^1 [x^3 - x^2]dx - b\int_0^1 [x^2 - x^3]dx + \int_0^1 [x - x^2]dx =$$

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

e com n=1 e m=2:

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

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

logo: $a = b$ como $3a - 5b = -10 \Rightarrow a = b = 5$ e, finalmente:

$P_2^{(1,1)}(x) = 5x^2 - 5x + 1$ e $p_2^{(1,1)}(x) = x^2 - x + 0{,}2$

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

<u>Exemplo proposto:</u> Gerar a partir da definição de ortogonalidade [Eq.(III.1)] 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 (III.1) pode ser rescrita na forma:

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

assim , para m=0 e n>0, como $P_0^{(\alpha,\beta)}(x) = 1$, tem-se:

$$\int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} x^{\beta}\right] P_n^{(\alpha,\beta)}(x)dx = 0 \text{ para todo } n > 0 \qquad \text{(III.3)}$$

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

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

Adotando (III.3) na expressão acima, tem-se:

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

$$\int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} x^{\beta}\right] x P_n^{(\alpha,\beta)}(x)dx = 0 \text{ para todo } n > 1 \qquad \text{(III.4)}$$

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

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

Adotando (III.3) e (III.4)na expressão acima, tem-se:

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

$$\int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} x^{\beta}\right] x^2 P_n^{(\alpha,\beta)}(x)dx = 0 \text{ para todo } n > 2 \qquad \text{(III.5)}$$

Permitindo concluir, por indução, que:

$$\boxed{\int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} x^{\beta}\right] x^m P_n^{(\alpha,\beta)}(x)dx = 0 \text{ para todo } 0 \leq m < n} \qquad \text{(III.6)}$$

Fundamentado na Equação acima, pode-se concluir que para qualquer polinômio de grau 0≤m<n : $\boxed{Q_m(x) = \sum_{i=0}^{m} c_i x^i}$, tem-se:

$$\boxed{\int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} x^{\beta}\right] Q_m(x) P_n^{(\alpha,\beta)}(x)dx = 0 \text{ para todo } 0 \leq m < n} \qquad \text{(III.7)}$$

Uma outra propriedade importante dos polinômios de Jacobi, decorrente da utilização da Eq. (III.7) rescrita em termos de $p_n^{(\alpha,\beta)}$, diz respeito à integral:

$$I = \int_0^1 \left[(1-x)^\alpha x^\beta\right]\left[p_n^{(\alpha,\beta)}(x)\right]^2 dx \qquad \text{(III.8)}$$

assegurando-se que, dentre <u>todos</u> os polinômios de grau <u>n</u> com coeficiente de x^n unitário, o polinômio de Jacobi normalizado é o que fornece o menor valor desta integral. Para demonstrar esta propriedade, considera-se esta mesma integral aplicada ao polinômio em <u>x</u> de grau n, genérico:

$$p_n(x,\mathbf{r}) = (x-r_1)\cdot(x-r_2)\cdots(x-r_n) = \prod_{i=1}^{n}(x-r_i)\text{, onde : } \mathbf{r} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_n \end{bmatrix}\text{, assim:}$$

$$\mathbf{I}(r_1, r_2, \cdots, r_n) = \int_0^1 \left[(1-x)^\alpha x^\beta\right]\left[(x-r_1)\cdot(x-r_2)\cdots(x-r_n)\right]^2 dx$$

e

$$\frac{\partial \mathbf{I}(r_1, r_2, \cdots, r_n)}{\partial r_i} = -2\int_0^1 \left[(1-x)^\alpha x^\beta\right]\cdot q_{n-1}^{(i)}(x)\cdot p_n(x,\mathbf{r})dx = 0 \text{ para } i = 1, 2, \cdots, n$$

onde : $q_{n-1}^{(i)}(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n}(x-r_j) = \dfrac{p_n(x,\mathbf{r})}{(x-r_i)} \Rightarrow$ é um polinômio em <u>x</u> de grau (<u>n-1</u>). Portanto, se

$p_n(x,\mathbf{r}) = p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ como, de (III.7) : $\int_0^1 \left[(1-x)^\alpha x^\beta\right] Q_m(x) p_n^{(\alpha,\beta)}(x)dx = 0$, para todo o polinômio em x [$Q_m(x)$] de grau <u>m < n</u> , tem-se obrigatoriamente : $\dfrac{\partial \mathbf{I}(r_1, r_2, \cdots, r_n)}{\partial r_i} = 0$ para todo i = 1, 2, ... , n

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

$$p_2(x,b,c) = (x-r_1)\cdot(x-r_2) = x^2 - b\cdot x + c \Rightarrow$$

$$x(1-x)\left[p_2(x,b,c)\right]^2 = x^5(1-x) + \begin{pmatrix}-2x^4(1-x) & 2x^3(1-x)\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} b \\ c\end{pmatrix} +$$

$$+\begin{pmatrix} b & c\end{pmatrix}\cdot\begin{bmatrix} x^3(1-x) & -x^2(1-x) \\ -x^2(1-x) & x(1-x)\end{bmatrix}\cdot\begin{pmatrix} b \\ c\end{pmatrix} \text{ como: } \int_0^1 x^k\cdot(1-x)dx = \frac{1}{(k+2)\cdot(k+1)}\text{, tem-se:}$$

$$\mathbf{I}(b,c) = \int_0^1 x(1-x)\left[p_2(x,b,c)\right]^2 dx = \frac{1}{7\cdot 6} + \begin{pmatrix} -\frac{2}{6\cdot 5} & \frac{2}{5\cdot 4}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} b \\ c\end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b & c\end{pmatrix}\cdot\begin{bmatrix} \frac{1}{5\cdot 4} & -\frac{1}{4\cdot 3} \\ -\frac{1}{4\cdot 3} & \frac{1}{3\cdot 2}\end{bmatrix}\cdot\begin{pmatrix} b \\ c\end{pmatrix}$$

e

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial \mathbf{I}(b,c)}{\partial b} \\ \dfrac{\partial \mathbf{I}(b,c)}{\partial c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\dfrac{2}{6\cdot 5} \\ \dfrac{2}{5\cdot 4} \end{pmatrix} + 2\cdot \begin{bmatrix} \dfrac{1}{5\cdot 4} & -\dfrac{1}{4\cdot 3} \\ -\dfrac{1}{4\cdot 3} & \dfrac{1}{3\cdot 2} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \dfrac{1}{20} & -\dfrac{1}{12} \\ -\dfrac{1}{12} & \dfrac{1}{6} \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} \dfrac{1}{30} \\ -\dfrac{1}{20} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{1}{5} \end{pmatrix}$$

logo: $p_2(x,b,c) = x^2 - x + 0{,}2$, que, do exemplo ilustrativo anterior, é $p_2^{(1,1)}(x)$.

✧✧✧✧✧✧✧✧✧✧

III-iii-) 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 , Eq. (III.1), entretanto este procedimento é muito trabalhoso, pouco eficiente e de difícil programação. Neste item outras formas de geração destes polinômios serão apresentadas, discutindo-se, em cada caso, suas limitações e adequações

1^0 Método: A Partir da Propriedade de Ortogonalidade

Uma integral definida de extrema utilidade neste método é a seguinte:

$$\boxed{\int_0^1 \left[(1-x)^{\alpha} x^{\beta}\right] dx = \frac{\Gamma(1+\alpha)\Gamma(1+\beta)}{\Gamma(2+\alpha+\beta)} \quad \text{para todo } \alpha > -1 \text{ e } \beta > -1} \qquad \text{(III.8)}$$

onde a função gama de x, Γ(x), é definida por:

$$\int_0^{\infty} \left[t^{x-1} e^{-t}\right] dt = 0 \quad \text{para todo } x > -1 \Rightarrow \Gamma(1) = 1 \qquad \text{(III.9)}$$

Esta função apresenta as propriedades:

i-) $\Gamma(1+x) = x\Gamma(x)$;

ii-) $\Gamma(1+i) = (i)!$ se i: inteiro ≥ 0, implicando em:

$$\boxed{\int_0^1 \left[(1-x)^{i} x^{j}\right] dx = \frac{(i)!\,(j)!}{(1+i+j)!} \quad \text{para todo i, j : inteiros} \geq 0}$$

iii-) $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$; iv-) $\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) = -2\sqrt{\pi}$

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

$$\boxed{P_n^{(\alpha,\beta)}(x) = \sum_{i=0}^{n} (-1)^{n-i} \gamma_i^{(n)} x^i \quad \text{com } \gamma_0^{(n)} = 1 \text{ para todo } n \geq 0} \qquad \text{(III.10)}$$

tem-se, de (III.6) :

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

de (III.8), após eliminação dos termos comuns e da padronização $\gamma_0^{(n)} = 1$, tem-se o sistema linear:

$$\boxed{\sum_{i=1}^{n} (-1)^{n-i} \gamma_i^{(n)} \prod_{j=1}^{i} \left[\frac{(j+\beta+m)}{(j+1+\alpha+\beta+m)}\right] = -(-1)^n \quad \text{para todo } m < n} \qquad \text{(III.11)}$$

Exemplo Ilustrativo: 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:

$$\sum_{i=1}^{1} (-1)^{1-i} \gamma_i^{(1)} \prod_{j=1}^{i} \left[\frac{(j+1+m)}{(j+3+m)}\right] = 1 \quad \text{para todo } 0 \le m < 1, \text{ isto é : m=0, logo:}$$

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

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

$$\sum_{i=1}^{2} (-1)^{2-i} \gamma_i^{(2)} \prod_{j=1}^{i} \left[\frac{(j+1+m)}{(j+3+m)}\right] = -1 \quad \text{para todo } 0 \le m < 2, \text{ isto é : m=0 e 1, logo,}$$

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

para m=1: $-\gamma_1^{(2)} \frac{3}{5} + \gamma_2^{(2)} \frac{3 \cdot 4}{5 \cdot 6} = -1$ ou : $2\gamma_2^{(2)} - 3\gamma_1^{(2)} = -5$

a resolução deste sistema linear fornece: $\gamma_2^{(2)} = \gamma_1^{(2)} = 5$, então: $P_2^{(1,1)}(x) = 5x^2 - 5x + 1$

Exemplo proposto: Gerar a partir da Eq.(II.11) os três primeiros polinômios de Jacobi para $\alpha = \beta = -1/2$

✧✧✧✧✧✧✧✧✧✧

2^0 Método: A Partir da Geração Recursiva dos Coeficientes do Polinômio

Considerando a forma (III.10) de representação de $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$, os coeficientes $\gamma_i^{(n)}$ podem ser gerados recursivamente através de:

$$\boxed{\begin{gathered} \gamma_i^{(n)} = \frac{(n+1-i)(n+i+\alpha+\beta)}{i(i+\beta)} \gamma_{i-1}^{(n)} \quad \text{para i=1, 2, ..., n com} \\ \gamma_0^{(n)} = 1 \quad \text{para todo } n \ge 0 \end{gathered}} \qquad \text{(III.12)}$$

Exemplo Ilustrativo: 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:

$$\gamma_1^{(1)} = \frac{(2-1)(1+1+1+1)}{1(1+1)} \cdot 1 = 2 \text{ , logo: } P_1^{(1,1)}(x) = 2x - 1$$

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

$$\gamma_i^{(2)} = \frac{(3-i)(4+i)}{i(i+1)}\gamma_{i-1}^{(2)} \text{ para i=1 e 2 com } \gamma_0^{(2)} = 1,$$

logo com i=1 $\Rightarrow \gamma_1^{(2)} = \dfrac{2 \cdot 5}{1 \cdot 2} \cdot 1 = 5$

e com i=2 $\Rightarrow \gamma_2^{(2)} = \dfrac{1 \cdot 6}{2 \cdot 3}\gamma_1^{(2)} = \gamma_1^{(2)} = 5$ então: $P_2^{(1,1)}(x) = 5x^2 - 5x + 1$

<u>Exemplo proposto:</u> Gerar a partir da Eq.(III.12) os três primeiros polinômios de Jacobi para $\alpha = \beta = -1/2$

✧✧✧✧✧✧✧✧✧✧

<u>3^0 Método: A Partir da Geração Recursiva dos Polinômios</u>

Considerando a segunda forma de padronização dos polinômios de Jacobi, isto é $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ na qual o coeficiente de <u>x^n</u> é sempre igual a <u>1</u>, há a seguinte forma de gerar recursivamente estes polinômios:

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

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

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

$$\text{e } h_i^{(\alpha,\beta)} = \begin{cases} 0 \text{ para } i = 1 \\[2ex] \dfrac{(\alpha+1)(\beta+1)}{(\alpha+\beta+2)^2(\alpha+\beta+3)} \text{ para } i = 2 \\[2ex] \dfrac{(i-1)(i+\alpha-1)(i+\beta-1)(i+\alpha+\beta-1)}{(2i+\alpha+\beta-1)(2i+\alpha+\beta-2)^2(2i+\alpha+\beta-3)} \text{ para } i > 2 \end{cases} \qquad \text{(III.13)}$$

Este procedimento, em comparação com os anteriores. é extremamente adequado à implementação computacional e para o cálculo do valor numérico do polinômio para 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 <u>x</u>.

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

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

$h_1 = 0$; $h_2 = \dfrac{(1+1)(1+1)}{(1+1+2)^2(1+1+3)} = \dfrac{1}{20}$ e

$h_i = \dfrac{(i-1)(i+1-1)(i+1-1)(i+1+1-1)}{(2i+1+1-1)(2i+1+1-2)^2(2i+1+1-3)} = \dfrac{1}{4}\dfrac{(i^2-1)}{(4i^2-1)}$ para $i > 2$, logo :

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

assim, com i=1 : $p_1^{(1,1)}(x) = \left[x - g_1(1,1)\right]p_0^{(1,1)}(x) - h_1(1,1)p_{-1}^{(1,1)}(x) = x - \dfrac{1}{2}$

assim, com i=2:

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

assim, com i=3:

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

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

<u>Exemplo proposto:</u> Gerar utilizando o procedimento iterativo descrito por (III.13) os quatro primeiros polinômios de Jacobi para $\alpha = \beta = -1/2$

✧✧✧✧✧✧✧✧✧✧

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

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

o polinômio característico desta matriz é $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$, isto é: $P_n^{(\alpha,\beta)}(x) = \det(x\cdot\mathbf{I} - \mathbf{A})$. Caso um método numérico de determinação de *valores característicos* de matrizes estiver disponível, este 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:

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

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

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

III-iv-) 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 (III-7) rescrita na forma:

$$\boxed{\int_0^1 \omega(x)\cdot Q_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx=0 \ \text{ para todo } 0\le m<n} \qquad \text{(III.14)}$$

onde: ω(x) é uma função peso genérica que deve satisfazer a : ω(x) >0 no intervalo (0,+1), $Q_m(x)$ é um polinômio em x de grau inferior a n e $p_n(x)=\prod_{i=1}^{n}(x-x_i)$. Note que $p_n(x)$ não é necessariamente um polinômio de Jacobi, mas sim o n'ésimo membro de uma família de polinômios ortogonais no intervalo (0,+1) em relação à função peso genérica: ω(x).

(a)Demonstração da existência de m raízes reais, distintas e contidas no intervalo (0,+1).

Seja m=0 e $Q_m(x)=1$, assim:

$\int_0^1 \omega(x)\cdot p_n(x)\cdot dx=0$ como ω(x) >0 no intervalo (0,+1), $p_n(x)$, pelo Teorema do Valor Médio, troca pelo menos uma vez de sinal no intervalo (0,+1), sejam os m [1<m≤n] pontos distintos em que $p_n(x)$ troca de sinal no intervalo os pontos x_1 , x_2 , ... , x_m.

Para demonstrar que a multiplicidade de cada um destes pontos é 1 (um), considera-se a suposição oposta que a multiplicidade do ponto x_1 , por exemplo, é k>1, assim:

$Q_{m-2}(x) = \dfrac{p_n(x)}{(x-x_1)^2}$ é um polinômio de grau (m-2) e em vista de (III.14):
$\int_0^1 \omega(x)\cdot Q_{m-2}(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = \int_0^1 \omega(x)\cdot \dfrac{p_n(x)}{(x-x_1)^2}\cdot p_n(x)\cdot dx = 0$, mas:
$\dfrac{p_n(x)}{(x-x_1)^2}\cdot p_n(x) = \left(\dfrac{p_n(x)}{x-x_1}\right)^2 \geq 0$
e como $\omega(x) > 0$ no intervalo (0,+1), o integrando desta última integral jamais troca de sinal no intervalo, contradizendo assim a consideração inicial.

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

Considerando-se que *apenas* m [$1 < m \leq n$] raízes de $p_n(x)$ são reais, distintas e contidas no intervalo (0,+1) e sejam estes valores: x_1 , x_2 , ... , x_m. tem-se assim:
$p_n(x) = \left[(x-x_1)\cdot(x-x_2)\cdots(x-x_m)\right]\cdot\left[(x-x_{m+1})\cdot(x-x_{m+2})\cdots(x-x_n)\right]$
sejam: $Q_m(x) = \left[(x-x_1)\cdot(x-x_2)\cdots(x-x_m)\right]$ um polinômio de grau $m \leq n$ que contém as raízes reais e distintas de $p_n(x)$ contidas no intervalo (0,+1) e $R_{n-m}(x) = \left[(x-x_{m+1})\cdot(x-x_{m+2})\cdots(x-x_n)\right]$ um polinômio em x de grau $(n-m)>0$ que contém todas as raízes reais de $p_n(x)$ contidas fora do intervalo (0,+1) e as raízes complexas, isto é : $R_{n-m}(x) > 0$ em todos os pontos do intervalo (0,+1).

Deste modo: $Q_m(x)\cdot p_n(x) = \left[(x-x_1)\cdot(x-x_2)\cdots(x-x_m)\right]^2\cdot R_{n-m}(x) \geq 0$ em todos os pontos do intervalo (0,+1), resultando necessariamente em :
$\int_0^1 \omega(x)\cdot Q_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx > 0$, o que contradiz a Eq. (III.14) caso $m<n$, isto só será possível se: $m=n$, isto é todas as raízes de $p_n(x)$ são reais, distintas e contidas no interior do intervalo (0,+1).

Deste modo todas as raízes dos polinômios da família de polinômios ortogonais caracterizados por:

$$\boxed{\int_0^1 \omega(x)\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = \mathbf{C}_n\cdot\delta_{mn} \quad \text{para todo n, m } \geq 0} \qquad \text{(III.15)}$$

onde: $\omega(x)$ é uma função peso genérica que deve satisfazer a : $\omega(x) > 0$ no intervalo (0,+1) e $p_n(x) = \prod_{i=1}^{n}(x-x_i)$, são reais, distintas entre si e contidas no interior do intervalo de ortogonalidade : $0 < x < +1$.

Esta 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 : $x^{(0)} = 0$ na determinação da menor raiz [x_1] e $x^{(0)} = 1$ na determinação da maior raiz [x_m].

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

Após 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 $0 < x_1$, aplica-se o método de Newton-Raphson diretamente a $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ adotando como condição inicial o valor 0 (zero), assim:

$$\boxed{x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - \frac{P_n^{(\alpha,\beta)}\left[x_1^{(k)}\right]}{P_n'^{(\alpha,\beta)}\left[x_1^{(k)}\right]} \quad \text{para } k = 0,\ 1,\ \cdots \quad \text{com } x_1^{(0)} = 0} \qquad \text{(III.16)}$$

(b) Após obtida a convergência do procedimento (III-16) tem-se x_1 , para determinar a raiz seguinte divide-se o polinômio original pelo monômio $(x-x_1)$, assim:

$\dfrac{P_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{x-x_1} = Q_{n-1}(x)$ é um polinômio em x de grau (n-1) pois $(x-x_1)$ 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:

$$x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} - \frac{Q_{n-1}\left[x_2^{(k)}\right]}{Q'_{n-1}\left[x_2^{(k)}\right]} \quad \text{para } k = 0\ ,1,\ \cdots \quad \text{com } x_2^{(0)} = x_1 + \delta, \text{sendo } \delta \approx 0 \ \textit{[}10^{-6}\textit{, por exemplo]}$$

Este procedimento apresenta, entretanto, duas desvantagens:

❶ A determinação da segunda raiz é *afetada* pela precisão com que foi determinada a primeira raiz x_1 , este 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 isto será tanto maior quanto maior for o número de divisões.

Para evitar estes aspectos negativos, adota-se o seguinte procedimento alternativo resultante da análise do termo: $\dfrac{Q_{n-1}[x]}{Q'_{n-1}[x]}$ que nada mais é que a divisão do polinômio deflatado $Q_{n-1}(x)$ por sua derivada, isto na realidade é o inverso da derivada do logaritmo neperiano de $Q_{n-1}(x)$, assim como:

$$Q_{n-1}(x) = \frac{P_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{x-x_1} \Rightarrow \ln\left[Q_{n-1}(x)\right] = \ln\left[\frac{P_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{x-x_1}\right] = \ln\left[P_n^{(\alpha,\beta)}(x)\right] - \ln(x-x_1)$$

derivando esta última expressão em relação a x, tem-se:

$$\frac{Q'_{n-1}(x)}{Q_{n-1}(x)} = \frac{P_n'^{(\alpha,\beta)}(x)}{P_n^{(\alpha,\beta)}(x)} - \frac{1}{x-x_1} = \frac{P_n'^{(\alpha,\beta)}(x)}{P_n^{(\alpha,\beta)}(x)}\left[1 - \frac{P_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{P_n'^{(\alpha,\beta)}(x)} \cdot \left(\frac{1}{x-x_1}\right)\right]$$

assim:

$$\frac{Q_{n-1}(x)}{Q'_{n-1}(x)}=\frac{\dfrac{P_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{P_n'^{(\alpha,\beta)}(x)}}{1-\dfrac{P_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{P_n'^{(\alpha,\beta)}(x)}\cdot\left(\dfrac{1}{x-x_1}\right)}$$

Substituindo esta expressão no procedimento iterativo de determinação da segunda raiz, resulta:

$$\boxed{\begin{array}{l} x_2^{(k+1)}=x_2^{(k)}-\dfrac{P_n^{(\alpha,\beta)}\left[x_2^{(k)}\right]}{P_n'^{(\alpha,\beta)}\left[x_2^{(k)}\right]}\left[\dfrac{1}{1-\dfrac{P_n^{(\alpha,\beta)}\left[x_2^{(k)}\right]}{P_n'^{(\alpha,\beta)}\left[x_2^{(k)}\right]}\left(\dfrac{1}{x_2^{(k)}-x_1}\right)}\right] \\ \text{para } k=0,\ 1,\ \cdots \text{ com } x_2^{(0)}=x_1+\delta \end{array}} \tag{III.17}$$

Note que neste novo procedimento evita-se a divisão de $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ por $(x-x_1)$, além disto é interessante notar que à medida que $x_2^{(k)}$ vai convergindo para sua solução $P_n^{(\alpha,\beta)}\left[x_2^{(k)}\right]\to 0$ e, em conseqüência, $1-\dfrac{P_n^{(\alpha,\beta)}\left[x_2^{(k)}\right]}{P_n'^{(\alpha,\beta)}\left[x_2^{(k)}\right]}\left(\dfrac{1}{x_2^{(k)}-x_1}\right)\to 1$, deste modo, nas proximidades da 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 desta nova raiz.

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

$$\boxed{\begin{array}{l} x_m^{(k+1)}=x_m^{(k)}-\dfrac{P_n^{(\alpha,\beta)}\left[x_m^{(k)}\right]}{P_n'^{(\alpha,\beta)}\left[x_m^{(k)}\right]}\left[\dfrac{1}{1-\dfrac{P_n^{(\alpha,\beta)}\left[x_m^{(k)}\right]}{P_n'^{(\alpha,\beta)}\left[x_m^{(k)}\right]}\displaystyle\sum_{j=1}^{m-1}\left(\dfrac{1}{x_m^{(k)}-x_j}\right)}\right] \\ \text{para } k=0,\ 1,\ \cdots \text{ com } x_m^{(0)}=x_{m-1}+\delta \end{array}} \tag{III.18}$$

Neste procedimento a forma mais adequada para a geração do polinômio de Jacobi é a forma (III.13), abaixo transcrita:

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

com $p_{-1}^{(\alpha,\beta)}(x) \equiv 0$ e $p_0^{(\alpha,\beta)}(x) \equiv 1$. E a derivada do polinômio de Jacobi, necessária ao algoritmo acima, é também obtida desta expressão segundo:

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

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

Na figura abaixo, representam-se os três primeiros polinômios de Jacobi, *n*=1, 2 e 3, com α=β=1

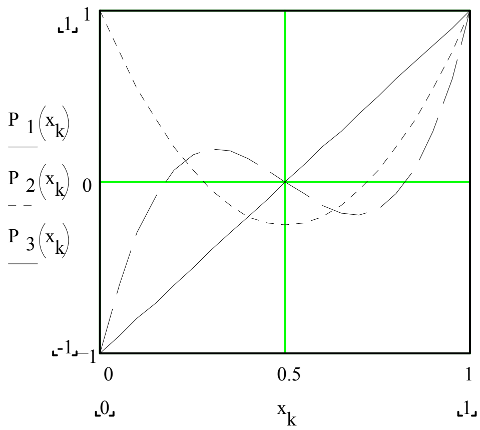


Fig.II-1-Polinômios de Jacobi
com $\alpha = \beta = 1$

<u>Exemplo Ilustrativo</u>: 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 $p_1'^{(1,1)}(x) = 1$

assim, com i=2:

$$p_2^{(1,1)}(x) = \left(x - \frac{1}{2}\right) \cdot p_1^{(1,1)}(x) - \frac{1}{20} \quad \text{e} \quad p_2'^{(1,1)}(x) = \left(x - \frac{1}{2}\right) \cdot p_1'^{(1,1)}(x) + p_1^{(1,1)}(x)$$

assim, com i=3:

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

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

Primeira Raiz: $x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - \dfrac{p_3^{(1,1)}\left[x_1^{(k)}\right]}{p_3'^{(1,1)}\left[x_1^{(k)}\right]}$ para $k = 1,\ 2,\ \cdots$ com $x_1^{(0)} = 0$

k	$x_1^{(k)}$	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:

$$x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} - \frac{p_3^{(1,1)}\left[x_2^{(k)}\right]}{p_3'^{(1,1)}\left[x_2^{(k)}\right]}\left[\frac{1}{1 - \dfrac{p_3^{(1,1)}\left[x_2^{(k)}\right]}{p_3'^{(1,1)}\left[x_2^{(k)}\right]} \cdot \dfrac{1}{x_2^{(k)} - x_1}}\right]$$

para $k = 1,\ 2,\ \cdots$ com $x_2^{(0)} = x_1 + 10^{-6}$

considerando: $G(x) = 1 - \dfrac{p_3^{(1,1)}[x]}{p_3'^{(1,1)}[x]} \cdot \dfrac{1}{x - x_1}$

k	$x_2^{(k)}$	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	$G\left[x_2^{(k)}\right]$
0	-0.000005
1	1.666658
2	1.072071
3	1.003937
4	1.000015
5	1

Note que à medida que x_2 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.

<u>Terceira Raiz</u>: $$x_3^{(k+1)} = x_3^{(k)} - \frac{p_3^{(1,1)}\left[x_3^{(k)}\right]}{p_3'^{(1,1)}\left[x_3^{(k)}\right]}\left[\frac{1}{1 - \dfrac{p_3^{(1,1)}\left[x_3^{(k)}\right]}{p_3'^{(1,1)}\left[x_3^{(k)}\right]}\cdot\left(\dfrac{1}{x_3^{(k)} - x_1} + \dfrac{1}{x_3^{(k)} - x_2}\right)}\right]$$

$$\text{para } k = 1,\ 2,\ \cdots\ \text{ com } x_3^{(0)} = x_2 + 10^{-6}$$

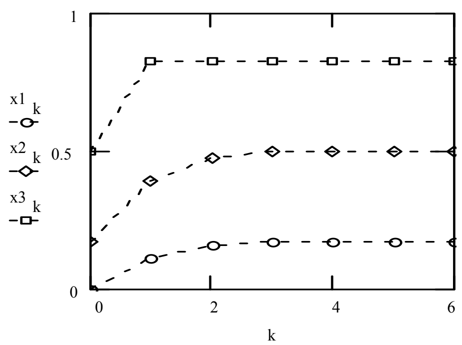
considerando: $G(x) = 1 - \dfrac{p_3^{(1,1)}[x]}{p_3'^{(1,1)}[x]}\cdot\left(\dfrac{1}{x - x_1} + \dfrac{1}{x - x_2}\right)$

k	$x_3^{(k)}$	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	0.057143	0.654654	-0.0000000	0.214286

k	$G\left[x_2^{(k)}\right]$
0	-0.000003
1	1.0000000

Note que à medida que x_3 converge para a segunda raiz, G tende para 1(um), mostrando assim que o efeito das primeira e segunda raízes sobre a terceira torna-se desprezível à medida que o processo iterativo converge.

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 acima, tem-se:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0.5 & -1.0 & 0.0 \\ -0.05 & 0.5 & -1.0 \\ 0.0 & -0.057142857 & 0.5 \end{pmatrix}$$ cujos valores característicos são:

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 0.172673165 \\ 0.5 \\ 0.827326835 \end{pmatrix}$$ 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 este 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 sendo $T_n(x) = \cos(n\Theta)$ sendo $\Theta = \arccos(x)$]

✧✧✧✧✧✧✧✧✧✧

III-v-) QUADRATURA NUMÉRICA DA GAUSS-JACOBI

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

$$\boxed{\mathbf{I} = \int_0^1 \omega(x) \cdot f(x) \cdot dx} \qquad \text{(III.19)}$$

em que: $\omega(x)$ é uma função peso genérica que deve satisfazer a : $\omega(x) > 0$ no intervalo $(0,+1)$ 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

Neste caso tem-se:

$$\boxed{\mathbf{I} \cong \sum_{j=1}^{n} W_j \cdot f(x_j) \quad \text{onde : } 0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n < 1} \qquad \text{(III.20)}$$

em que: x_j são as abscissas ou pontos da quadratura e $W_j > 0$ são os pesos da quadratura [para j= 1, 2, ..., n]. Método de integração numérica deste tipo é chamado de Quadratura de Gauss.

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

Neste caso têm-se os subgrupos:

(b-1) Inclui também a extremidade inferior:

$$\boxed{\mathbf{I} \cong \sum_{j=0}^{n} W_j \cdot f(x_j) \quad \text{onde : } 0 = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n < 1} \qquad \text{(III.21)}$$

em que: x_j são as abscissas ou pontos da quadratura e $W_j > 0$ são os pesos da quadratura [para j= 0, 1, 2, ..., n].

(b-2) Inclui também a extremidade superior:

$$\boxed{\mathbf{I} \cong \sum_{j=1}^{n+1} W_j \cdot f(x_j) \quad \text{onde : } 0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n < 1 = x_{n+1}} \qquad \text{(III.22)}$$

em que: x_j são as abscissas ou pontos da quadratura e $W_j > 0$ são os pesos da quadratura [para j= 1, 2, ..., n, n+1].

(b-3) Inclui ambas as extremidades:

$$\boxed{\mathbf{I} \cong \sum_{j=0}^{n+1} W_j \cdot f(x_j) \quad \text{onde : } 0 = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n < 1 = x_{n+1}} \qquad \text{(III.23)}$$

em que: x_j são as abscissas ou pontos da quadratura e $W_j > 0$ são os pesos da quadratura [para j= 0, 1, 2, ..., n, n+1].

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 (III-23) recai no Método de Simpson que pode ser expresso por:

$$\boxed{\mathbf{I} \cong \frac{1}{6}\cdot f(0)+\frac{2}{3}\cdot f\left(\frac{1}{2}\right)+\frac{1}{6}\cdot f(1)} \qquad \text{(III.24)}$$

Adotando $f(x)=x^k$ com $k\geq 0$ tem-se o valor exato de $\mathbf{I} = 1/(k+1)$ e, por inspeção vê-se:

k	$\mathbf{I}_{\text{exato}}$	$\mathbf{I}_{\text{numérico}}$
0	1	1
1	1/2	1/2
2	1/3	1/3
3	1/4	1/4
4	1/5	1/4.8

Desta forma, verifica-se que o método de Simpson computa de forma exata integrais de funções polinomiais de grau inferior a 4 (no máximo de 3º grau) utilizando informações da função em apenas 3 (três) pontos, o que resultaria , por interpolação de Lagrange, em um polinômio de no máximo grau 2.

O problema agora reside em como determinar, em cada caso, os pontos e os pesos de quadratura que forneçam a maior precisão possível, a questão é definir o que seja esta precisão!.

Como exemplo, o caso a-) é considerado a seguir:

(a) Métodos de Quadratura que Utilizam Apenas Pontos Internos

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

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

onde: $Q_{n-1}(x)=\left\{\sum_{j=1}^{n}\left[f'\left(x_j\right)-2A_{jj}f(x_j)\right]\cdot\frac{\ell_j(x)}{\alpha_j}\right\}$ [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 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 (III-19), utilizando esta expansão, será:

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

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

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

$\int_0^1 \omega(x)\cdot\frac{1}{(2n)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\xi}.\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx=\frac{1}{(2n)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\bar{\xi}}.\int_0^1 \omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx$, onde $\bar{\xi}$ é *algum* ponto do intervalo [0,+1]. Resultando na expressão:

$$I=\sum_{j=1}^{n} W_j\cdot f(x_j)+\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx\right]+ \\ +\frac{1}{(2n)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\bar{\xi}}.\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right] \qquad \text{(III-25)}$$

É importante ressaltar que a integral computada desta forma é **exata**, pois, até o momento, aproximação alguma foi feita na expressão de f(x), tendo sido incluída na expansão a expressão do erro da interpolação.

As duas últimas integrais da expressão (III-25) representam o erro da integração por quadratura na forma expressa por (III-21). Deste modo, para esta forma aproximada ser a mais *precisa* possível deseja-se que tais termos sejam os menores possíveis. O primeiro destes termos pode ser nulo caso se adotar como pontos nodais as raízes do n'ésimo polinômio ortogonal da família:

$\int_0^1 \omega(x)\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx=\mathbf{C}_n\cdot\delta_{mn}$, esta 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 $0\le m<n$. Desta forma, como: n-1<n, tem-se: $\int_0^1 \omega(x)\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx=0$, e a expressão (III-25) assume a forma:

$$I=\sum_{j=1}^{n} W_j\cdot f(x_j)+\frac{1}{(2n)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\bar{\xi}}.\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right] \qquad \text{(III-26)}$$

A análise desta expressão permite caracterizar o erro da integração por quadratura de Gauss, que é o último termo da expressão, como:

$$\mathrm{Erro}_{quad}=\frac{1}{(2n)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\bar{\xi}}.\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right] \qquad \text{(III-27)}$$

a análise deste termo permite concluir que:

(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 neste caso : $\frac{d^{2n}f(x)}{dx^{2n}}\equiv 0$ para todo valor de x. Além disto, é importante ressaltar que este termo é uma característica *inerente* da função f(x) e independe da seleção dos valores das abcissas da quadratura;

(iii) Termo: $\int_0^1 \omega(x)\cdot[p_n(x)]^2\cdot dx \Rightarrow$ este termo é sempre positivo e o valor mínimo que pode assumir é o obtido quando $p_n(x)$ é o n'ésimo polinômio da família de polinômios ortogonais: $\int_0^1 \omega(x)\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = \mathbf{C}_n\cdot\delta_{mn}$.

Além da anulação do segundo termo do lado direito da expressão (III-25) ser assegurada!
No caso particular do peso da quadratura:
$\omega(x) = (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}$ com $\alpha > -1$ e $\beta > -1$, identifica-se $p_n(x)$ como sendo o n'ésimo polinômio de Jacobi [isto é : $p_n(x) = p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$] e em vista de :

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

$$\boxed{\mathbf{C}_n^{(\alpha,\beta)} = \frac{n!\cdot\Gamma(n+1+\alpha)\cdot\Gamma(n+1+\beta)\cdot\Gamma(n+1+\alpha+\beta)}{(2\cdot n+1+\alpha+\beta)\cdot[\Gamma(2\cdot n+1+\alpha+\beta)]^2}} \qquad \text{(III-27)}$$

resulta na fórmula de Quadratura de Gauss-Jacobi :

$$\boxed{I = \int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f(x)\cdot dx = \sum_{j=1}^{n} W_j\cdot f(x_j) + \frac{1}{(2n)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\xi}.\mathbf{C}_n^{(\alpha,\beta)}} \qquad \text{(III-28)}$$

onde as abscissas da quadratura $0 < x_1 < x_2 < ..... < x_n < 1$ são as n raízes do polinômio de Jacobi $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$, $W_j = \int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot\left[\ell_j(x)\right]^2\cdot dx > 0$ para $j = 1, 2, \cdots, n$ e $\mathbf{C}_n^{(\alpha,\beta)}$ dado pela expressão (III-27). A forma aproximada correspondente é:

$$I = \int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f(x)\cdot dx \cong \sum_{j=1}^{n} W_j\cdot f(x_j)$$

cujo erro é: $$\text{Erro}_{quad} = \frac{1}{(2n)!}\left[\frac{d^{2n}f(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\xi}.\mathbf{C}_n^{(\alpha,\beta)} \qquad \text{(III-29)}$$

Os pesos da quadratura, W_j , podem ser calculados considerando em (III-28) :

$$f_i(x) = (1-x)\cdot x\cdot(q_i(x))^2 \quad \text{onde } q_i(x) = \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{x - x_i} = x^{n-1} + \cdots ,$$

$$\text{e} \quad q_i(x_j) = \left.\frac{dp_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{dx}\right|_{x_i}\cdot\delta_{ij}$$

deste modo $f_i(x)$ é um polinômio em x de grau 2.n , cujo coeficiente do termo x^{2n} é igual a -1 (menos um), o que implica em : $\frac{1}{(2n)!}\left[\frac{d^{2n}f_i(t)}{dt^{2n}}\right]_{t=\bar{\xi}} = \frac{1}{(2n)!}\frac{d^{2n}f_i(x)}{dx^{2n}} = -1$,

e $f_i(x_j) = (1-x_i)\cdot x_i\left(\frac{dp_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{dx}\right)^2\Bigg|_{x_i}\cdot\delta_{ij}$.

Deste modo:

$$\boxed{\int_0^1 (1-x)^\alpha\cdot x^\beta\cdot\left[(1-x)\cdot x\cdot q_i^2(x)\right]\cdot dx = W_i\cdot(1-x_i)\cdot x_i\cdot\left(\frac{dp_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{dx}\Bigg|_{x_i}\right)^2 - \mathbf{C}_n^{(\alpha,\beta)}} \quad \text{(III-30)}$$

Esta mesma integração pode ser feita por partes adotando:

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

e

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

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

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

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

assim:

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

resultando em:

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

mas devido à ortogonalidade de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ tem-se:

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

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

assim:

$$\boxed{\int_0^1 (1-x)^\alpha\cdot x^\beta\cdot\left[(1-x)\cdot x\cdot q_i^2(x)\right]\cdot dx = (2\cdot n+\alpha+\beta)\cdot\mathbf{C}_n^{(\alpha,\beta)}} \quad \text{(III-31)}$$

Igualando-se (III-30) e (III-31), tem-se:

$$\boxed{W_i = \frac{\left(2\cdot n+1+\alpha+\beta\right)\cdot \boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta)}}{\left(1-x_i\right)\cdot x_i\cdot\left(\left.\frac{dp_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{dx}\right|_{x_i}\right)^2}} \qquad \text{(III-32)}$$

Note que o numerador de todos os W_i) são todos iguais a:

$\left(2\cdot n+1+\alpha+\beta\right)\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta)} = \boldsymbol{A}$ e identificando: $p_{nodal}(x) = p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$, resulta em,

$$\boxed{W_i = \frac{\boldsymbol{A}}{\left(1-x_i\right)\cdot x_i\cdot\left[p'_{nodal}(x_i)\right]^2} \quad \text{para } i = 1,\cdots,n}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

Onde: $Q_{n-1}(x)=\left\{\sum_{j=1}^{n}\left[f'(x_j)-\left(2A_{jj}+\frac{1}{x_j}\right)f(x_j)\right]\cdot\frac{\ell_j(x)}{\alpha_j\cdot x_j}\right\}$ [polinômio de grau <u>n-1</u> em x],ξ é *algum* ponto de intervalo (0,1) e : $p_n(x)=\prod_{i=1}^{n}(x-x_i)$ [polinômio de grau <u>*n*</u> 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 (III-19), utilizando esta expansão, será:

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

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

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

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

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

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

$$I=\sum_{j=0}^{n}W_j\cdot f(x_j)+\left[\int_0^1\omega(x)\cdot x\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx\right]+$$
$$+\frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\bar{\xi}}.\left[\int_0^1\omega(x)\cdot x\cdot[p_n(x)]^2\cdot dx\right]\qquad\text{(III-33)}$$

É importante ressaltar que a integral computada desta forma é **exata**, pois, até o momento, aproximação alguma foi feita na expressão de f(x), tendo sido incluída na expansão a expressão do erro da interpolação.

As duas últimas integrais da expressão (III-33) representam o erro da integração por quadratura na forma expressa por (III-22). Deste modo, para esta forma aproximada ser a mais *precisa* possível, deseja-se que tais termos sejam os menores possíveis. O primeiro destes termos pode ser nulo caso adotar-se como pontos nodais as raízes do n'ésimo polinômio ortogonal da família:

$\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = \mathbf{C}_n\cdot\delta_{mn}$, esta propriedade de ortogonalidade pode também ser expressa por: $\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot Q_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = 0$ para todo $0 \le m < n$. Desta forma, como n-1<n, tem-se: $\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx = 0$, e a expressão (III-33) assume a forma:

$$I = \sum_{j=0}^{n} W_j\cdot f(x_j) + \frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}\cdot\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot[p_n(x)]^2\cdot dx\right] \qquad \text{(III-34)}$$

A análise desta expressão permite caracterizar o erro da integração por quadratura de Radau com inclusão da extremidade inferior, que é o último termo da expressão, assim:

$$Erro_{quad} = \frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}\cdot\left[\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot[p_n(x)]^2\cdot dx\right] \qquad \text{(III-35)}$$

a análise deste termo permite concluir que:

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

(ii) Termo: $\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}$ $\Rightarrow$ o erro da integração será tanto menor quanto menor for o maior valor da derivada de ordem (2n+1) de f(x) no interior do intervalo, e o erro será **nulo** se f(x) for um polinômio em x de grau inferior a <u>2.n+1</u>, pois neste caso : $\frac{d^{2n+1}f(x)}{dx^{2n+1}} \equiv 0$ para todo valor de <u>x</u>. Além disto, é importante ressaltar que este termo é uma característica *inerente* da função f(x) e independe da seleção dos valores das abscissas da quadratura;

(iii) Termo: $\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot[p_n(x)]^2\cdot dx \Rightarrow$ este termo é sempre positivo e o valor mínimo que pode assumir é o obtido quando $p_n(x)$ é o n'ésimo polinômio da família de polinômios ortogonais: $\int_0^1 \omega(x)\cdot x\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = \mathbf{C}_n\cdot\delta_{mn}$.

Além da anulação do segundo termo do lado direito da expressão (III-38) ser assegurada!

No caso particular do peso da quadratura :

$\omega(x) = (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta} \Rightarrow \omega(x)\cdot x = (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta+1}$ com $\alpha > -1$ e $\beta+1 > 0$ identifica-se $p_n(x)$ como sendo o polinômio de Jacobi de grau n [isto é : $p_n(x) = p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x)$] e em vista de :

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

Em que: $$\boxed{\mathbf{C}_n^{(\alpha,\beta+1)} = \frac{n!\cdot\Gamma(n+1+\alpha)\cdot\Gamma(n+2+\beta)\cdot\Gamma(n+2+\alpha+\beta)}{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\cdot[\Gamma(2\cdot n+2+\alpha+\beta)]^2}} \qquad \text{(III-36)}$$

Assim, a fórmula de Quadratura de Radau com inclusão de $x_0 = 0$ é expressa por:

$$I = \int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta} \cdot f(x) \cdot dx = \sum_{j=0}^{n} W_j \cdot f(x_j) + \frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1} f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi} . C_n^{(\alpha,\beta+1)} \qquad \text{(III-37)}$$

em que as abscissas da quadratura $x_0 = 0$ e $0 < x_1 < x_2 < ..... < x_n < 1$ são as n raízes do polinômio de Jacobi $p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x)$, $W_0 = \dfrac{1}{[p_n(0)]^2}\displaystyle\int_0^1 \omega(x)\cdot[p_n(x)]^2 \cdot dx > 0$ e

$W_j = \dfrac{1}{x_j}\displaystyle\int_0^1 \omega(x)\cdot x \cdot [\ell_j(x)]^2 \cdot dx > 0$ para $j = 1, 2, \cdots, n$ .e $\mathbf{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$ dado pela expressão (III-41). A forma aproximada correspondente é:

$$\boxed{I = \int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta} \cdot f(x) \cdot dx \cong \sum_{j=0}^{n} W_j \cdot f(x_j)} \qquad \text{(III-38)}$$

cujo erro é expresso por: $\text{Erro}_{quad} = \dfrac{1}{(2n+1)!}\left[\dfrac{d^{2n+1} f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi} . \mathbf{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}$

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

(a) Peso W_0, adotando em (III-38) :

$f_0(x) = (1-x)\cdot\left(p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x)\right)^2$, deste modo $f_0(x)$ é um polinômio em x de grau 2.n+1 , cujo coeficiente do termo x^{2n+1} é igual a -1 (menos um), o que implica em : $\dfrac{1}{(2n+1)!}\left[\dfrac{d^{2n+1} f_0(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi} = \dfrac{1}{(2n+1)!}\dfrac{d^{2n+1} f_0(x)}{dx^{2n+1}} = -1$,

$f_0(x_j) = 0$ para $j = 1, 2, \cdots, n$ e $f_0(0) = [p_n(0)]^2$ [onde por clareza da notação dispensou-se o índice superior de $p_n(x)$].

Deste modo: $$\boxed{I_0 = \int_0^1 (1-x)^{\alpha} \cdot x^{\beta} \cdot \left[(1-x)\cdot p_n^2(x)\right] \cdot dx = W_0 \cdot \left[p_n(0)\right]^2 - C_n^{(\alpha,\beta+1)}} \qquad \text{(III-39)}$$

Esta mesma integração pode ser feita por partes adotando:

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

e

$$v(x)=(1-x)^{\alpha}\cdot\left[(1-x)\cdot p_n^2(x)\right]=(1-x)^{\alpha+1}\cdot p_n^2(x)\to v(1)=0\ ,$$

assim:

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

resultando em:

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

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

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

Assim: $$\boxed{\int_0^1(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot\left[(1-x)\cdot p_n^2(x)\right]\cdot dx=\left(\frac{2\cdot n+1+\alpha}{1+\beta}\right)\cdot \mathbf{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}} \qquad \text{(III-40)}$$

Igualando (III-39) e (III-40), tem-se:

$$\boxed{W_0=\frac{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\,\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}}{(1+\beta)\cdot\left[p_n^{(\alpha,\beta+1)}(0)\right]^2}} \qquad \text{(III-41)}$$

(b) <u>Peso W_i</u> para i = 1,...,n, adotando em (III-42) :

$f_i(x)=(1-x)\cdot x^2\cdot\left[q_i(x)\right]^2$ em que $q_i(x)=\dfrac{p_n^{(\alpha,\beta+1)}(x)}{x-x_i}=x^{n\text{-}1}\ +\cdots$ deste modo $f_i(x)$ é um polinômio em x de grau <u>$2.n+1$</u> , cujo coeficiente do termo x^{2n+1} é igual a <u>-1</u> (menos um), o que implica em :

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

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

[em que, por clareza da notação, dispensou-se o índice superior de $p_n(x)$].

Deste modo:

$$\boxed{\boldsymbol{I}_i=\int_0^1(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f_i(x)\cdot dx=W_i\cdot(1\text{-}x_i)\cdot x_i^2\cdot\left[p_n'(x_i)\right]^2-\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}} \qquad \text{(III-42)}$$

Reescrevendo esta 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 com: $du=dx=d(x-x_i)\Rightarrow u=(x-x_i)$ e

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

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

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

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:

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

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

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

assim: $\boxed{\boldsymbol{I}_i=(2\cdot n+1+\alpha)\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}}$ (III-43)

Igualando-se (III-42) e (III-43), tem-se: $\boxed{W_i=\dfrac{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}}{(1-x_i)\cdot x_i^2\cdot\left[p_n'(x_i)\right]^2}}$ (III-44)

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

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

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

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

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

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

$$I=\frac{\int_0^1(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f(x)\cdot dx}{\int_0^1(1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot dx}=\sum_{j=0}^{n}H_j\cdot f(x_j)\Rightarrow\sum_{j=0}^{n}H_j=1,$$ 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 : $h_i = \dfrac{1}{(1-x_i)\cdot\left[p'_{nodal}(x_i)\right]^2}\cdot\begin{cases}\dfrac{1}{\beta+1} & \text{para } i=0\\ 1 & \text{para } i=1,\cdots,n\end{cases}$

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

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

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

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

(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: $Q_{n-1}(x) = \left\{\sum\limits_{j=1}^{n}\left[f'(x_j) - \left(2A_{jj} - \dfrac{1}{1-x_j}\right)f(x_j)\right]\cdot\dfrac{\ell_j(x)}{\alpha_j\cdot(1-x_j)}\right\}$ [polinômio de grau <u>n-1</u> 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 <u>n</u> 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 (III-19), utilizando esta expansão, será:

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

Em que: $W_j = \dfrac{1}{(1-x_j)}\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot\left[\ell_j(x)\right]^2\cdot dx > 0$ 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 na forma:

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

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

$$I = \sum_{j=1}^{n+1} W_j\cdot f(x_j) + \left[\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx\right] + \\ -\frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\bar{\xi}}\cdot\left\{\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right\} \quad \text{(III-45)}$$

É importante ressaltar que a integral computada desta forma é **exata**, pois, até o momento, aproximação alguma foi feita na expressão de *f*(*x*), tendo sido incluída na expansão a expressão do erro da interpolação.

As duas últimas integrais da expressão (III-33) representam o erro da integração por quadratura na forma expressa por (III-22). Desse modo, para esta forma aproximada ser a mais *precisa* possível, deseja-se que tais termos sejam os menores possíveis. O primeiro destes termos pode ser nulo caso se adotar como pontos nodais as raízes do *n*'ésimo polinômio ortogonal da família:

$\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = \boldsymbol{C}_n\cdot\delta_{mn}$, esta propriedade de ortogonalidade pode também ser expressa por:

$\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot Q_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = \boldsymbol{C}_n\cdot\delta_{mn}$ para todo $0\leq m<n$. Dessa forma, como $n-1<n$: tem-se: $\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot Q_{n-1}(x).p_n(x)\cdot dx =$ 0, e a expressão (III-45) assume a forma:

$$I = \sum_{j=1}^{n+1} W_j\cdot f(x_j) - \frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\bar{\xi}}\cdot\left\{\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right\} \quad \text{(III-46)}$$

A análise desta expressão permite caracterizar o erro da integração por quadratura de Radau com inclusão da extremidade superior, que é o último termo da expressão, assim:

$$Erro_{quad} = -\frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\bar{\xi}}\cdot\left\{\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx\right\} \quad \text{(III-47)}$$

a análise deste termo permite concluir que:

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

(ii) Termo: $\left[\dfrac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi}$ $\Rightarrow$ o erro da integração será tanto menor quanto menor for o maior valor da derivada de ordem (2n+1) 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+1, pois neste caso : $\dfrac{d^{2n+1}f(x)}{dx^{2n+1}} \equiv 0$ para todo valor de x. Além disto, é importante ressaltar que este termo é uma característica *inerente* da função $f(x)$ e independe da seleção dos valores das abscissas da quadratura;

(iii) Termo: $\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx$:este termo é 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: $\int_0^1 \omega(x)\cdot(1-x)\cdot p_m(x)\cdot p_n(x)\cdot dx = \boldsymbol{C}_n\cdot\delta_{mn}$. Além de assegurar a anulação do segundo termo do lado direito da expressão (III-45)!

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: $\boxed{\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)} = \dfrac{n!\cdot\Gamma(n+2+\alpha)\cdot\Gamma(n+1+\beta)\cdot\Gamma(n+2+\alpha+\beta)}{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\cdot\left[\Gamma(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\right]^2}}$ (III-37)

Assim, a fórmula de Quadratura de Radau com inclusão de x_{n+1} =0 é expressa por:

$$I=\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f(x)\cdot dx = \sum_{j=1}^{n+1} W_j\cdot f(x_j) + \frac{1}{(2n+1)!}\left[\frac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi} .\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)} \qquad \text{(III-38)}$$

em que as abscissas da quadratura são $0 < x_1 < x_2 < \ldots\ldots < x_n < 1$ [as n raízes do polinômio de Jacobi $p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)$] e x_{n+1},

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

$W_{n+1} = \dfrac{1}{\left[p_n(1)\right]^2}\int_0^1 \omega(x)\cdot\left[p_n(x)\right]^2\cdot dx > 0$ e $\boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}$ dado pela expressão (III-37).

A forma aproximada correspondente é:

$$\boxed{I=\int_0^1 (1-x)^{\alpha}\cdot x^{\beta}\cdot f(x)\cdot dx \cong \sum_{j=1}^{n+1} W_j\cdot f(x_j)} \qquad \text{(III-39)}$$

cujo erro é expresso por: $Erro_{quad} = -\dfrac{1}{(2n+1)!}\left[\dfrac{d^{2n+1}f(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi} . \boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}$

Os pesos da quadratura, W_j, podem ser calculados segundo o procedimento:
(a) Peso W_i para $i = 1,\ldots,n$, adotando em (III-39) :

$f_i(x) = x\cdot(1-x)^2\cdot[q_i(x)]^2$ em que $q_i(x) = \dfrac{p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)}{x-x_i} = x^{n\text{-}1} + \cdots$ deste modo $f_i(x)$ é um polinômio em x de grau *2.n+1* , cujo coeficiente do termo x^{2n+1} é igual a +1 (mais um), o que implica em :

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

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

[em que, por clareza da notação, dispensou-se o índice superior de $p_n(x)$].
Deste modo:

$$\boxed{\boldsymbol{I}_i = \int_0^1 (1-x)^\alpha\cdot x^\beta\cdot f_i(x)\cdot dx = W_i\cdot x_i\cdot(1\text{-}x_i)^2\cdot[p_n'(x_i)]^2 - \boldsymbol{C}_n^{(\alpha+1,\beta)}} \quad \text{(III-42)}$$

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

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

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

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

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

assim:

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

resultando em:

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

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

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

assim: $\boxed{\boldsymbol{I}_i = (2\cdot n+1+\alpha)\cdot\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}}$ (III-43)

Igualando-se (III-42) e (III-43), tem-se: $\boxed{W_i = \dfrac{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}}{(1-x_i)\cdot x_i^2\cdot\left[p'_n(x_i)\right]^2}}$ (III-44)

(a) Peso W_{n+1} , adotando em (III-39) :

$f_{n+1}(x) = x\cdot\left[p_n^{(\alpha+1,\beta)}(x)\right]^2$, deste modo $f_0(x)$ é um polinômio em x de grau 2.n+1 , cujo coeficiente do termo x^{2n+1} é igual a -1 (menos um), o que implica em : $\dfrac{1}{(2n+1)!}\left[\dfrac{d^{2n+1}f_0(t)}{dt^{2n+1}}\right]_{t=\xi} = \dfrac{1}{(2n+1)!}\dfrac{d^{2n+1}f_0(x)}{dx^{2n+1}} = -1$,

$f_0(x_j) = 0$ para $j = 1, 2, \cdots, n$ e $f_0(0) = [p_n(0)]^2$ [onde por clareza da notação dispensou-se o índice superior de $p_n(x)$].

Deste modo: $\boxed{\int_0^1 (1-x)^\alpha\cdot x^\beta\cdot\left[(1-x)\cdot p_n^2(x)\right]\cdot dx = W_0\cdot[p_n(0)]^2 - \mathbf{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}}$ (III-39)

Esta mesma integração pode ser feita por partes adotando:

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

e

$v(x) = (1-x)^\alpha\cdot\left[(1-x)\cdot p_n^2(x)\right] = (1-x)^{\alpha+1}\cdot p_n^2(x) \to v(1) = 0$,

assim:

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

resultando em:

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

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

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

Assim: $\boxed{\int_0^1 (1-x)^\alpha\cdot x^\beta\cdot\left[(1-x)\cdot p_n^2(x)\right]\cdot dx = \left(\dfrac{2\cdot n+1+\alpha}{1+\beta}\right)\cdot\mathbf{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}}$ (III-40)

Igualando (III-39) e (III-40), tem-se:

$$\boxed{W_0 = \frac{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}}{(1+\beta)\cdot\left[p_n^{(\alpha,\beta+1)}(0)\right]^2}} \qquad \text{(III-41)}$$

Note que o numerador de todos os W_i (inclusive para i=0) são todos iguais a:

$$\frac{(2\cdot n+2+\alpha+\beta)\boldsymbol{C}_n^{(\alpha,\beta+1)}}{(1+\beta)}=\boldsymbol{A}$$ e identificando: $p_{nodal}(x)=x\cdot p_n^{(\alpha,1+\beta)}(x)$ ou, simplificando a notação:

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

<u>EXERCÍCIOS</u>:

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

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

2. Mostre como se determinam as abscissas de quadratura para o cômputo de integrais do tipo: $I = \frac{3}{2} \cdot \int_0^1 \left(1 - x^2\right) \cdot f(x) \cdot dx$. 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>.