

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

Programa de Pós-Graduação em Matemática



**DESIGUALDADES QUE GARANTEM A CONVERGÊNCIA
DO MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON PARA OS ZEROS DO
POLINÔMIO ULTRAESFÉRICO NO CASO PRINCIPAL**

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

Lourenço de Lima Peixoto

Orientador: Dr. Ricardo Hiroshi Caldeira Takahashi

Coorientador: Dr. Frederico Ferreira Campos, filho

Belo Horizonte, 1 de julho de 2015

© 2015, Lourenço de Lima Peixoto.
Todos os direitos reservados

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca do ICEx - UFMG

Peixoto, Lourenço de Lima.

P377d Desigualdades que garantem a convergência do método de Newton-Raphson para os zeros do polinômio ultrasférico no caso principal / Lourenço de Lima Peixoto. — Belo Horizonte, 2015.
ix, 91f. : il. ; 29cm.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Minas Gerais – Departamento de Matemática

Orientador: Ricardo Hiroshi Caldeira Takahashi
Coorientador: Frederico Ferreira Campos, filho

1. Matemática - Teses. 2. Newton-Raphson, método Teses. 3 Desigualdades (Matemática) - Teses. I. Orientador. II Coorientador. III. Título.

517.2(043)



FOLHA DE APROVAÇÃO

Desigualdades que garantem a convergência do método de Newton-Raphson para os zeros do polinômio ultrasférico no caso principal

LOURENÇO DE LIMA PEIXOTO

Dissertação defendida e aprovada pela banca examinadora constituída pelos Senhores:

Prof. Ricardo Hiroshi Caldeira Takahashi
UFMG

Prof. Frederico Ferreira Campos, filho
DCC/UFMG

Profª. Denise Burgarelli Duczmal
UFMG

Prof. Rodney Josue Biezuner
UFMG

Prof. Dimitar Kolev Dimitrov
UNESP

Belo Horizonte, 01 de julho de 2015.

Agradecimentos

Em primeiro lugar, à vida por mais este aprendizado.

Aos meus queridos pais Antônio Carlos e Márcia. A Melina e à querida Heleninha. Ao Geraldinho, pelo companheirismo e pela compreensão inestimáveis. Ao Luigi também! À toda minha família e aos meus amigos, o meu sincero agradecimento.

Ao caro professor Frederico, por mais esta grande parceria de estudos e descobertas. Obrigado pela constante atenção e pelas proveitosas sequências de reuniões e colóquios rapidamente convergentes!

Ao caro professor Takahashi, por aceitar minhas idéias e propostas para este trabalho. Muito obrigado pela seriedade, confiança e receptividade com que fui tratado desde o começo.

Novamente aos meus dois professores orientadores, o meu sincero agradecimento por compreenderem meus anseios neste Mestrado e pelo estímulo e incentivo.

A todos os professores que tive na UFMG. Agradeço a cada um pelo profissionalismo e pela dedicação. Obrigado pelo aprendizado e pelo imenso amadurecimento matemático que adquiri com os senhores!

Aos meus queridos colegas Pedro Franklin, Pedro Daldegan, Lílian, Lorena, Danilo, Silvério, Cláudia, Natália, Vinícius e tantos outros. Muito obrigado por poder contar sempre com vocês! Obrigado pelo suporte, pela amizade e pelo carinho.

Aos meus alunos e colegas de trabalho do IFMG – *Campus Congonhas*.

Ao caro professor Dimitar, por questionar-me certa vez sobre a convergência de que tratamos neste trabalho.

À CAPES, pelo auxílio financeiro.

“Se experimentar prazer com a Matemática, não a esquecerá facilmente e haverá, então, uma grande probabilidade de que ela se torne alguma coisa mais: uma ocupação favorita, uma ferramenta profissional, a própria profissão, ou uma grande ambição.”

George Pólya (1887-1985)

Resumo

Os n pontos da quadratura de Gauss-Gegenbauer são os zeros do polinômio ultrasférico de grau n . O tradicional e mais amplamente utilizado método do autossistema consiste em calcular os pontos como sendo os autovalores de uma matriz simétrica tridiagonal cujos autovetores podem ser utilizados para o cálculo dos respectivos pesos. Alternativamente o método de Newton-Raphson pode fornecer tais pontos e pesos utilizando algumas propriedades dos polinômios ultrasféricos. Neste trabalho demonstramos que, se forem utilizadas determinadas aproximações iniciais, o método de Newton-Raphson será, de fato, convergente para os zeros dos polinômios ultrasféricos no caso $0 < \lambda < 1$. Consequentemente obtemos algumas desigualdades para os zeros dos polinômios ultrasféricos. Além disto, comparamos a exatidão e o tempo de execução de ambos os métodos: autossistema e Newton-Raphson.

Palavras-chave. Gauss-Gegenbauer, autossistema, Newton-Raphson, desigualdades para zeros de polinômios ultrasféricos

Abstract

The n points of Gauss-Gegenbauer quadrature are the zeros of the ultraspherical polynomial of degree n . The traditional and most-widely used eigensystem method computes the points as the eigenvalues of a symmetric tridiagonal matrix whose eigenvectors can be used to compute the corresponding weights. Alternatively the Newton-Raphson method can provide such points and weights using some properties of ultraspherical polynomials. In this work we show that if certain initial guesses are used, the Newton-Raphson method is in fact convergent for zeros of ultraspherical polynomials in the case $0 < \lambda < 1$. As a result we obtain some inequalities for zeros of ultraspherical polynomials. In addition, we compare the accuracy and computation time of both methods: eigensystem and Newton-Raphson.

Keywords. Gauss-Gegenbauer, eigensystem, Newton-Raphson, inequalities for zeros of ultraspherical polynomials

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Zeros dos polinômios ultrasféricos	1
1.2	Cálculo dos zeros dos polinômios ultrasféricos	2
1.3	Objetivos	3
1.4	Descrição dos próximos capítulos	3
2	Polinômios Ortogonais	5
2.1	Propriedades	5
2.2	Polinômios ortogonais clássicos	17
2.3	Quadratura de Gauss	20
3	Polinômios de Gegenbauer	24
3.1	Polinômios ortogonais, mônicos e ortonormais	25
3.2	Polinômios trigonométricos	28
3.3	Quadratura de Gauss-Gegenbauer	30
4	Cálculo dos pontos e pesos	33
4.1	Método do autossistema	33
4.2	Método de Newton-Raphson	34
4.2.1	Principais referências	37
4.2.2	Outros métodos iterativos	40
4.2.3	Aproximação inicial	42
4.3	Comparação dos métodos	43
4.3.1	Melhor algoritmo para Newton-Raphson	44
4.3.2	Cálculos	49

5	Análise da convergência de Newton-Raphson	54
5.1	Preliminares	54
5.2	Teorema	55
5.3	Consequências	64
6	Conclusões e considerações finais	75
6.1	Sobre o método de Newton-Raphson	75
6.2	Sobre os Teoremas 5.2, 5.5 e 5.6	76
6.3	Resultados novos	76
6.4	Trabalhos futuros	77
A	Algoritmos	78
A.1	Algoritmos tipo I	78
A.2	Algoritmos tipo II	81
A.3	Algoritmos tipo III	84
	Referências	87

Capítulo 1

Introdução

O objetivo principal deste trabalho é apresentar condições suficientes para que o método de Newton-Raphson possua convergência garantida para os zeros dos polinômios ultraesféricos no caso principal. Os nossos objetivos secundários são: apresentação de um algoritmo para o método de Newton-Raphson e comparação de tal método com o método do autossistema para os pontos e pesos da quadratura de Gauss-Gegenbauer. Devido às condições dadas para a convergência, nós obtemos outros resultados relacionados aos zeros dos polinômios ultraesféricos.

Neste capítulo citaremos algumas aplicações dos zeros dos polinômios ultraesféricos, introduziremos a discussão sobre o cálculo para tais zeros e detalharemos os nossos objetivos.

1.1 Zeros dos polinômios ultraesféricos

Os polinômios ortogonais de Gegenbauer $P_n^{(\lambda)}$, também chamados de *polinômios ultraesféricos*, são um caso particular dos polinômios ortogonais de Jacobi $P_n^{(\alpha, \beta)}$ quando $\alpha = \beta = \lambda - \frac{1}{2}$ com $\lambda > -\frac{1}{2}$ e $\lambda \neq 0$. O caso em que $0 < \lambda < 1$ é chamado de “caso principal” por Szegő [48] e nós adotaremos esta mesma denominação neste trabalho. Quando $\lambda = 1/2$ ou $\lambda = 1$ temos os casos especiais de Legendre e de Chebyshev de 2ª espécie, respectivamente.

Os zeros dos polinômios ortogonais possuem diversas aplicações. Daremos alguns exemplos para os zeros dos polinômios ultraesféricos. Um dos empregos mais interessantes de tais zeros está na quadratura de Gauss-Gegenbauer que aproxima integrais de Riemann do tipo

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^{\lambda-\frac{1}{2}} f(x) dx, \quad \lambda > -\frac{1}{2}, \lambda \neq 0.$$

Os zeros do polinômio ultraesférico de grau n são os pontos desta quadratura. Particular-

mente quando $\lambda = 1/2$ tem-se o caso mais conhecido da quadratura de Gauss-Legendre que aproxima integrais de Riemman da forma

$$\int_{-1}^1 f(x) dx.$$

Esta última quadratura possui várias utilizações práticas. Apenas para citar, os pontos e os pesos da quadratura de Gauss-Legendre são utilizados para fazer cálculos de previsões atmosféricas e de modelos climáticos, ver [53].

Outro motivo para o interesse sobre os zeros dos polinômios ultrasféricos é devido à bela interpretação eletrostática que eles admitem. De acordo com Szegö [49] tais zeros são os pontos de equilíbrio de n cargas unitárias distribuídas no intervalo $(-1, 1)$ quando elas estão sob a ação do campo gerado por duas cargas iguais a $\lambda/2 + 1/4$ posicionadas nos pontos -1 e 1 do eixo real.

Mais um exemplo da aplicação dos zeros dos polinômios ultrasféricos está no papel fundamental desempenhado por eles nas provas de algumas desigualdades clássicas, como citam Dimitrov e Nikolov [19].

Segundo Bracciali e Andrade [10], em virtude de suas aplicações, a localização precisa destes zeros tem desafiado a curiosidade de vários célebres matemáticos nos dois últimos séculos.

1.2 Cálculo dos zeros dos polinômios ultrasféricos

O tradicional método do autossistema para o cálculo dos zeros dos polinômios ultrasféricos consiste em utilizar uma matriz simétrica tridiagonal cujos autovalores são os zeros destes polinômios. Além disto, os autovetores desta matriz podem ser utilizados para o cálculo dos pesos da quadratura de Gauss-Gegenbauer.

Apesar de elegante, o método do autossistema não é o mais preciso no caso em que $\lambda = 1/2$. Veja [34, 47, 53]. Em tais trabalhos são apresentados métodos iterativos, baseados em zeros de função, que são mais precisos do que o autossistema. Entretanto estes métodos que se baseiam em zeros de função necessitam de aproximações iniciais suficientemente boas para a convergência.

O método iterativo de Newton-Raphson pode ser utilizado para calcular os zeros dos polinômios ultrasféricos no caso principal $0 < \lambda < 1$. Todavia, a dúvida sobre a convergência irá persistir. Até o presente momento temos conhecimento da convergência deste método apenas no caso $\lambda = 1/2$ que foi demonstrada por Petras [43]. A incerteza da convergência no caso principal é o que motivou este trabalho.

Nossa preferência pela demonstração da convergência de Newton-Raphson se justifica por três motivos. Em primeiro lugar, porque são conhecidas algumas condições que podem garantir a sua convergência, ver [7, 14, 18]. Em segundo lugar, porque importantes obras tais como [44, 46] sugerem este método para tais zeros. Por último, porque geralmente métodos melhorados como, por exemplo, [34, 47] baseiam-se nele. Sobretudo o método de Newton-Raphson possui convergência quadrática e pode ser utilizado facilmente com os polinômios ultraesféricos devido às fórmulas e propriedades destes polinômios. Ao longo deste trabalho iremos justificar nossos motivos com mais detalhes.

1.3 Objetivos

Nosso objetivo principal é apresentar condições suficientes para que o método de Newton-Raphson possua a convergência garantida para os zeros dos polinômios ultraesféricos no caso principal $0 < \lambda < 1$.

Dentre os nossos objetivos secundários estão: a apresentação de um algoritmo para o método de Newton-Raphson e a comparação de sua eficiência no que diz respeito à exatidão e ao tempo de execução com o método do autossistema para a quadratura de Gauss-Gegenbauer no caso principal.

Nossa ferramenta será um teorema em Demidovich e Maron [18] que apresenta certas condições suficientes para a convergência de Newton-Raphson. Basicamente iremos demonstrar que tais condições são satisfeitas pelos polinômios ultraesféricos.

1.4 Descrição dos próximos capítulos

No Capítulo 2 iremos apresentar os polinômios ortogonais e suas principais propriedades. Na Seção 2.3 serão dadas a quadratura de Gauss e a demonstração do método do autossistema.

O Capítulo 3 irá tratar dos polinômios ortogonais, mônicos, ortonormais e trigonométricos de Gegenbauer, além da quadratura de Gauss-Gegenbauer.

O Capítulo 4 é destinado à comparação das eficiências dos métodos do autossistema e de Newton-Raphson. A Seção 4.2 irá introduzir o método de Newton-Raphson no cálculo dos zeros dos polinômios ortogonais. Em tal seção demonstraremos o teorema que fornece as condições suficientes para a convergência, citaremos as principais obras que versam sobre Newton-Raphson neste caso, discutiremos sobre a aproximação inicial e também sobre a escolha de um algoritmo para tal método. Por fim, na Seção 4.3 iremos comparar a exatidão e o tempo de execução de ambos os métodos: autossistema e Newton-Raphson.

Os principais resultados deste trabalho estão no Capítulo 5. Nele demonstraremos que o método de Newton-Raphson é, de fato, convergente para os zeros dos polinômios ultrasféricos no caso principal com uma dada aproximação inicial. Além disto, por consequência, apresentaremos outros resultados: uma desigualdade inferior para cada um dos zeros positivos do polinômio ultrasférico quando $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$ ou $\lambda > 1$ e um resultado sobre entrelaçamento de zeros.

No Capítulo 6 iremos apresentar as conclusões deste trabalho e nossas propostas para futuras pesquisas.

Capítulo 2

Polinômios Ortogonais

Neste capítulo serão apresentadas as principais propriedades dos polinômios ortogonais que são fundamentais para a quadratura de Gauss e que serão importantes para a consolidação do método do autossistema e do método de Newton-Raphson. Na Seção 2.2 apresentaremos os polinômios ortogonais clássicos. A quadratura de Gauss será dada na Seção 2.3.

2.1 Propriedades

Seja ψ uma função real, limitada, não decrescente e com infinitos pontos de aumento sobre o intervalo $[a, b]$, tal que os *momentos*

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

no senso de Riemann-Stieltjes, existem e são finitos¹. Deste modo, a função ψ induz uma medida no intervalo $[a, b]$. Neste trabalho consideraremos o caso particular em que ψ é contínua e derivável em $[a, b]$ sendo $d\psi(x) = w(x) dx$. Logo, w será uma função real não negativa, diferente da função nula em $[a, b]$ tal que os momentos

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

no senso de Riemann, existem e são finitos. A função w sob as condições acima é denominada *função peso*. Para um estudo detalhado do caso em que os momentos são definidos no senso de Riemann-Stieltjes, recomendamos Andrade *et al.* [4].

¹Caso $a = -\infty$ ou $b = \infty$ assumimos que o intervalo é aberto nesse(s) extremo(s).

Seja \mathbf{P} o espaço vetorial de todos polinômios reais cuja dimensão é infinita. Um polinômio de grau menor ou igual a i pertencente ao \mathbf{P} é representado por ϕ_i . Estabelecemos o *produto interno* no espaço \mathbf{P} pelo funcional bilinear, simétrico e definido positivo $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbf{P} \times \mathbf{P} \rightarrow \mathbb{R}$ com relação a uma função peso w sobre o intervalo $[a, b]$ pondo

$$\langle \phi_i, \phi_j \rangle = \int_a^b w(x) \phi_i(x) \phi_j(x) dx.$$

Uma vez que os momentos μ_k existem e são finitos, o produto interno acima fica bem definido. A *norma* $\|\cdot\| : \mathbf{P} \rightarrow \mathbb{R}$ fica definida por

$$\|\phi_i\| = \left[\int_a^b w(x) [\phi_i(x)]^2 dx \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Definição 2.1 (Sequência de polinômios ortogonais). *Uma seqüência de polinômios $\{\phi_n\}_{n=0}^{\infty}$ pertencentes ao \mathbf{P} é uma seqüência de polinômios ortogonais (SPO) em relação à função peso w sobre o intervalo real $[a, b]$, se*

- (i) ϕ_n possuir grau exatamente n ,
- (ii) $\langle \phi_n, \phi_k \rangle = \int_a^b w(x) \phi_n(x) \phi_k(x) dx = \begin{cases} 0, & \text{se } k \neq n, \\ \gamma_{\phi_n} \neq 0, & \text{se } k = n. \end{cases}$

Uma SPO $\{\phi_n\}_{n=0}^{\infty}$ forma uma base para \mathbf{P} , pois tais polinômios possuem graus diferentes.

Representaremos os polinômios ortogonais por $\phi_n(x) = \sum_{i=0}^n A_{n,i} x^i$ onde termo $A_{n,i}$ representa o coeficiente em x^i do polinômio ϕ_n .

Notação 2.1. *Para fins de simplificação o coeficiente líder $A_{n,n}$ de ϕ_n também poderá ser denotado por A_n .*

Quando $A_n = 1$, o polinômio ϕ_n é chamado de *polinômio ortogonal mônico* e será denotado por $\hat{\phi}_n$.

Observe que $\gamma_{\phi_n} > 0$ porque $w(x)[\phi_n(x)]^2 \geq 0$ e $w(x)[\phi_n(x)]^2 \not\equiv 0$ para $a \leq x \leq b$. Com a notação da Definição 2.1,

$$\|\phi_n\| = \sqrt{\gamma_{\phi_n}}.$$

Definição 2.2 (Sequência de polinômios ortonormais). *Uma SPO $\{\phi_n\}_{n=0}^{\infty}$ é chamada de seqüência de polinômios ortonormais (SPO*), denotada por $\{\phi_n^*\}_{n=0}^{\infty}$ se, na Definição 2.1, $\gamma_{\phi_n} = 1$.*

Seja π_{n-1} um polinômio arbitrário de grau $n-1$ ou menor. Visto que uma SPO forma uma base para \mathbf{P} , então π_{n-1} é uma combinação linear dos polinômios ortogonais pertencentes a $\{\phi_i\}_{i=0}^{n-1}$, isto é, $\pi_{n-1}(x) = \sum_{i=0}^{n-1} \mathcal{B}_i \phi_i(x)$. Por outro lado, pela Definição 2.1,

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n-1} \mathcal{B}_i \langle \phi_i, \phi_n \rangle &= 0, \\ \left\langle \sum_{i=0}^{n-1} \mathcal{B}_i \phi_i, \phi_n \right\rangle &= 0, \\ \langle \pi_{n-1}, \phi_n \rangle &= 0. \end{aligned} \tag{2.1}$$

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

$$\begin{aligned} \langle \pi_n, \phi_n \rangle &= \left\langle \sum_{i=0}^n \mathcal{B}_i \phi_i, \phi_n \right\rangle = \sum_{i=0}^n \mathcal{B}_i \langle \phi_i, \phi_n \rangle = \mathcal{B}_n \langle \phi_n, \phi_n \rangle, \\ \langle \pi_n, \phi_n \rangle &= \mathcal{B}_n \gamma_{\phi_n} \neq 0. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Os resultados dados pelas equações (2.1) e (2.2) mostram que, dada uma SPO $\{\phi_n\}_{n=0}^{\infty}$, pode-se afirmar que

$$\langle \pi, \phi_n \rangle = \begin{cases} 0, & \forall \pi \text{ de grau } n-1 \text{ ou menor,} \\ \mathcal{B}_n \gamma_{\phi_n} \neq 0, & \forall \pi \text{ de grau } n. \end{cases}$$

A recíproca da afirmação acima é verdadeira. De fato, basta tomar $\pi(x) = \phi_i(x)$, para $i = 0, 1, \dots, n-1$, e $\pi(x) = \mathcal{B}_n \phi_n(x)$.

Teorema 2.1. *Sejam $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ e $\{\phi_n\}_{n=0}^{\infty}$ duas sequências de polinômios ortogonais com relação à função peso w no intervalo $[a, b]$. Então,*

$$\varphi_i(x) = \mathcal{C}_i \phi_i(x), \quad \mathcal{C}_i \in \mathbb{R} - \{0\}, \quad i \in \mathbb{N}.$$

Demonstração. Uma vez que $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_i$ formam uma base para o espaço vetorial dos polinômios de grau menor ou igual a i , pode-se expressar φ_i como uma combinação linear desses polinômios, isto é, $\varphi_i(x) = \sum_{j=0}^i \mathcal{C}_j \phi_j(x)$, $\mathcal{C}_i \neq 0$. Mas devido à ortogonalidade de φ_i a qualquer polinômio de grau menor ou igual a i ,

$$\langle \varphi_i, \phi_0 \rangle = \langle \varphi_i, \phi_1 \rangle = \dots = \langle \varphi_i, \phi_{i-1} \rangle = 0.$$

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

$$0 = \langle \varphi_i, \phi_k \rangle = \sum_{j=0}^i \mathcal{C}_j \langle \phi_j, \phi_k \rangle = \mathcal{C}_k \gamma_{\phi_k}.$$

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

O teorema anterior mostra que os polinômios de mesmo grau de duas sequências de polinômios ortogonais definidas com a mesma função peso w e com o mesmo intervalo $[a, b]$ são iguais exceto por um fator constante. Particularmente, no caso dos polinômios mônicos $\widehat{\phi}_n$, a constante é o coeficiente líder A_n de ϕ_n , isto é,

$$\widehat{\phi}_n(x) = \frac{\phi_n(x)}{A_n}. \quad (2.3)$$

Com as definições acima temos $\phi_n^*(x) = \frac{\phi_n(x)}{\sqrt{\gamma_{\phi_n}}}$ e $\widehat{\phi}_n^*(x) = \frac{\widehat{\phi}_n(x)}{\sqrt{\gamma_{\widehat{\phi}_n}}}$. Vale ressaltar que, a menos do sinal de A_n , uma SPO* construída a partir dos polinômios ortogonais ϕ_n ou dos polinômios mônicos $\widehat{\phi}_n$ é sempre a mesma:

$$\widehat{\phi}_n^*(x) = \frac{\widehat{\phi}_n(x)}{\sqrt{\gamma_{\widehat{\phi}_n}}} = \frac{\frac{\phi_n(x)}{A_n}}{\sqrt{\left\langle \frac{\phi_n(x)}{A_n}, \frac{\phi_n(x)}{A_n} \right\rangle}} = \frac{|A_n| \phi_n(x)}{A_n \sqrt{\gamma_{\phi_n}}} = \begin{cases} \phi_n^*(x), & \text{se } A_n > 0, \\ -\phi_n^*(x), & \text{se } A_n < 0. \end{cases}$$

Teorema 2.2. *Se $\{\phi_n\}_{n=0}^{\infty}$ for uma SPO, então ϕ_n possui n zeros reais, distintos e contidos no intervalo (a, b) .*

Demonstração. Como $n \geq 1$ então $\langle \phi_n, 1 \rangle = 0$. Daí, $\int_a^b w(x) \phi_n(x) dx = 0$. Como $w(x) \geq 0$ em (a, b) , então ϕ_n deverá mudar de sinal pelo menos uma vez em (a, b) . Portanto, ϕ_n possui, no mínimo, um zero de multiplicidade ímpar em (a, b) .

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

$$(x - d_1)(x - d_2) \dots (x - d_m) \phi_n(x) = A_n (x - d_1)^{e_1+1} (x - d_2)^{e_2+1} \dots (x - d_m)^{e_m+1} \rho_{n-m}(x),$$

onde $A_n \neq 0$ é o coeficiente líder de ϕ_n , $e_i + 1$ é um número par e ρ_{n-m} é um polinômio de grau no máximo $n - m$ cujos zeros são complexos, reais de multiplicidade par pertencentes a (a, b) ou reais de multiplicidade qualquer não pertencentes ao intervalo (a, b) . Logo, ρ_{n-m} não muda

de sinal em (a, b) e, conseqüentemente, o produto dado por $(x - d_1)(x - d_2) \dots (x - d_m)\phi_n$ também não muda de sinal em (a, b) .

Entretanto, uma vez que $m < n$, o produto $(x - d_1)(x - d_2) \dots (x - d_m)$ será um polinômio de grau menor do que n . Em virtude de (2.1),

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

Mas como w não muda de sinal em (a, b) , o restante do integrando constituirá um polinômio que deverá mudar de sinal pelo menos uma vez em (a, b) , o que é uma contradição. Conseqüentemente, $m = n$. Logo ϕ_n possui n zeros reais, distintos e contidos em (a, b) . \square

Teorema 2.3 (Relação de recorrência de três termos para $\{\phi_n\}_{n=0}^\infty$). *Cada SPO $\{\phi_n\}_{n=0}^\infty$ obedece a uma relação de recorrência de três termos da forma*

$$\phi_{n+1}(x) = (a_n x - b_n)\phi_n(x) - c_n \phi_{n-1}(x), \quad n \geq 0 \quad (2.4)$$

com $a_n = \frac{A_{n+1}}{A_n} \neq 0$, $b_n = a_n \frac{\langle x\phi_n, \phi_n \rangle}{\langle \phi_n, \phi_n \rangle}$, $c_n = \frac{a_n}{a_{n-1}} \frac{\langle \phi_n, \phi_n \rangle}{\langle \phi_{n-1}, \phi_{n-1} \rangle} \neq 0$ e $\phi_{-1}(x) := 0$.

Demonstração. Temos $\phi_n(x) = A_{n,n}x^n + A_{n,n-1}x^{n-1} + \dots + A_{n,1}x + A_{n,0}$. Existem os números reais C_i , $i = 0, 1, \dots, n + 1$, com $C_{n+1} \neq 0$ tais que

$$x\phi_n(x) = C_{n+1}\phi_{n+1}(x) + C_n\phi_n(x) + \dots + C_1\phi_1(x) + C_0\phi_0(x) = \sum_{i=0}^{n+1} C_i\phi_i(x), \quad (2.5)$$

Tomemos $j \leq n - 2$, então

$$0 = \langle x\phi_j, \phi_n \rangle = \int_a^b w(x)x\phi_j(x)\phi_n(x) dx = \langle \phi_j, x\phi_n \rangle.$$

Substituindo (2.5) em $\langle \phi_j, x\phi_n \rangle = 0$,

$$\begin{aligned} \left\langle \phi_j, \sum_{i=0}^{n+1} C_i\phi_i \right\rangle &= 0, \\ \sum_{i=0}^{n+1} C_i \langle \phi_j, \phi_i \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Assim, para cada $i \neq j$, tem-se $C_i \langle \phi_j, \phi_i \rangle = 0$ e a equação (2.6) se desenvolve em

$$C_j \langle \phi_j, \phi_j \rangle = 0.$$

Como $\langle \phi_j, \phi_j \rangle = \gamma_{\phi_j} > 0$, resta que

$$C_j = 0, \quad j \leq n-2. \quad (2.7)$$

Empregando o resultado (2.7) no desenvolvimento da expressão (2.5),

$$\begin{aligned} x\phi_n(x) &= C_{n+1}\phi_{n+1}(x) + C_n\phi_n(x) + C_{n-1}\phi_{n-1}(x), \\ \phi_{n+1}(x) &= \frac{x\phi_n(x)}{C_{n+1}} - \frac{C_n\phi_n(x)}{C_{n+1}} - \frac{C_{n-1}\phi_{n-1}(x)}{C_{n+1}}, \\ \phi_{n+1}(x) &= \left(\frac{x}{C_{n+1}} - \frac{C_n}{C_{n+1}} \right) \phi_n(x) - \frac{C_{n-1}\phi_{n-1}(x)}{C_{n+1}}, \end{aligned}$$

onde, definindo-se $a_n = \frac{1}{C_{n+1}}$, $b_n = \frac{C_n}{C_{n+1}}$ e $c_n = \frac{C_{n-1}}{C_{n+1}}$, temos o resultado desejado. Para finalizar, obteremos os valores de a_n , b_n e c_n . A determinação do coeficiente a_n pode ser feita observando a equação (2.5), pela qual,

$$x(A_{n,n}x^n + \dots + A_{n,0}) = C_{n+1}(A_{n+1,n+1}x^{n+1} + \dots + A_{n+1,0}) + C_n\phi_n(x) + \dots + C_0\phi_0(x).$$

Considerando a igualdade entre os coeficientes do termo de grau $n+1$ na expressão anterior, $C_{n+1} = \frac{A_{n,n}}{A_{n+1,n+1}}$. Daí,

$$a_n = \frac{A_{n+1,n+1}}{A_{n,n}}. \quad (2.8)$$

Como $\phi_{n+1}(x) = (a_n x - b_n)\phi_n(x) - c_n\phi_{n-1}(x)$, então

$$0 = \langle \phi_{n+1}, \phi_n \rangle = a_n \langle x\phi_n, \phi_n \rangle - b_n \langle \phi_n, \phi_n \rangle - c_n \langle \phi_{n-1}, \phi_n \rangle,$$

logo,

$$b_n = a_n \frac{\langle x\phi_n, \phi_n \rangle}{\langle \phi_n, \phi_n \rangle}. \quad (2.9)$$

Analogamente,

$$0 = \langle \phi_{n+1}, \phi_{n-1} \rangle = a_n \langle x\phi_n, \phi_{n-1} \rangle - b_n \langle \phi_n, \phi_{n-1} \rangle - c_n \langle \phi_{n-1}, \phi_{n-1} \rangle,$$

então $c_n = a_n \frac{\langle x\phi_n, \phi_{n-1} \rangle}{\langle \phi_{n-1}, \phi_{n-1} \rangle}$. Porém,

$$\phi_n(x) = (a_{n-1}x - b_{n-1})\phi_{n-1}(x) - c_{n-1}\phi_{n-2}(x),$$

implicando que

$$x\phi_{n-1}(x) = \frac{1}{a_{n-1}}\phi_n(x) + \frac{b_{n-1}}{a_{n-1}}\phi_{n-1}(x) + \frac{c_{n-1}}{a_{n-1}}\phi_{n-2}(x).$$

Contudo,

$$\langle x\phi_n, \phi_{n-1} \rangle = \int_a^b w(x)x\phi_n(x)\phi_{n-1}(x) dx = \langle \phi_n, x\phi_{n-1} \rangle.$$

Ainda,

$$\langle \phi_n, x\phi_{n-1} \rangle = \frac{1}{a_{n-1}}\langle \phi_n, \phi_n \rangle + \frac{b_{n-1}}{a_{n-1}}\langle \phi_n, \phi_{n-1} \rangle + \frac{c_{n-1}}{a_{n-1}}\langle \phi_n, \phi_{n-2} \rangle = \frac{1}{a_{n-1}}\langle \phi_n, \phi_n \rangle.$$

Portanto,

$$c_n = \frac{a_n}{a_{n-1}} \frac{\langle \phi_n, \phi_n \rangle}{\langle \phi_{n-1}, \phi_{n-1} \rangle}. \quad (2.10)$$

□

A relação de recorrência de três termos para os polinômios mônicos $\hat{\phi}_n$ é dada pelo teorema anterior usando que $A_n = A_{n-1} = 1$ nos seus coeficientes a_n , b_n e c_n dados por (2.8), (2.9) e (2.10), respectivamente. Com isto, fica demonstrado o seguinte resultado.

Teorema 2.4 (Relação de recorrência de três termos para $\{\hat{\phi}_n\}_{n=0}^\infty$). *Cada sequência de polinômios ortogonais mônicos $\{\hat{\phi}_n\}_{n=0}^\infty$ obedece a uma relação de recorrência de três termos da forma*

$$\hat{\phi}_{n+1}(x) = (x - \alpha_n)\hat{\phi}_n(x) - \beta_n\hat{\phi}_{n-1}(x), \quad n \geq 0, \quad (2.11)$$

$\hat{\phi}_{-1}(x) := 0$, $\hat{\phi}_0(x) = 1$, onde

$$\alpha_n = \frac{1}{\gamma_{\hat{\phi}_n}} \left\langle x\hat{\phi}_n, \hat{\phi}_n \right\rangle, \quad n \geq 0, \quad (2.12)$$

$$\beta_n = \frac{\gamma_{\hat{\phi}_n}}{\gamma_{\hat{\phi}_{n-1}}}, \quad n \geq 1. \quad (2.13)$$

□

Reescrevemos α_n ao notar que $\hat{\phi}_n(x) = \frac{\phi_n(x)}{A_n}$ e $\gamma_{\hat{\phi}_n} = \frac{\gamma_{\phi_n}}{A_n^2}$, isto é,

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \frac{A_n^2}{\gamma_{\phi_n}} \left\langle x \frac{\phi_n}{A_n}, \frac{\phi_n}{A_n} \right\rangle = \frac{1}{\gamma_{\phi_n}} \langle x\phi_n, \phi_n \rangle, \\ \alpha_n &= \frac{b_n}{a_n}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Também podemos reescrever β_n notando que $\gamma_{\widehat{\phi}_n} = \frac{\gamma_{\phi_n}}{A_n^2}$ e $a_{n-1} = \frac{A_n}{A_{n-1}}$,

$$\begin{aligned}\beta_n &= \frac{A_{n-1}^2 \gamma_{\phi_n}}{A_n^2 \gamma_{\phi_{n-1}}}, \\ \beta_n &= \frac{\gamma_{\phi_n}}{a_{n-1}^2 \gamma_{\phi_{n-1}}}.\end{aligned}\tag{2.15}$$

Como explicamos anteriormente, uma SPO* obtida a partir dos polinômios ortogonais ou mônicos é sempre a mesma, exceto pelo sinal do coeficiente líder A_n . A partir de agora, sem perda de generalidade, iremos considerar os polinômios ortonormais obtidos sempre a partir dos polinômios mônicos, ou seja,

$$\phi_n^*(x) = \frac{\widehat{\phi}_n(x)}{\sqrt{\gamma_{\widehat{\phi}_n}}}.$$

Teorema 2.5 (Relação de recorrência de três termos para $\{\phi_n^*\}_{n=0}^\infty$). *Cada SPO* $\{\phi_n^*\}_{n=0}^\infty$ obedece a uma relação de recorrência de três termos da forma*

$$\sqrt{\beta_{n+1}}\phi_{n+1}^*(x) = (x - \alpha_n)\phi_n^*(x) - \sqrt{\beta_n}\phi_{n-1}^*(x), \quad n \geq 0,\tag{2.16}$$

$$\phi_0^* = \left[\int_a^b w(x) dx \right]^{-\frac{1}{2}},\tag{2.17}$$

sendo $\phi_{-1}^*(x) := 0$, α_n como em (2.12) e β_n como em (2.13).

Demonstração. Inserindo $\widehat{\phi}_n(x) = \phi_n^*(x)\sqrt{\gamma_{\widehat{\phi}_n}}$ em (2.11),

$$\phi_{n+1}^*(x) = (x - \alpha_n) \sqrt{\frac{\gamma_{\widehat{\phi}_n}}{\gamma_{\widehat{\phi}_{n+1}}}} \phi_n^*(x) - \beta_n \sqrt{\frac{\gamma_{\widehat{\phi}_{n-1}}}{\gamma_{\widehat{\phi}_{n+1}}}} \phi_{n-1}^*(x),$$

que, de (2.13), pode ser escrita como

$$\phi_{n+1}^*(x) = (x - \alpha_n) \frac{\phi_n^*(x)}{\sqrt{\beta_{n+1}}} - \beta_n \frac{\phi_{n-1}^*(x)}{\sqrt{\beta_{n+1}\beta_n}}.$$

Multiplicando a equação anterior por $\sqrt{\beta_{n+1}}$, obtém-se (2.16). O valor inicial ϕ_0^* é obtido pela normalização de $\widehat{\phi}_0(x) = 1$. \square

Pela relação de recorrência dos polinômios ortonormais (2.16), tem-se que

$$x\phi_n^*(x) = \sqrt{\beta_n}\phi_{n-1}^*(x) + \alpha_n\phi_n^*(x) + \sqrt{\beta_{n+1}}\phi_{n+1}^*(x),$$

e fazendo $n = 0, 1, \dots, N - 1$, tem-se, respectivamente,

$$\begin{aligned} x\phi_0^*(x) &= \alpha_0\phi_0^*(x) + \sqrt{\beta_1}\phi_1^*(x), \\ x\phi_1^*(x) &= \sqrt{\beta_1}\phi_0^*(x) + \alpha_1\phi_1^*(x) + \sqrt{\beta_2}\phi_2^*(x), \\ x\phi_2^*(x) &= \sqrt{\beta_2}\phi_1^*(x) + \alpha_2\phi_2^*(x) + \sqrt{\beta_3}\phi_3^*(x), \\ &\vdots \\ x\phi_{N-1}^*(x) &= \sqrt{\beta_{N-1}}\phi_{N-2}^*(x) + \alpha_{N-1}\phi_{N-1}^*(x) + \sqrt{\beta_N}\phi_N^*(x), \end{aligned}$$

ou, na forma matricial,

$$x \underbrace{\begin{bmatrix} \phi_0^*(x) \\ \phi_1^*(x) \\ \phi_2^*(x) \\ \vdots \\ \phi_{N-1}^*(x) \end{bmatrix}}_{\Phi_{N-1}^*(x)} = \underbrace{\begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \sqrt{\beta_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{\beta_{N-1}} & \alpha_{N-1} \end{bmatrix}}_{\mathbf{J}_N} \underbrace{\begin{bmatrix} \phi_0^*(x) \\ \phi_1^*(x) \\ \phi_2^*(x) \\ \vdots \\ \phi_{N-1}^*(x) \end{bmatrix}}_{\Phi_{N-1}^*(x)} + \sqrt{\beta_N}\phi_N^*(x) \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{e}_{N-1}}, \quad (2.18)$$

na qual a matriz de ordem N , simétrica e tridiagonal é a *matriz de Jacobi*² \mathbf{J}_N . Deste modo,

$$x\Phi_{N-1}^*(x) = \mathbf{J}_N\Phi_{N-1}^*(x) + \sqrt{\beta_N}\phi_N^*(x)\mathbf{e}_{N-1}, \quad (2.19)$$

Seja $x_{N,i}$ o i -ésimo zero de ϕ_N^* . Avaliando a equação (2.19) em $x_{N,i}$,

$$x_{N,i}\Phi_{N-1}^*(x_{N,i}) = \mathbf{J}_N\Phi_{N-1}^*(x_{N,i}).$$

Já que $\phi_0^*(x) > 0$, então o vetor $\Phi_{N-1}^*(x_{N,i})$ é não-nulo. Assim, $x_{N,i}$ é um autovalor e $\Phi_{N-1}^*(x_{N,i})$ é o respectivo autovetor da matriz de Jacobi \mathbf{J}_N . Este resultado demonstra o teorema:

Teorema 2.6 (Wilf [52]). *Os autovalores da matriz de Jacobi \mathbf{J}_N são os zeros de ϕ_N^* , a saber $x_{N,0}, x_{N,1}, \dots, x_{N,N-1}$. O autovetor correspondente ao autovalor $x_{N,i}$ é*

$$[\phi_0^*(x_{N,i}) \ \phi_1^*(x_{N,i}) \ \dots \ \phi_{N-1}^*(x_{N,i})]^T.$$

Corolário 2.6.1. *Seja \mathbf{v}_i o i -ésimo autovetor normalizado da matriz de Jacobi correspondente ao autovalor $x_{N,i}$,*

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

²Não confundir com a jacobiana de uma transformação linear.

e seja $\mathbf{v}_{i,1}$ o primeiro elemento de \mathbf{v}_i . Então,

$$\frac{\mathbf{v}_{i,1}^2}{[\phi_0^*(x)]^2} = \frac{1}{\sum_{j=0}^{N-1} [\phi_j^*(x_{N,i})]^2}. \quad (2.20)$$

Demonstração. Como \mathbf{v}_i está normalizado, $\mathbf{v}_i = \Phi_{N-1}^*(x_{N,i}) \left(\sum_{j=0}^{N-1} [\phi_j^*(x_{N,i})]^2 \right)^{-\frac{1}{2}}$. Logo, o primeiro elemento deste vetor é

$$\mathbf{v}_{i,1} = \frac{\phi_0^*(x)}{\sqrt{\sum_{j=0}^{N-1} [\phi_j^*(x_{N,i})]^2}}.$$

□

Teorema 2.7 (Identidade de Christoffel-Darboux). *Cada SPO $\{\phi_n\}_{n=0}^\infty$ obedece à seguinte relação*

$$\sum_{k=0}^n \frac{\phi_k(x)\phi_k(y)}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{\phi_{n+1}(x)\phi_n(y) - \phi_n(x)\phi_{n+1}(y)}{a_n\gamma_{\phi_n}(x-y)}.$$

Demonstração. Tomando o produto interno de ϕ_{k+1} pelos termos na igualdade de (2.4),

$$\langle \phi_{k+1}, \phi_{k+1} \rangle = a_k \langle x\phi_k, \phi_{k+1} \rangle - b_k \langle \phi_k, \phi_{k+1} \rangle - c_k \langle \phi_{k-1}, \phi_{k+1} \rangle.$$

Mas devido à ortogonalidade nos dois últimos termos do lado direito da equação anterior, esta se reduz a

$$\gamma_{\phi_{k+1}} = a_k \langle x\phi_k, \phi_{k+1} \rangle. \quad (2.21)$$

Analogamente, tomando o produto interno de ϕ_k pelos termos de (2.4),

$$\begin{aligned} \langle \phi_k, \phi_{k+1} \rangle &= a_k \langle x\phi_k, \phi_k \rangle - b_k \langle \phi_k, \phi_k \rangle - c_k \langle \phi_{k-1}, \phi_k \rangle, \\ b_k &= \frac{a_k}{\gamma_{\phi_k}} \langle x\phi_k, \phi_k \rangle. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Ainda uma vez, ao se repetir o mesmo procedimento, com o produto interno de ϕ_{k-1} pelos termos de (2.4),

$$\begin{aligned} \langle \phi_{k-1}, \phi_{k+1} \rangle &= a_k \langle \phi_{k-1}, x\phi_k \rangle - b_k \langle \phi_{k-1}, \phi_k \rangle - c_k \langle \phi_{k-1}, \phi_{k-1} \rangle \\ 0 &= a_k \langle \phi_{k-1}, x\phi_k \rangle - c_k \gamma_{\phi_{k-1}}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Substituindo k por $k - 1$ em (2.21) e, em seguida, usando que $\langle \phi_{k-1}, x\phi_k \rangle = \langle x\phi_{k-1}, \phi_k \rangle$,

$$\langle \phi_{k-1}, x\phi_k \rangle = \frac{\gamma_{\phi_k}}{a_{k-1}}.$$

Usando a igualdade anterior em (2.23),

$$c_k = \frac{a_k \gamma_{\phi_k}}{a_{k-1} \gamma_{\phi_{k-1}}}. \quad (2.24)$$

Dividindo a equação (2.4) por $a_k \gamma_{\phi_k}$ e, posteriormente, usando a igualdade (2.24),

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

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

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

permutando y com x em (2.25),

$$\frac{y\phi_k(y)\phi_k(x)}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{\phi_k(x)\phi_{k+1}(y)}{a_k \gamma_{\phi_k}} + \frac{\phi_{k-1}(y)\phi_k(x)}{a_{k-1} \gamma_{\phi_{k-1}}} + \frac{b_k \phi_k(y)\phi_k(x)}{a_k \gamma_{\phi_k}} \quad (2.26)$$

e subtraindo (2.26) de (2.25), será obtido

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

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

$$\sum_{k=0}^n (x - y) \frac{\phi_k(x)\phi_k(y)}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{\phi_{n+1}(x)\phi_n(y) - \phi_n(x)\phi_{n+1}(y)}{a_n \gamma_{\phi_n}}$$

e, finalmente, a

$$\sum_{k=0}^n \frac{\phi_k(x)\phi_k(y)}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{\phi_{n+1}(x)\phi_n(y) - \phi_n(x)\phi_{n+1}(y)}{a_n \gamma_{\phi_n} (x - y)}.$$

□

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

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

conduzindo ao corolário:

Corolário 2.7.1.

$$\sum_{k=0}^n \frac{[\phi_k(x)]^2}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{1}{a_n \gamma_{\phi_n}} [\phi_n(x)\phi'_{n+1}(x) - \phi_{n+1}(x)\phi'_n(x)].$$

Teorema 2.8. *Se $[a, b]$ for um intervalo simétrico com relação à origem e a função peso w for uma função par em (a, b) , então ϕ_n será uma função par ou ímpar de acordo com a paridade de n .*

Demonstração. Sem perda de generalidade, suponha que o polinômio ϕ_n seja mônico, isto é, $A_{n,n} = 1$. Uma vez que $\phi_n(x) = \sum_{i=0}^n A_{n,i}x^i$, então o sistema linear de ordem n dado por $\langle \phi_n, x^i \rangle = 0$, para $i = 0, 1, \dots, n-1$, determina $A_{n,i}$, $i = 0, \dots, n-1$. Em outras palavras, o sistema determina $\phi_n(x)$. Realizando a mudança de variáveis de x para $-x$ no sistema,

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

Mas, por hipótese, w é uma função par, isto é, $w(x) = w(-x) \forall x \in (a, b)$. Daí,

$$\int_a^b w(x)\phi_n(-x)x^i dx = 0, \quad i = 0, 1, \dots, n-1. \quad (2.27)$$

O sistema linear (2.27), determina $\phi_n(-x)$ cujo coeficiente líder é $(-1)^n$. Por outro lado, $\{\phi_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ e $\{\phi_n(-x)\}_{n=0}^{\infty}$ são duas SPO definidas com a mesma função peso sobre um mesmo intervalo. Assim, pelo Teorema 2.1, $\phi_n(-x)$ é igual a $\phi_n(x)$, exceto por uma constante

evidente \mathcal{C} . Logo, $\phi_n(-x) = \mathcal{C} \phi_n(x)$ e comparando os coeficientes em x^n dos polinômios $\phi_n(x)$ e $\phi_n(-x)$, obtém-se

$$\phi_n(-x) = (-1)^n \phi_n(x).$$

Portanto, ϕ_n é uma função par ou ímpar de acordo com a paridade de n . □

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

Corolário 2.8.1. *Se $[a, b]$ for um intervalo simétrico com relação à origem e a função peso w for uma função par em (a, b) , então os zeros de ϕ_n serão simétricos com relação à origem.*

2.2 Polinômios ortogonais clássicos

Os polinômios ortogonais de Jacobi (incluindo casos particulares de Legendre, Chebyshev³ de 1ª e 2ª espécies e Gegenbauer), de Laguerre e de Hermite foram considerados por Szegő [49] e Chihara [13] como sendo polinômios ortogonais clássicos.

A seguir listamos cada um desses polinômios com a sua função peso w sobre o intervalo $[a, b]$, a respectiva fórmula de Rodrigues⁴ que fornece o polinômio de grau n e a relação de recorrência.

- **Polinômios de Jacobi** $P_n^{(\alpha, \beta)}$. Eles são obtidos por meio de uma SPO $\left\{ P_n^{(\alpha, \beta)} \right\}_{n=0}^{\infty}$ definida com

$$w(x) = (1-x)^\alpha (1+x)^\beta, \quad \text{onde } \alpha > -1 \text{ e } \beta > -1,$$

sobre o intervalo $[-1, 1]$. Tais polinômios possuem a fórmula de Rodrigues

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

A relação de recorrência para estes polinômios é

$$P_{n+1}^{(\alpha, \beta)}(x) = (a_n x - b_n) P_n^{(\alpha, \beta)}(x) - c_n P_{n-1}^{(\alpha, \beta)}(x), \quad n \geq 0,$$

sendo $P_0^{(\alpha, \beta)}(x) = 1$ e $P_{-1}^{(\alpha, \beta)}(x) := 0$,

$$a_n = \frac{(2n + \alpha + \beta + 1)(2n + \alpha + \beta + 2)}{2(n + 1)(n + \alpha + \beta + 1)},$$

³Adota-se esta versão inglesa do nome russo, existem diversas versões transliteradas.

⁴Esta fórmula leva o sobrenome do matemático português Benjamin Olinde Rodrigues (1795-1851) que a formulou.

$$b_n = \frac{(2n + \alpha + \beta + 1)(\beta^2 - \alpha^2)}{2(n + 1)(n + \alpha + \beta + 1)(2n + \alpha + \beta)}, c_n = \frac{(n + \alpha)(n + \beta)(2n + \alpha + \beta + 2)}{(n + 1)(n + \alpha + \beta + 1)(2n + \alpha + \beta)}.$$

Variando os valores de α e β do polinômio de Jacobi $P_n^{(\alpha, \beta)}$ podemos encontrar os tais casos particulares mencionados.

- i. Polinômios de Legendre* P_n ($\alpha = \beta = 0$). Eles podem ser gerados a partir da fórmula de Rodrigues

$$P_n(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left\{ (1 - x^2)^n \right\}.$$

A função peso de tais polinômios é $w(x) = 1$ e a relação de recorrência é

$$P_{n+1}(x) = \frac{2n + 1}{n + 1} x P_n(x) - \frac{n}{n + 1} P_{n-1}(x), \quad n \geq 0,$$

sendo $P_0(x) = 1$ e $P_{-1}(x) := 0$.

- ii. Polinômios de Chebyshev de 1ª espécie* T_n ($\alpha = \beta = -\frac{1}{2}$). São obtidos pela fórmula de Rodrigues

$$T_n(x) = \frac{(-2)^n n!}{(2n)!} \sqrt{1 - x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left\{ (1 - x^2)^{n - \frac{1}{2}} \right\}.$$

Estes polinômios possuem a função peso $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1 - x^2}}$ e a relação de recorrência é

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \quad n \geq 0,$$

sendo $T_0(x) = 1$ e $T_{-1}(x) := 0$.

- iii. Polinômios de Chebyshev de 2ª espécie* U_n ($\alpha = \beta = \frac{1}{2}$). Eles têm a fórmula de Rodrigues

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

e possuem $w(x) = \sqrt{1 - x^2}$. A relação de recorrência é

$$U_{n+1}(x) = 2xU_n(x) - U_{n-1}(x), \quad n \geq 0,$$

sendo $U_0(x) = 1$ e $U_{-1}(x) := 0$.

iv. Polinômios de Gegenbauer ou *ultraesféricos* $P_n^{(\lambda)}$ ($\alpha = \beta = \lambda - \frac{1}{2}, \lambda \neq 0$).

Estes polinômios possuem a fórmula de Rodrigues

$$P_n^{(\lambda)}(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \frac{\Gamma(\lambda + \frac{1}{2}) \Gamma(n + 2\lambda)}{\Gamma(2\lambda) \Gamma(n + \lambda + \frac{1}{2})} (1 - x^2)^{\frac{1}{2} - \lambda} \frac{d^n}{dx^n} \left\{ (1 - x^2)^{n + \lambda - \frac{1}{2}} \right\}.$$

A função peso destes polinômios é $w(x) = (1 - x^2)^{\lambda - \frac{1}{2}}$ e a relação de recorrência é

$$P_{n+1}^{(\lambda)}(x) = \frac{2(n + \lambda)}{n + 1} x P_n^{(\lambda)}(x) + \frac{1 - n - 2\lambda}{n + 1} P_{n-1}^{(\lambda)}(x), \quad n \geq 0,$$

sendo $P_0^{(\lambda)}(x) = 1$ e $P_{-1}^{(\lambda)}(x) := 0$. Notemos que os polinômios de Legendre e de Chebyshev de 2ª espécie são casos particulares de Gegenbauer com $\lambda = 1/2$ e 1, respectivamente. Além disto, é conhecido que

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda^{-1} P_n^{(\lambda)}(x) = \frac{2}{n} T_n(x).$$

- **Polinômios de Laguerre** $L_n^{(\alpha)}$. Estes polinômios são encontrados ao definirmos uma SPO utilizando a função peso $w(x) = e^{-x} x^\alpha$ com $\alpha > -1$ sobre o intervalo $[0, \infty)$. A sequência destes polinômios é representada por $\{L_n^{(\alpha)}(x)\}_{n=0}^{\infty}$. Tais polinômios possuem a fórmula de Rodrigues

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{n!} e^x x^{-\alpha} \frac{d^n}{dx^n} \left\{ e^{-x} x^{\alpha+n} \right\}$$

com a seguinte relação de recorrência

$$L_{n+1}^{(\alpha)}(x) = \left(-\frac{x}{n+1} + \frac{\alpha + 2n + 1}{n+1} \right) L_n^{(\alpha)}(x) - \frac{\alpha + n}{n+1} L_{n-1}^{(\alpha)}(x), \quad n \geq 0,$$

sendo $L_0^{(\alpha)}(x) = 1$ e $L_{-1}^{(\alpha)}(x) := 0$.

- **Polinômios de Hermite** H_n . Eles são obtidos ao definirmos uma SPO com $w(x) = e^{-x^2}$ sobre \mathbb{R} . A sequência de tais polinômios é representada por $\{H_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$. Eles são dados pela fórmula de Rodrigues

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left\{ e^{-x^2} \right\}$$

e a relação de recorrência é

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x),$$

sendo $H_0(x) = 1$ e $H_{-1}(x) := 0$.

2.3 Quadratura de Gauss

Seja a integral de Riemann

$$\int_a^b w(x)f(x) dx,$$

onde w é uma função peso e f uma função real. A *quadratura de Gauss* consiste em aproximar numericamente a integral acima por meio de uma combinação linear de avaliações de f ,

$$\int_a^b w(x)f(x) dx \approx W_{n,1}f(x_{n,1}) + W_{n,2}f(x_{n,2}) + \dots + W_{n,n}f(x_{n,n}).$$

Na expressão acima, os números reais W 's são os *pesos* e as abscissas x 's são os *pontos* ou *nós* da quadratura de Gauss. Para mais detalhes, recomendamos Krylov [38]. O erro cometido na quadratura de Gauss é dado por

$$E_{f,n} = \int_a^b w(x)f(x) dx - \sum_{i=1}^n W_{n,i}f(x_{n,i}).$$

Uma quadratura qualquer com n pontos é dita *interpolatória* se $E_{f,n} = 0$ sempre que f for um polinômio de grau $\leq n - 1$. A quadratura de Gauss, além de ser interpolatória, possui grau máximo de precisão, isto é, $E_{f,n} = 0$ sempre que f for um polinômio de grau $\leq 2n - 1$. Os pesos dessa quadratura são dados por

$$W_{n,i} = \int_a^b w(x) \frac{\phi_n(x)}{(x - x_{n,i})\phi_n'(x_{n,i})} dx, \quad (2.28)$$

onde $x_{n,1}, x_{n,2}, \dots, x_{n,n}$ são os zeros do polinômio ortogonal ϕ_n da SPO definida com w sobre o intervalo $[a, b]$.

Notação 2.2. Para fins de simplificação,

- o i -ésimo peso $W_{n,i}$ da quadratura com n pontos também poderá ser denotado por W_i ;
- o i -ésimo zero $x_{n,i}$ do polinômio ortogonal $\phi_n(x)$ de grau n também poderá ser denotado por x_i .

Com a finalidade de obter explicitamente os pesos W_i , faremos uso da Identidade de Christoffel-Darboux (Teorema 2.7):

$$\sum_{k=0}^n \frac{\phi_k(x)\phi_k(y)}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{\phi_{n+1}(x)\phi_n(y) - \phi_n(x)\phi_{n+1}(y)}{a_n\gamma_{\phi_n}(x - y)}.$$

Ao substituir y por x_i , onde x_i é um zero de ϕ_n , a identidade acima torna-se

$$\frac{A_n \phi_{n+1}(x_i)}{A_{n+1} \gamma_{\phi_n}} \frac{\phi_n(x)}{x - x_i} = - \sum_{k=0}^n \frac{\phi_k(x) \phi_k(x_i)}{\gamma_{\phi_k}}.$$

Tomando o produto interno de ϕ_0 pelos termos da equação anterior,

$$\frac{A_n \phi_{n+1}(x_i)}{A_{n+1} \gamma_{\phi_n}} \left\langle \phi_0, \frac{\phi_n}{x - x_i} \right\rangle = - \sum_{k=0}^n \frac{\phi_k(x_i) \langle \phi_0, \phi_k \rangle}{\gamma_{\phi_k}},$$

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

$$\frac{A_n \phi_{n+1}(x_i)}{A_{n+1} \gamma_{\phi_n}} \left\langle \phi_0, \frac{\phi_n}{x - x_i} \right\rangle = -\phi_0(x_i).$$

No entanto, ϕ_0 é constante, implicando que $\phi_0(x) = \phi_0(x_i)$, resultando em

$$\int_a^b w(x) \frac{\phi_n(x)}{x - x_i} dx = - \frac{A_{n+1} \gamma_{\phi_n}}{A_n \phi_{n+1}(x_i)}. \quad (2.29)$$

Logo, observando a forma de W_i em (2.28),

$$W_i = - \frac{A_{n+1} \gamma_{\phi_n}}{A_n \phi'_n(x_i) \phi_{n+1}(x_i)}. \quad (2.30)$$

Podemos obter outra forma de W_i avaliando a relação de recorrência do Teorema 2.5 no zero x_i de ϕ_n ,

$$\phi_{n+1}(x_i) = -c_n \phi_{n-1}(x_i),$$

substituindo o valor de $c_n = \frac{a_n \gamma_{\phi_n}}{a_{n-1} \gamma_{\phi_{n-1}}} = \frac{A_{n+1} A_{n-1}}{A_n^2} \frac{\gamma_{\phi_n}}{\gamma_{\phi_{n-1}}}$,

$$\phi_{n+1}(x_i) = - \frac{A_{n+1} A_{n-1}}{A_n^2} \frac{\gamma_{\phi_n}}{\gamma_{\phi_{n-1}}} \phi_{n-1}(x_i). \quad (2.31)$$

Ao substituir o resultado (2.31) em (2.30) encontra-se outra forma de W_i ,

$$W_i = \frac{A_n \gamma_{\phi_{n-1}}}{A_{n-1} \phi'_n(x_i) \phi_{n-1}(x_i)}. \quad (2.32)$$

Ainda, notando a forma de W_i em (2.30) e o Corolário 2.7.1 com $x = x_i$, sendo x_i o i -ésimo zero de $\phi_n(x)$, tem-se que

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{[\phi_k(x_i)]^2}{\gamma_{\phi_k}} = \frac{1}{W_i}. \quad (2.33)$$

Sem perda de generalidade, se $\phi_k(x)$ for ortonormal,

$$\sum_{k=0}^{n-1} [\phi_k^*(x_i)]^2 = \frac{1}{W_i}. \quad (2.34)$$

Pelo Corolário 2.6.1 obtém-se a implicação

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

Com esta última fórmula para W_i , demonstramos o seguinte Teorema:

Teorema 2.9 (Método do autossistema). *Os n pontos x_i da quadratura de Gauss são os autovalores da matriz de Jacobi*

$$\mathbf{J}_n = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & & & \\ & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \sqrt{\beta_3} & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \sqrt{\beta_{N-2}} & \alpha_{N-2} & \sqrt{\beta_{N-1}} & \\ 0 & & & & \sqrt{\beta_{N-1}} & \alpha_{N-1} & \end{bmatrix}$$

sendo α_j , $j = 0, 1, \dots, n-1$ e β_j , $j = 1, 2, \dots, n-1$ dados pelos termos da relação de recorrência dos polinômios ortogonais mônicos e os pesos W_i dados por

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

sendo $\mathbf{v}_{i,1}$ o primeiro elemento do autovetor normalizado \mathbf{v}_i correspondente ao autovalor x_i de \mathbf{J}_n . □

O Teorema 2.9 fornece um método para se calcular os pontos e pesos da quadratura de Gauss em termo dos autovalores e autovetores da matriz de Jacobi \mathbf{J}_n . Este é o *método do autossistema*. A caracterização dos pesos em função dos autovetores de \mathbf{J}_n apresentada em tal teorema é dada por Wilf [52, p. 80 exerc. 9]. O Teorema 2.9 também implica que os pesos das quadraturas de Gauss são sempre positivos.

As quadraturas de Gauss nas quais utilizamos a função peso w sobre o intervalo real $[a, b]$ dos polinômios ortogonais clássicos são:

- Gauss-Jacobi

$$\int_{-1}^1 (1-x)^\alpha (1+x)^\beta f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n W_i f(x_i), \quad \alpha, \beta > -1,$$

sendo x_i o i -ésimo zero de $P_n^{(\alpha,\beta)}$. Nesta quadratura incluem-se as quadraturas de Gauss-Legendre ($\alpha = \beta = 0$), Gauss-Chebyshev de 1ª e 2ª espécies ($\alpha = \beta = \mp \frac{1}{2}$) e Gauss-Gegenbauer ($\alpha = \beta = \lambda - \frac{1}{2}$ com $\lambda \neq 0$).

- Gauss-Laguerre

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n W_i f(x_i), \quad \alpha > -1,$$

sendo x_i o i -ésimo zero de $L_n^{(\alpha)}$.

- Gauss-Hermite

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n W_i f(x_i),$$

sendo x_i o i -ésimo zero de H_n .

Vale destacar que as quadraturas de Gauss-Jacobi e de Gauss-Laguerre podem ser utilizadas para aproximar integrais em intervalos gerais $[c, d]$ e $[c, \infty)$, respectivamente, a saber

$$\int_c^d (d-x)^\alpha (x-c)^\beta f(x) dx, \quad \int_c^\infty e^{-x} (x-c)^\alpha f(x) dx, \quad \alpha, \beta > -1.$$

Capítulo 3

Polinômios de Gegenbauer

Os polinômios ortogonais de Gegenbauer recebem este nome em alusão ao matemático austríaco Leopold Bernhard Gegenbauer (1849-1903) cuja tese de doutorado de 1875 demonstrava uma célebre fórmula de adição para tais polinômios¹. Quase um século depois Koornwinder [37] demonstrou uma generalização desta fórmula para os polinômios de Jacobi:

$$\begin{aligned} P_n^{(\alpha,\beta)}(2|\cos\theta_1\cos\theta_2 + re^{i\varphi}\sin\theta_1\sin\theta_2|^2 - 1) &= \\ &= \sum_{k=0}^n \sum_{m=0}^k c_{n,k,m}^{(\alpha,\beta)} (\sin\theta_1\sin\theta_2)^{k+m} (\cos\theta_1\cos\theta_2)^{k-m} \\ &\quad \cdot P_{n-k}^{(\alpha+k+m,\beta+k-m)}(\cos 2\theta_1) P_{n-k}^{(\alpha+k+m,\beta+k-m)}(\cos 2\theta_2) \\ &\quad \cdot P_m^{(\alpha-\beta-1,\beta+k-m)}(2r^2 - 1) r^{k-m} \frac{\beta+k-m}{\beta} P_{k-m}^{(\beta)}(\cos\varphi), \end{aligned}$$

onde

$$c_{n,k,m}^{(\alpha,\beta)} = \frac{(k+m+\alpha)\Gamma(n+k+\alpha+\beta+1)\Gamma(k+\alpha)\Gamma(\beta+1)\Gamma(n+\beta+1)\Gamma(n-k+1)}{\Gamma(n+\alpha+\beta+1)\Gamma(n+m+\alpha+1)\Gamma(k+\beta+1)\Gamma(n-m+\beta+1)}$$

e a relação

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{\beta+n}{\beta} P_n^{(\beta)}(\cos\varphi) = \begin{cases} 2\cos n\varphi, & n = 1, 2, \dots, \\ 1, & n = 0, \end{cases}$$

é usada quando $\beta = 0$. A fórmula de adição demonstrada por Gegenbauer pode ser obtida ao usarmos $r = 1$ e $\alpha = \beta$ na fórmula acima, ver [49].

Creemos que a denominação *polinômios ultraesféricos* para os polinômios de Gegenbauer se deve, em parte, ao papel desempenhado por tais polinômios na teoria dos harmônicos

¹Fonte: <http://www-history.mcs.st-andrews.ac.uk/Biographies/Gegenbauer.html>.

hiperesféricos, como cita Avery [8]. Especificamente, os polinômios de Legendre têm seu papel na teoria dos harmônicos esféricos tridimensionais.

Neste capítulo iremos apresentar os polinômios ortogonais, mônicos, ortonormais e trigonométricos de Gegenbauer. Também apresentaremos a quadratura Gauss-Gegenbauer com várias fórmulas para os pesos em função dos polinômios ortogonais, mônicos e ortonormais.

3.1 Polinômios ortogonais, mônicos e ortonormais

Se tomarmos a função $w(x) = (1 - x^2)^{\lambda - \frac{1}{2}}$ com $\lambda > -\frac{1}{2}$ e $\lambda \neq 0$, sobre o intervalo $[-1, 1]$, então os momentos μ_k serão dados por

$$\mu_k = \int_{-1}^1 (1 - x^2)^{\lambda - \frac{1}{2}} x^k dx, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Deste modo, os momentos existirão e serão finitos. De fato, se k for ímpar, então $\mu_k = 0$, pois o integrando será uma função ímpar sobre o intervalo $[-1, 1]$. Se k for par, então

$$\mu_k = 2 \int_0^1 (1 - x^2)^{\lambda - \frac{1}{2}} x^k dx.$$

Introduzindo a mudança de variáveis $u = 1 - x^2$, teremos

$$\mu_k = \int_0^1 u^{\lambda - \frac{1}{2}} (1 - u)^{\frac{k-1}{2}} du.$$

Mas, para $x, y \in \mathbb{C}$, $Re(x) > 0$ e $Re(y) > 0$, temos que

$$B(x, y) = \int_0^1 u^{x-1} (1 - u)^{y-1} du,$$

onde $B(x, y)$ é a função especial Beta que, por sua vez, pode ser dada em termos da função especial Gama $\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t} t^{x-1} dt$, isto é, $B(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$. Portanto,

$$\mu_k = \begin{cases} \frac{\Gamma(\lambda + \frac{1}{2}) \Gamma(\frac{k+1}{2})}{\Gamma(\lambda + 1 + \frac{k}{2})}, & \text{se } k \text{ for par,} \\ 0, & \text{se } k \text{ for ímpar.} \end{cases}$$

Deste modo a função $w(x) = (1 - x^2)^{\lambda - \frac{1}{2}}$, $-\frac{1}{2} < \lambda \neq 0$, em $[-1, 1]$ é, de fato, uma função peso porque w é: não negativa, diferente da função nula e integrável sobre o intervalo $[-1, 1]$ tal que os momentos μ_k existem e são finitos para $k = 0, 1, 2, \dots$

Uma representação explícita dos polinômios ortogonais de Gegenbauer é dada por [49],

$$P_n^{(\lambda)}(x) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \sum_{i=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^i \frac{\Gamma(n-i+\lambda)}{i!(n-2i)!} (2x)^{n-2i}. \quad (3.1)$$

O coeficiente líder de $P_n^{(\lambda)}$ é

$$A_n = \frac{2^n \Gamma(n+\lambda)}{n! \Gamma(\lambda)} > 0. \quad (3.2)$$

Para tais polinômios,

$$\gamma_{\phi_n} = \frac{2\pi}{2^{2\lambda}(n+\lambda)n!} \frac{\Gamma(n+2\lambda)}{\Gamma^2(\lambda)}. \quad (3.3)$$

Em Szegő [49] encontramos a seguinte equação diferencial linear homogênea de segunda ordem para $P_n^{(\lambda)}$,

$$(1-x^2) P_n^{(\lambda)''}(x) - (2\lambda+1)x P_n^{(\lambda)'}(x) + n(n+2\lambda) P_n^{(\lambda)}(x) = 0. \quad (3.4)$$

Ao dividir os termos da equação (3.1) pelo coeficiente líder (3.2) teremos, após algumas simplificações, a seguinte representação explícita para os polinômios mônicos,

$$\widehat{P}_n^{(\lambda)}(x) = x^n + n \left(\sum_{i=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^i}{4^i i!} \frac{\prod_{k=1}^{2i-1} (n-k)}{\prod_{j=1}^i (n+\lambda-j)} x^{n-2i} \right), \quad n \geq 2. \quad (3.5)$$

É claro que $\widehat{P}_1^{(\lambda)}(x) = x$ e $\widehat{P}_0^{(\lambda)}(x) = 1$. A representação explícita para os polinômios ortogonais é obtida por (3.1) e (3.3),

$$P_n^{(\lambda)*}(x) = 2^\lambda \sqrt{\frac{(n+\lambda)n!}{2\pi\Gamma(n+2\lambda)}} \sum_{i=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^i \frac{\Gamma(n-i+\lambda)}{i!(n-2i)!} (2x)^{n-2i}. \quad (3.6)$$

Pelo Teorema 2.3, tem-se a relação de recorrência para os polinômios ortogonais de Gegenbauer $P_n^{(\lambda)}$,

$$P_{n+1}^{(\lambda)}(x) = \frac{2(n+\lambda)}{n+1} x P_n^{(\lambda)}(x) + \frac{1-n-2\lambda}{n+1} P_{n-1}^{(\lambda)}(x), \quad n \geq 0, \quad (3.7)$$

sendo $P_{-1}^{(\lambda)}(x) := 0$ e $P_0^{(\lambda)}(x) = 1$.

Os polinômios mônicos de Gegenbauer $\widehat{P}_n^{(\lambda)}$, cuja sequência é $\{\widehat{P}_n^{(\lambda)}\}_{n=0}^{\infty}$, obedecem à seguinte relação de recorrência, segundo o Teorema 2.4,

$$\widehat{P}_{n+1}^{(\lambda)}(x) = x \widehat{P}_n^{(\lambda)}(x) - \frac{n(n+2\lambda-1)}{4(n+\lambda)(n+\lambda-1)} \widehat{P}_{n-1}^{(\lambda)}(x), \quad n \geq 0, \quad (3.8)$$

sendo $\widehat{P}_{-1}^{(\lambda)}(x) := 0$ e $\widehat{P}_0^{(\lambda)}(x) = 1$.

Já os polinômios ortonormais de Gegenbauer $P_n^{(\lambda)*}$, cuja sequência é representada por $\{P_n^{(\lambda)*}\}_{n=0}^{\infty}$, obedecem à seguinte relação de recorrência, segundo o Teorema 2.5,

$$\sqrt{\beta_{n+1}}P_{n+1}^{(\lambda)*}(x) = xP_n^{(\lambda)*}(x) - \sqrt{\beta_n}P_{n-1}^{(\lambda)*}(x), \quad n \geq 0, \quad (3.9)$$

sendo $P_{-1}^{(\lambda)*}(x) := 0$ e $P_0^{(\lambda)*}(x) = \frac{\sqrt{\Gamma(2\lambda+1)}}{2\lambda\Gamma(\lambda+\frac{1}{2})}$ onde $\beta_n = \frac{n(n+2\lambda-1)}{4(n+\lambda)(n+\lambda-1)}$, $n \geq 1$.

Os quatro primeiros polinômios ortogonais de Gegenbauer são:

$$P_0^{(\lambda)}(x) = 1,$$

$$P_1^{(\lambda)}(x) = 2\lambda x,$$

$$P_2^{(\lambda)}(x) = 2\lambda(1+\lambda)x^2 - \lambda,$$

$$P_3^{(\lambda)}(x) = \frac{4}{3}\lambda(\lambda+2)(\lambda+1)x^3 - 2\lambda(1+\lambda)x.$$

As Figuras 3.1 e 3.2 exibem os gráficos dos polinômios de Legendre $P_n(x) = P_n^{(1/2)}(x)$ e de Chebyshev de 2ª espécie $U_n(x) = P_n^{(1)}(x)$ de graus até 5.

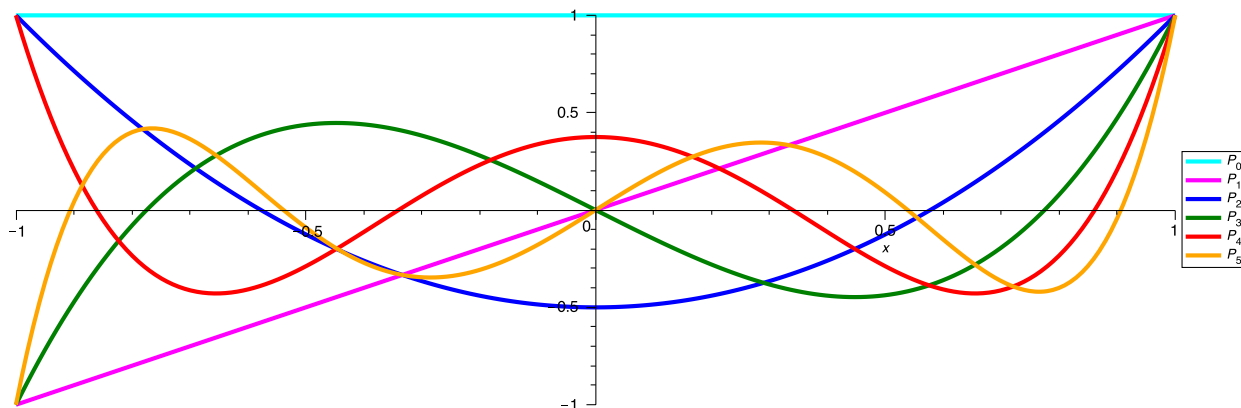
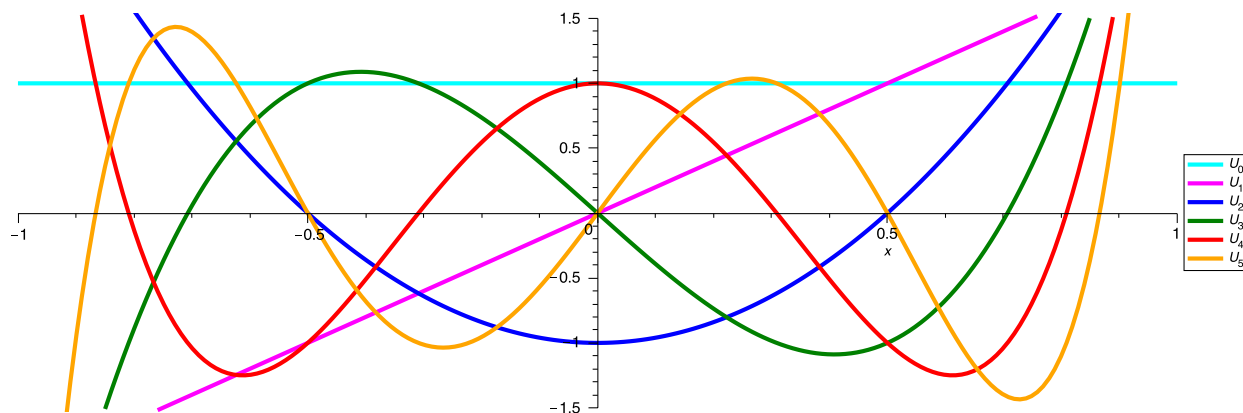


Figura 3.1: Polinômios de Legendre P_n , $0 \leq n \leq 5$.

Pelos gráficos podemos verificar que os zeros destes polinômios são reais, simples e contidos no intervalo $(-1, 1)$ conforme o Teorema 2.2. Além disso, os zeros são simétricos com relação à origem, pois w é uma função par (Corolário 2.8.1). Tais polinômios também são funções pares ou ímpares (Teorema 2.8). Além disto, é possível verificar outras propriedades que não foram mencionadas neste trabalho, tais como o entrelaçamento dos zeros de dois polinômios de graus consecutivos.


 Figura 3.2: Polinômios de Chebyshev de 2ª espécie U_n , $0 \leq n \leq 5$.

3.2 Polinômios trigonométricos

Um *polinômio trigonométrico* p na variável θ possui a forma

$$p(\theta) = u_0 + u_1 \cos \theta + v_1 \sin \theta + u_2 \cos 2\theta + v_2 \sin 2\theta + \dots + u_n \cos n\theta + v_n \sin n\theta,$$

com coeficientes u 's e v 's complexos. O grau de p é o maior natural n tal que $|u_n| + |v_n| > 0$. Quando todos os coeficientes u 's ou todos os coeficientes v 's são nulos, então p é chamado de *polinômio trigonométrico em senos* ou *cossenos*, respectivamente.

As funções $\cos n\theta$ e $\sin(n+1)\theta/\sin\theta$ são polinômios na variável $\cos\theta$ de graus n . Eles são os polinômios de Chebyshev de 1ª e 2ª espécies, respectivamente, onde $x = \cos\theta$:

$$\cos n\theta = T_n(\cos \theta) = T_n(x), \quad \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta} = U_n(\cos \theta) = U_n(x).$$

Logo qualquer polinômio trigonométrico em cossenos de grau n é um polinômio de mesmo grau em $x = \cos\theta$ e vice-versa. Ainda, qualquer polinômio trigonométrico em senos de grau n dividido por $\sin\theta$ fornece um polinômio trigonométrico em cossenos de grau $n-1$. Szegő [49] apresenta a seguinte representação dos polinômios trigonométricos de Gegenbauer, onde $x = \cos\theta$,

$$P_n^{(\lambda)}(\cos \theta) = 2\nu_0\nu_n \cos n\theta + 2\nu_1\nu_{n-1} \cos(n-2)\theta + \dots + \begin{cases} 2\nu_{(n-1)/2}\nu_{(n+1)/2} \cos \theta, & n \text{ ímpar,} \\ \nu_{n/2}^2, & n \text{ par,} \end{cases}$$

onde $\nu_k = \frac{\Gamma(k+\lambda)}{\Gamma(\lambda)\Gamma(k+1)}$, $k = 0, 1, 2, \dots$. Denotaremos os polinômios trigonométricos de Gegenbauer por $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$,

$$\mathcal{P}_n^{(\lambda)}(\theta) = P_n^{(\lambda)}(\cos \theta).$$

Como se vê, $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$ é um polinômio trigonométrico em cossenos. Em particular, se $\lambda > 0$ os termos ν 's são todos positivos.

É claro que um polinômio trigonométrico pode admitir infinitos zeros sobre \mathbb{R} porque ele é uma função transcendente. Mas sobre o intervalo $(0, \pi)$ teremos que o polinômio trigonométrico de Gegenbauer $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$ possuirá exatamente n zeros. Isto decorre do fato de que os n zeros de $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$ estão contidos em $(-1, 1)$. Além disto, a paridade de $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$ implica que o gráfico de $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$ será simétrico com relação ao ponto $(\pi/2, 0)$ (caso n seja ímpar) ou simétrico com relação à reta $\theta = \pi/2$ (caso n seja par). Consequentemente, os n zeros de $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$ sobre $(0, \pi)$ estarão distribuídos simetricamente com relação à $\pi/2$. A Figura 3.3 exhibe os gráficos dos polinômios trigonométricos de Gegenbauer

$$\mathcal{P}_7^{(1/3)}(\theta) = \frac{3952}{19683} \cos 7\theta + \frac{1456}{19683} \cos 5\theta + \frac{364}{6561} \cos 3\theta + \frac{980}{19683} \cos \theta$$

e

$$\mathcal{P}_8^{(1/3)}(\theta) = \frac{10868}{59049} \cos 8\theta + \frac{3952}{59049} \cos 6\theta + \frac{2912}{59049} \cos 4\theta + \frac{2548}{59049} \cos 2\theta + \frac{1225}{59049},$$

sobre o intervalo $(0, \pi)$.

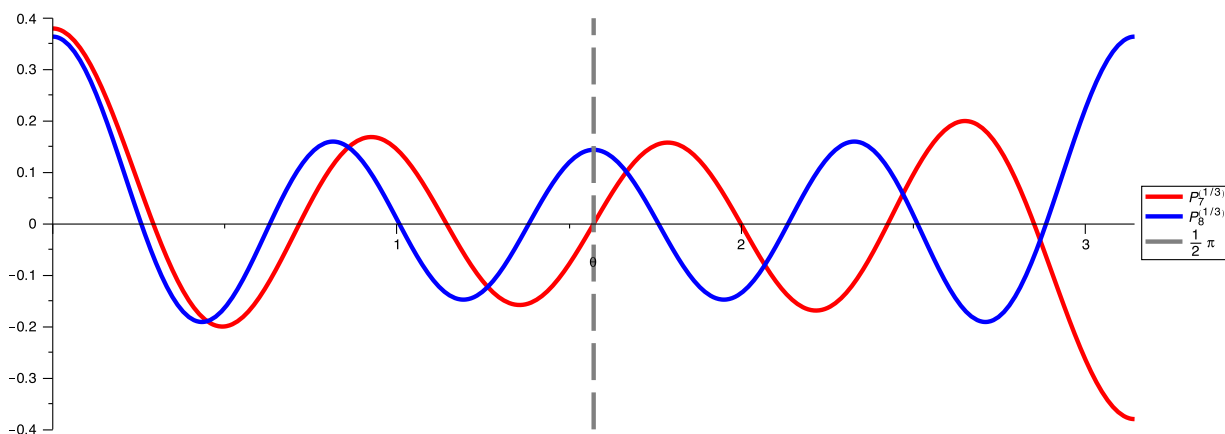


Figura 3.3: Polinômios trigonométricos de Gegenbauer de graus $n = 7$ e $n = 8$ com $\lambda = 1/3$.

Na figura anterior podemos conferir os tais n zeros contidos em $(0, \pi)$ além da simetria dos mesmos com relação a $\pi/2$. Também é possível notar que os zeros ficam mais espaçados entre si no intervalo $(0, \pi)$ em relação aos zeros dos polinômios na variável x que tendem a se concentrar nos extremos ± 1 . Com isso o cálculo dos zeros trigonométricos pode ser mais vantajoso do que o cálculo dos zeros em x . Na Subseção 4.2.2 voltaremos a discutir este assunto.

3.3 Quadratura de Gauss-Gegenbauer

Como já foi explicado, a quadratura de Gauss-Gegenbauer é um caso particular da quadratura de Gauss-Jacobi quando $\alpha = \beta = \lambda - \frac{1}{2}$ com $\lambda \neq 0$. Explicitamente tal quadratura é dada por

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^{\lambda-\frac{1}{2}} f(x) dx = \sum_{i=1}^n W_i f(x_i) + E_{f,n},$$

sendo x_i o i -ésimo zero de $P_n^{(\lambda)}$ e onde, por (2.30),

$$W_i = -\frac{4\pi}{2^{2\lambda}(n+1)!} \frac{\Gamma(n+2\lambda)}{\Gamma^2(\lambda)P_n^{(\lambda)'}(x_i)P_{n+1}^{(\lambda)}(x_i)}, \quad (3.10)$$

ou, por (2.32),

$$W_i = \frac{4\pi}{2^{2\lambda}n!} \frac{\Gamma(n+2\lambda-1)}{\Gamma^2(\lambda)P_n^{(\lambda)'}(x_i)P_{n-1}^{(\lambda)}(x_i)} \quad (3.11)$$

e o erro é dado por

$$E_{f,n} = \frac{2^{2(\lambda+n)}n!\Gamma(n+2\lambda)\Gamma^2(n+\lambda+\frac{1}{2})}{2(n+\lambda)(2n)!\Gamma^2(2n+2\lambda)} f^{(2n)}(\xi(x)), \quad \xi(x) \in (-1, 1). \quad (3.12)$$

Em Szegő [49] é dada a seguinte relação

$$(1-x^2)P_n^{(\lambda)'}(x) = -nxP_n^{(\lambda)}(x) + (n+2\lambda-1)P_{n-1}^{(\lambda)}(x) = (n+2\lambda)xP_n^{(\lambda)}(x) - (n+1)P_{n+1}^{(\lambda)}(x), \quad (3.13)$$

na qual, fazendo $x = x_i$,

$$(1-x_i^2)P_n^{(\lambda)'}(x_i) = (n+2\lambda-1)P_{n-1}^{(\lambda)}(x_i) = -(n+1)P_{n+1}^{(\lambda)}(x_i).$$

Observando as duas últimas igualdades, os pesos W_i em (3.10) e (3.11) tornam-se iguais a

$$W_i = \frac{4\pi}{2^{2\lambda}n!} \frac{\Gamma(n+2\lambda)}{\Gamma^2(\lambda)(1-x_i^2) \left[P_n^{(\lambda)'}(x_i) \right]^2}. \quad (3.14)$$

Como os polinômios de Gegenbauer são funções pares ou ímpares (Teorema 2.8) e os zeros são simétricos com relação à origem (Corolário 2.8.1), então

$$\left[P_n^{(\lambda)'}(x_i) \right]^2 = \left[P_n^{(\lambda)'}(x_{n+1-i}) \right]^2.$$

Logo, $W_i = W_{n+1-i}$, isto é, os pesos são iguais para respectivos zeros simétricos.

Outra fórmula para os pesos pode ser dada por meio de (2.33),

$$W_i = \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} \frac{[P_k^{(\lambda)}(x_i)]^2}{\gamma_{\phi_k}} \right\}^{-1}, \quad \gamma_{\phi_k} = \frac{2\pi}{2^{2\lambda}(k+\lambda)k!} \frac{\Gamma(k+2\lambda)}{\Gamma^2(\lambda)}. \quad (3.15)$$

Também podemos calcular os pesos W_i por meio da caracterização dos autovetores do Teorema 2.9,

$$W_i = \frac{2^{2\lambda}\Gamma^2(\lambda + \frac{1}{2})}{\Gamma(2\lambda + 1)} \mathbf{v}_{i,1}^2, \quad (3.16)$$

sendo $\mathbf{v}_{i,1}$ o primeiro elemento do autovetor \mathbf{v}_i normalizado da matriz de Jacobi

$$\mathbf{J}_n = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{\beta_1} & & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & 0 & \sqrt{\beta_2} & & & \\ & \sqrt{\beta_2} & 0 & \sqrt{\beta_3} & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \sqrt{\beta_{n-2}} & 0 & \sqrt{\beta_{n-1}} \\ 0 & & & & \sqrt{\beta_{n-1}} & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta_j = \frac{j(j+2\lambda-1)}{4(j+\lambda)(j+\lambda-1)}, \quad (3.17)$$

$j = 1, \dots, n-1$. Salientamos que as quadraturas de Gauss-Legendre ($\lambda = \frac{1}{2}$) e de Gauss-Chebyshev de 2ª espécie ($\lambda = 1$) são casos particulares de Gauss-Gegenbauer.

Vejamos que, além da fórmula (3.16) que depende do cálculo de autovetores, temos outras 4 fórmulas para os pesos W_i da quadratura de Gauss-Gegenbauer, a saber: (3.10), (3.11), (3.14) e (3.15). Note que todas estas últimas quatro fórmulas dependem do polinômio ortogonal. Então, se nelas utilizarmos o polinômio ortonormal ou mônico ao invés do ortogonal, obteremos mais outras oito fórmulas para W_i . Ao todo temos doze fórmulas que estão na Tabela

3.1. Para obtê-las, basta observar que $\widehat{P}_n^{(\lambda)}(x) = \frac{P_n^{(\lambda)}(x)}{A_n}$, $\gamma_{\widehat{\phi}_n} = \frac{\gamma_{\phi_n}}{A_n^2}$, $P_n^{(\lambda)*}(x) = \frac{\widehat{P}_n^{(\lambda)}(x)}{\sqrt{\gamma_{\widehat{\phi}_n}}}$,

$\gamma_{\phi_n^*} = 1$ e usar que $\frac{\Gamma(\lambda + \frac{1}{2})}{\Gamma(2\lambda)} = \frac{2\sqrt{\pi}}{2^{2\lambda}\Gamma(\lambda)}$, segundo Abramowitz e Stegun [1].

Nº	$W_{n,i}$ com ortogonais $P_n^{(\lambda)}(x)$	$W_{n,i}$ com mônicos $\widehat{P}_n^{(\lambda)}(x)$	$W_{n,i}$ com ortonormais $P_n^{(\lambda)*}(x)$
1	$-\frac{4\pi}{2^{2\lambda}(n+1)!} \frac{\Gamma(n+2\lambda)}{\Gamma^2(\lambda) P_n^{(\lambda)'}(x_i) P_{n+1}^{(\lambda)}(x_i)}$	$-\frac{2\pi n!}{2^{2n+2\lambda}} \frac{\Gamma(n+2\lambda)}{\Gamma^2(n+\lambda) \widehat{P}_n^{(\lambda)'}(x_i) \widehat{P}_{n+1}^{(\lambda)}(x_i)}$	$-\frac{2(n+\lambda)}{(n+1)} \frac{\sqrt{(n+\lambda+1)(n+1)}}{\sqrt{(n+2\lambda)(n+\lambda)} P_n^{(\lambda)*'}(x_i) P_{n+1}^{(\lambda)*}(x_i)}$
2	$\frac{4\pi}{2^{2\lambda} n!} \frac{\Gamma(n+2\lambda-1)}{\Gamma^2(\lambda) P_n^{(\lambda)'}(x_i) P_{n-1}^{(\lambda)}(x_i)}$	$\frac{8\pi(n+\lambda-1)(n-1)!}{2^{(2n+2\lambda)}} \frac{\Gamma(n+2\lambda-1)}{\Gamma^2(n+\lambda) \widehat{P}_n^{(\lambda)'}(x_i) \widehat{P}_{n-1}^{(\lambda)}(x_i)}$	$\frac{2(n+\lambda)}{(n+2\lambda-1)} \frac{\sqrt{(n+\lambda-1)(n+2\lambda-1)}}{\sqrt{n(n+\lambda)} P_n^{(\lambda)*'}(x_i) P_{n-1}^{(\lambda)*}(x_i)}$
3	$\frac{4\pi}{2^{2\lambda} n!} \frac{\Gamma(n+2\lambda)}{\Gamma^2(\lambda) (1-x_i^2) [P_n^{(\lambda)'}(x_i)]^2}$	$\frac{4\pi n!}{2^{2n+2\lambda}} \frac{\Gamma(n+2\lambda)}{\Gamma^2(n+\lambda) (1-x_i^2) [\widehat{P}_n^{(\lambda)'}(x_i)]^2}$	$\frac{2n+2\lambda}{(1-x_i^2) [P_n^{(\lambda)*'}(x_i)]^2}$
4	$\frac{2\pi}{2^{2\lambda} \Gamma^2(\lambda)} \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} \frac{[P_k^{(\lambda)}(x_i)]^2}{\frac{\Gamma(k+2\lambda)}{(k+\lambda)k!}} \right\}^{-1}$	$\frac{2\pi}{2^{2\lambda}} \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} \frac{[\widehat{P}_k^{(\lambda)}(x_i)]^2}{\frac{k! \Gamma(k+2\lambda)}{2^{2k} (k+\lambda) \Gamma^2(k+\lambda)}} \right\}^{-1}$	$\left\{ \sum_{k=0}^{n-1} [P_k^{(\lambda)*}(x_i)]^2 \right\}^{-1}$

Tabela 3.1: Diferentes fórmulas para os pesos $W_{n,i}$ da quadratura de Gauss-Gegenbauer.

Capítulo 4

Cálculo dos pontos e pesos

Neste capítulo discutiremos sobre os dois métodos citados para o cálculo dos pontos e pesos para a quadratura de Gauss-Gegenbauer: o método do autossistema e o método de Newton-Raphson. Apresentaremos tais métodos e seus algoritmos nas Seções 4.1 e 4.2. Um panorama geral sobre a utilização de Newton-Raphson para os zeros dos polinômios ortogonais será dado na Seção 4.2 onde citaremos as principais obras que versam sobre o assunto. Na Seção 4.2 também demonstraremos o teorema que fornece as condições suficientes para a convergência de Newton-Raphson, discutiremos sobre a aproximação inicial para tal método e mencionaremos outros métodos iterativos. Por fim, na Seção 4.3 iremos comparar a exatidão e o tempo de execução dos métodos de Newton-Raphson e do autossistema.

4.1 Método do autossistema

O método do autossistema consiste em calcular os pontos e pesos para a quadratura de Gauss por meio da caracterização dos autovalores e autovetores da matriz de Jacobi como mostrou o Teorema 2.9.

Segundo Gautschi [31] a caracterização dos pontos da quadratura de Gauss como autovalores da matriz de Jacobi tem uma origem incerta e tem sido usada há algum tempo principalmente pelos físicos. Ainda segundo o autor, a caracterização dos pesos da quadratura de Gauss em termos dos autovetores é mais recente e foi notada por Wilf [52, p. 80 exerc. 9] (Teorema 2.6) e, previamente, em torno de 1954, por G. Goertzel. Golub e Welsch [33] reconheceram a importância dessas caracterizações na computação e desenvolveram um procedimento detalhado baseado no algoritmo QR para o cálculo dos autovalores e autovetores da matriz de Jacobi.

O algoritmo de Golub e Welsch [33] está implementado na linguagem FORTRAN na sub-rotina SGAUSQ disponível em netlib.org/go/sgausq.f. Optamos por tal sub-rotina porque a mesma tem sido usada na literatura para o método do autossistema. Vale ressaltar que a implementação do mesmo algoritmo em MATLAB usando a função `eig` é incapaz de explorar a estrutura especial da matriz de Jacobi, ver [34].

4.2 Método de Newton-Raphson

Conforme relata Cajori [12], Isaac Newton (1642-1727) descreveu um método para aproximar uma raiz da equação cúbica

$$x^3 - 2x - 5 = 0,$$

em uma célebre obra que, embora escrita em latim no ano de 1671, só foi publicada em 1736 traduzida para o inglês com o nome *Method of Fluxions and Infinite Series*. Entretanto, em 1690, Joseph Raphson (1648-1715) publicou *Analysis aequationum universalis* onde descreveu o método de Newton-Raphson (como hoje o conhecemos) para aproximar uma raiz real de uma equação qualquer. Por essa razão, tal método é conhecido por método de Newton-Raphson.

Seja $f : [c, d] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^1 , duas vezes derivável no intervalo (c, d) , tal que ξ é a raiz da equação

$$f(x) = 0$$

isolada no intervalo $[c, d]$. Suponha ainda que f' preserve o sinal em $[c, d]$. Seja $x^{[i]}$ a i -ésima aproximação da raiz ξ . O método de Newton-Raphson consiste em melhorar a aproximação $x^{[i]}$ como mostraremos a seguir.

Seja

$$\xi = x^{[i]} + \delta_i, \tag{4.1}$$

onde δ_i é um número real pequeno mas não nulo. Então, aplicando a fórmula de Taylor com resto de Lagrange,

$$0 = f(x^{[i]} + \delta_i) = f(x^{[i]}) + f'(x^{[i]})\delta_i + \frac{f''(\eta)}{2}\delta_i^2, \quad \text{onde } \eta \text{ está entre } x^{[i]} \text{ e } x^{[i]} + \delta_i.$$

Conseqüentemente, desprezando o termo do resto do polinômio de Taylor acima,

$$0 \approx f(x^{[i]}) + f'(x^{[i]})\delta_i,$$

e, resolvendo para δ_i ,

$$\delta_i \approx -\frac{f(x^{[i]})}{f'(x^{[i]})}.$$

Inserindo a correção acima em (4.1), obtém-se a nova aproximação da raiz,

$$x^{[i+1]} = x^{[i]} - \frac{f(x^{[i]})}{f'(x^{[i]})}, \quad i = 0, 1, \dots \quad (4.2)$$

O método iterativo em (4.2) é o *método de Newton-Raphson*. Tal método converge quadraticamente, isto é, quando $x^{[i]}$ está próximo de ξ o número de dígitos significativos de $x^{[i+1]}$ é, aproximadamente, o dobro do número de dígitos significativos de $x^{[i]}$. Segundo Press *et al.* [44] esta rápida convergência faz de Newton-Raphson o método de preferência quando deseja-se calcular um zero de função cuja derivada possa ser avaliada eficientemente e cuja derivada seja contínua e não nula na vizinhança de cada zero.

Apresentaremos agora o teorema que fornece condições suficientes para a convergência do método de Newton-Raphson. Tal teorema está demonstrado em Demidovich e Maron [18], todavia o resultado original é mais antigo.

Teorema 4.1 (Condições suficientes para convergência). *Seja $f: [c, d] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^1 , duas vezes derivável no intervalo (c, d) . Se $f(c)f(d) < 0$, f' e f'' forem não nulas e preservarem o sinal em $[c, d]$, então partindo-se da aproximação inicial $x^{[0]} \in [c, d]$ tal que $f(x^{[0]})f''(x^{[0]}) > 0$ será possível construir pelo método de Newton-Raphson uma seqüência $\{x^{[0]}, x^{[1]}, x^{[2]}, \dots\}$ que convirja para o zero $\xi \in (c, d)$ de f .*

Demonstração. Primeiramente notemos que, diante das hipóteses, ξ é a única raiz de $f(x) = 0$ em $[c, d]$ a qual possui multiplicidade 1. Sem perda de generalidade, suponhamos $f(c) < 0$ e $f''(x) > 0$ para $c \leq x \leq d$. Nestas condições, $f(d) > 0$ e $f'(x) > 0$ para $c \leq x \leq d$. Por hipótese, $f(x^{[0]})f''(x^{[0]}) > 0$, então teremos $f(x^{[0]}) > 0$. Digamos que $x^{[0]} = d$. Provaremos, por indução, que $x^{[i]} > \xi$ para $i = 0, 1, 2, \dots$ e, conseqüentemente, $f(x^{[i]}) > 0$. Inicialmente, vejamos que $x^{[0]} > \xi$. Agora, suponhamos que $x^{[i]} > \xi$ e vamos provar que $x^{[i+1]} > \xi$. Tomemos a igualdade

$$\xi = x^{[i]} + (\xi - x^{[i]}).$$

Usando a fórmula de Taylor com resto de Lagrange teremos que

$$0 = f(\xi) = f(x^{[i]}) + f'(x^{[i]})(\xi - x^{[i]}) + \frac{f''(\eta_i)}{2}(\xi - x^{[i]})^2, \quad (4.3)$$

onde $\xi < \eta_i < x^{[i]}$. Como $f''(\eta_i) > 0$,

$$f(x^{[i]}) + f'(x^{[i]})(\xi - x^{[i]}) < 0,$$

consequentemente,

$$x^{[i+1]} = x^{[i]} - \frac{f(x^{[i]})}{f'(x^{[i]})} > \xi,$$

o que prova nossa tese de indução. Agora, mediante os sinais de $f(x^{[i]})$ e $f'(x^{[i]})$ temos, por (4.2), que $x^{[i+1]} < x^{[i]}$, $i = 0, 1, 2, \dots$. Isto é, a sequência das aproximações sucessivas $\{x^{[0]}, x^{[1]}, x^{[2]}, \dots\}$ é uma sequência monótona decrescente e limitada. Logo seu limite L existe, isto é,

$$\lim_{i \rightarrow \infty} x^{[i]} = L.$$

Passando ao limite em (4.2),

$$L = L - \frac{f(L)}{f'(L)},$$

implicando que $f(L) = 0$, portanto, $L = \xi$. □

Ressaltamos aqui que conhecemos outros teoremas, por exemplo, [14, p. 225] e [7, p. 54], que também fornecem garantias para a convergência do método de Newton-Raphson. Contudo julgamos que as condições de tais teoremas, apesar de parecidas com as do Teorema 4.1, são menos usuais para o nosso objetivo. Iremos discutir a importância do Teorema 4.1 sobre o nosso trabalho nos próximos capítulos.

Abaixo apresentamos o algoritmo geral do método de Newton-Raphson para os pontos e pesos da quadratura de Gauss-Gegenbauer.

O Algoritmo 1 poderá ser utilizado com quaisquer um dos 3 polinômios: ortogonal ($f^{(\lambda)}(x) = P_n^{(\lambda)}(x)$), mônico ($f^{(\lambda)}(x) = \widehat{P}_n^{(\lambda)}(x)$) ou ortonormal ($f^{(\lambda)}(x) = P_n^{(\lambda)*}(x)$). Como os zeros são simétricos, somente os zeros positivos são calculados pelo método de Newton-Raphson. Os zeros negativos são obtidos automaticamente ao multiplicarmos o zero positivo por -1 e, quando n for ímpar, o zero nulo e seu respectivo peso são dados analiticamente. Cada vez que um zero é obtido, o respectivo peso da quadratura é calculado por meio de uma das fórmulas constantes na Tabela 3.1. As avaliações de $f^{(\lambda)}$ podem ser obtidas por meio de uma relação explícita ou por meio de uma das relações de recorrência (3.7), (3.8) ou (3.9), dependendo do polinômio (ortogonal, mônico ou ortonormal). Para avaliar $f^{(\lambda)'$ utilizamos (3.13) fazendo uso também de (3.2) e (3.3) no caso dos mônicos e ortonormais, respectivamente.

Existem diversas fórmulas e desigualdades para os zeros dos polinômios ultrasféricos que podem ser utilizadas para dar uma boa aproximação inicial. Antes de discutirmos o assunto da aproximação inicial com mais detalhes, iremos citar nas duas próximas subseções algumas importantes referências que versam sobre o uso de Newton-Raphson para as quadraturas de Gauss. Daremos destaque para as quadraturas de Gauss-Gegenbauer no caso principal.

Algoritmo 1: Método de Newton-Raphson para Gauss-Gegenbauer.**Entrada:** Número n de pontos e parâmetro $\lambda \in (0, 1)$ **Saída:** Vetores X e W contendo os pontos e os pesos, $X(1) > X(2) > \dots > X(n)$ se $n > 1$ então para $i \leftarrow 1$ até $\lfloor n/2 \rfloor$ faça $z \leftarrow$ aproximação inicial para o i -ésimo zero positivo

repita

 $p1 \leftarrow f^{(\lambda)}(z)$ $pp \leftarrow f^{(\lambda)'}(z)$ $z1 \leftarrow z$ $z \leftarrow z1 - p1/pp$ até $|z - z1| < \textit{tolerância}$ ou número máximo de iterações ser atingido; $X(i) \leftarrow z$ $X(n+1-i) \leftarrow -z$ $W(i) \leftarrow W_{n,i}$ $W(n+1-i) \leftarrow W(i)$

fim

fim

se n for ímpar então $X(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow 0$ $W(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow W_{n, \lfloor n/2 \rfloor + 1}$

fim

4.2.1 Principais referências

A notação $x_{n,k}$ indicará o k -ésimo zero do polinômio ortogonal de grau n que está sendo referenciado.

Segundo Gautschi [31], os pontos para as quadraturas de Gauss clássicas têm sido obtidos computacionalmente desde 1955. Davis e Rabinowitz [15, 16] usaram o método de Newton-Raphson para calcular os pontos de Gauss-Legendre para $n = 16, 20, 24, 32, 40, 48, 64, 80$ e 96 utilizando a seguinte aproximação inicial

$$x_{n,k} \approx \cos \frac{j_k}{\sqrt{(n + \frac{1}{2})^2 + \frac{1}{4} (1 - \frac{4}{\pi^2})}}, \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (4.4)$$

onde j_k são os zeros positivos e sucessivos da função de Bessel de primeira espécie J_0 e os zeros estão em ordem decrescente, $1 > x_{n,1} > x_{n,2} > \dots > x_{n,n} > -1$.

Nos itens **i** e **ii**, a seguir, citaremos duas importantes referências.

i. Stroud e Secrest [46]

Na década de 1960 A. H. Stroud e Don Secrest apresentam uma obra que se tornaria referência constante no assunto. Nela o método de Newton-Raphson é utilizado para todas as quadraturas de Gauss clássicas. Os autores consideram dois modos para se calcular os zeros dos polinômios de Jacobi $P_n^{(\alpha,\beta)}$, com $\alpha, \beta > -1$ utilizando tal método. Em ambos, inicialmente, é calculado o maior zero $x_{n,1}$ usando 1 como aproximação inicial. Uma vez encontrado $x_{n,1}$ (dentro da exatidão requerida) eles então sugerem duas alternativas:

1. Remova o fator $x - x_{n,1}$ de $P_n^{(\alpha,\beta)}$. O maior zero deste polinômio reduzido é $x_{n,2}$ e ele pode ser calculado do mesmo modo usando $x_{n,1}$ como aproximação inicial.
2. Conhecido $x_{n,1}$, encontre uma aproximação suficientemente boa para $x_{n,2}$ tal que o método de Newton-Raphson aplicado diretamente a $P_n^{(\alpha,\beta)}$ convirja.

Uma vez encontrado $x_{n,2}$ qualquer uma dessas alternativas pode ser repetida para encontrar $x_{n,3}$ e assim por diante. Segundo Stroud e Secrest [46] a alternativa 1 tem a vantagem de não apresentar dificuldade em encontrar aproximações para $x_{n,i}$ que irão convergir. Mas tem a desvantagem de introduzir um erro de aproximação. Por esta razão os autores preferem a alternativa 2. Esta última alternativa, conforme os autores, possui a vantagem sobre os cálculos que podem ser realizados por meio da relação de recorrência para os polinômios $P_n^{(\alpha,\beta)}$, logo o polinômio não precisa ser conhecido explicitamente. As aproximações utilizadas por eles são:

$$1 - x_{n,1} \approx \frac{(1 + \alpha) \left[\frac{2,78}{4+n^2} + \frac{0,768\alpha}{n^2} \right]}{1 + \frac{1,48\alpha}{n} + \frac{0,96\beta}{n} + \frac{0,452\alpha^2}{n^2} + \frac{0,83\alpha\beta}{n^2}}, \quad (4.5)$$

$$\frac{x_{n,1} - x_{n,2}}{1 - x_{n,1}} \approx \frac{(4,1 + \alpha)}{(1 + \alpha)(1 + 0,156\alpha)} \left[1 + \frac{0,06(n-8)(1 + 0,12\alpha)}{n} \right] \left[1 + \frac{0,012\beta(1 + 0,25|\alpha|)}{n} \right], \quad (4.6)$$

$$\frac{x_{n,2} - x_{n,3}}{x_{n,1} - x_{n,2}} \approx \left[\frac{1,67 + 0,28\alpha}{1 + 0,37\alpha} \right] \left[1 + \frac{0,22(n-8)}{n} \right] \left[1 + \frac{8\beta}{(6,28 + \beta)n^2} \right], \quad (4.7)$$

$$\frac{x_{n,3} - x_{n,4}}{x_{n,2} - x_{n,3}} \approx \left[\frac{0,766 + 0,119\alpha}{1 + 0,235\alpha} \right] \left[1 + \frac{0,639(n-4)}{1 + 0,71(n-4)} \right] \left[1 + \frac{20\beta}{(7,5 + \beta)n^2} \right]. \quad (4.8)$$

Os autores comparam por meio de tabelas a exatidão das aproximações acima. As aproximações (4.5), (4.6) e (4.7) são usadas para estimar, por sua vez, $x_{n,1}$, $x_{n,2}$ e $x_{n,3}$. Para $4 \leq k \leq n-2$ usa-se

$$x_{n,k} \approx 3x_{n,k-1} - 3x_{n,k-2} + x_{n,k-3}.$$

Trocando α por β em (4.8) obtém-se uma aproximação para $(x_{n,n-2} - x_{n,n-3}) / (x_{n,n-1} - x_{n,n-2})$. Logo, conhecendo $x_{n,n-2}$ e $x_{n,n-3}$, pode-se estimar $x_{n,n-1}$. Similarmente (4.7) fornece uma

aproximação para $(x_{n,n-1} - x_{n,n-2})/(x_{n,n} - x_{n,n-1})$ da qual pode-se estimar $x_{n,n}$. Segundo os autores, a maioria das aproximações é precisa dentro de 10% e, nos casos testados por eles, são suficientemente boas para garantir a convergência. E mais, apesar dessas aproximações servirem ao propósito desejado, seria interessante ter aproximações com exatidão de até 1%. Eles também notaram que no lugar de (4.5) poderia se usar simplesmente $x_{n,1} \approx 1$. Contudo, com tal aproximação inicial muitas iterações seriam requeridas para a convergência em $x_{n,1}$ quando α for grande. A aproximação (4.5) não é tão exata quanto as outras, mas contanto que o valor estimado não exceda o valor real, a convergência fica garantida, segundo eles.

Nesta obra também são apresentadas aproximações iniciais para os zeros dos polinômios de Hermite e Laguerre. Todavia, alertam os autores que o método de Newton-Raphson para os zeros dos polinômios de Laguerre pode gerar *overflow*¹.

São dadas sub-rotinas na linguagem FORTRAN para os pontos e pesos das quadraturas de Gauss-Jacobi, Gauss-Laguerre e Gauss-Hermite além de várias tabelas com os respectivos pontos e pesos para alguns valores de n . Em particular, para o caso de Gegenbauer há tabelas para $\lambda = 1/2, 1, 3/2$ e 2 para as quais os autores utilizaram as aproximações citadas acima usando $\alpha = \beta = \lambda - 1/2$ na rotina de Gauss-Jacobi.

Stroud e Secrest [46] não apresentam sub-rotinas específicas para Gauss-Gegenbauer nem Gauss-Legendre.

ii. Press *et al.* [44]

Já em [44], os autores apresentam rotinas na linguagem C++ para as quadraturas de Gauss nos casos de Legendre, Laguerre, Hermite e Jacobi². As aproximações iniciais para as quadraturas de Jacobi, Hermite e Laguerre são as mesmas de [46]. Em Gauss-Jacobi os autores utilizam o polinômio ortogonal ao invés do polinômio mônico que foi utilizado em [46].

A rotina para Gauss-Legendre é devida à G. B. Rybicki e utiliza a seguinte aproximação inicial

$$x_{n,k} \approx \cos \frac{4k-1}{4n+2} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (4.9)$$

com os zeros em ordem decrescente, $1 > x_{n,1} > x_{n,2} > \dots > x_{n,n} > -1$. Em tal rotina somente os zeros não negativos são calculados pelo método de Newton-Raphson e o zero simétrico é automaticamente obtido.

¹Operação aritmética que resulta em um número maior do que o maior número de ponto flutuante representável pelo computador.

²Há também as sub-rotinas em linguagem FORTRAN em outras edições da mesma obra.

Na rotina de Hermite, os autores utilizam o polinômio ortonormal a fim de evitar um possível *overflow*. Contudo, conforme já testado por nós em [42], tal *overflow* ocorre quando $n \geq 114$ e, usando o polinômio ortonormal como eles sugerem, o *overflow* ocorre quando $n \geq 200$. Ou seja, trocando o polinômio ortogonal pelo ortonormal, apenas estendemos o uso de n , mas não eliminamos totalmente o *overflow*. Também já verificamos que na rotina de Laguerre teremos *overflow* quando $n \geq 366$ com $\alpha = 1$. (O mesmo ocorre para diversos valores de α .) Aqui fica claro que o método de Newton-Raphson não é vantajoso para Gauss-Hermite nem Gauss-Laguerre quando necessita-se de valores de n acima de 200 e 365, respectivamente. Uma maneira eficiente de evitar definitivamente o *overflow* nestes casos está descrita em [32] onde os autores calculam os zeros das funções

$$\tilde{H}_n(x) = \frac{e^{-x^2/2}}{\pi^{1/4} 2^{n/2} \sqrt{n!}} H_n(x) \quad \text{e} \quad \tilde{L}_n^{(0)}(x) = e^{-x/2} L_n^{(0)}(x)$$

cujos zeros são os mesmos dos polinômios de Hermite $H_n(x)$ e de Laguerre $L_n^{(0)}(x)$ com a vantagem de que $|\tilde{H}_n(x)| < 1$ e $|\tilde{L}_n^{(0)}(x)| \leq 1$ para $x \geq 0$. O rápido e eficiente algoritmo proposto por eles é baseado numa combinação da transformação de Prüfer com a série de Taylor para solução da equação diferencial ordinária de segunda ordem que tais polinômios satisfazem.

4.2.2 Outros métodos iterativos

Cabe aqui ressaltar outros métodos iterativos para cálculo dos pontos e dos pesos de Gauss-Gegenbauer que tem sido desenvolvidos. Nesta subseção também iremos reforçar a preferência pelo método de Newton-Raphson.

Davis e Rabinowitz [17] apresentam um refinamento do método de Newton-Raphson que pode ser usado convenientemente para os zeros de Legendre. O método usa a iteração:

$$x^{[i+1]} = x^{[i]} - \frac{P_n(x^{[i]})}{P_n'(x^{[i]})} \left(1 + \frac{P_n(x^{[i]}) P_n''(x^{[i]})}{P_n'(x^{[i]}) 2P_n'(x^{[i]})} \right), \quad i = 0, 1, \dots$$

e possui convergência cúbica. Tais iterações constituem o método de Halley para os zeros de Legendre. Para aproximação inicial eles utilizam a fórmula assintótica

$$x_{n,k} = \left(1 - \frac{1}{8n^2} + \frac{1}{8n^3} \right) \cos \frac{4k-1}{4n+2} \pi + \mathcal{O}(n^{-4}). \quad (4.10)$$

Petras [43] demonstrou que com a aproximação inicial (4.9), por exemplo, o método de Halley será convergente para os zeros positivos de Legendre. Davis e Rabinowitz também

apontam que é possível refinar cada vez mais o método iterativo de Newton-Raphson e obter convergência cada vez maior.

Lether [40] apresenta um método iterativo de 5ª ordem que gasta apenas uma iteração para encontrar os zeros de Legendre. O trabalho também apresenta aproximações assintóticas mais precisas do que (4.10). Tal método iterativo de 5ª ordem foi generalizado por Gatteschi [27] para os polinômios de Gegenbauer e o autor também apresenta aproximações iniciais assintóticas para tais polinômios.

Swarztrauber [47] apresenta o método de Fourier-Newton que consiste no método de Newton-Raphson para calcular os zeros dos polinômios trigonométricos de Legendre. A vantagem neste caso é que os zeros dos polinômios trigonométricos (ver Figura 3.3) estão melhor distribuídos ao longo do intervalo $(0, \pi)$ do que os zeros dos polinômios de Legendre estão distribuídos em $(-1, 1)$. Os zeros em x tendem a se concentrar nos extremos ± 1 . Consequentemente para algum $n = n_{max}$ tais zeros se misturam dentro da precisão da máquina causando uma falha computacional, enquanto que o método de Fourier-Newton calcula os zeros até $n = n_{max}^2$. Apesar disto não ter sido um problema no passado, hoje em dia as resoluções dos modelos climáticos e de previsão do tempo demandam $n > 1000$. O método de Fourier-Newton poderia ser estendido para a quadratura de Gauss-Gegenbauer. Porém a demonstração da convergência do método de Fourier-Newton pode ser mais complicada porque encontrar a localização dos zeros de $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$ não é uma tarefa trivial. Explicaremos este fato na Seção 5.2.

Creemos que o estado da arte de um algoritmo para cálculo dos pontos e pesos para as quadraturas de Gauss-Legendre e Gauss-Jacobi encontra-se em Hale e Townsend [34]. Em tal trabalho é apresentado um rápido e eficiente algoritmo que também baseia-se no método de Fourier-Newton. A sutileza de tal trabalho está, em suma, na escolha de fórmulas assintóticas tanto para as aproximações iniciais quanto para as avaliações dos polinômios e de suas derivadas. Contudo este algoritmo é usual apenas quando $n \geq 100$ devido ao uso das fórmulas assintóticas. Este é o algoritmo mais eficiente da atualidade dentro do nosso conhecimento. Entretanto, como no caso anterior, a dúvida sobre a convergência persiste.

Yakimiw [53] apresenta um método iterativo de 5ª ordem para encontrar zeros de função baseado no resultado de Lether [40]. Além disto, Yakimiw [53] obtém novas fórmulas para os pesos da quadratura de Gauss-Legendre que são menos sensíveis às perturbações dos zeros (ilustraremos este caso na Subseção 4.3.2). Contudo a convergência para os zeros também é contestável. Uma boa sugestão seria utilizar o método de Newton (com a convergência garantida) para o cálculo dos zeros e, em seguida, utilizar as tais novas fórmulas para os pesos. Em [53] estão explícitas as fórmulas para os pesos de Gauss-Lobatto, Gauss-

Radau, Gauss-Hermite e Gauss-Laguerre, além de Gauss-Legendre. Em nossos futuros trabalhos pretendemos obter as tais fórmulas para Gauss-Gegenbauer. Decidimos não utilizar as fórmulas de [53] no presente trabalho em virtude da maior difusão das fórmulas da Tabela 3.1, veja [17, 35, 36, 38, 44, 46].

Concluindo, apesar da existência de outros métodos iterativos que são velozes e robustos para o cálculo dos zeros dos polinômios de Gegenbauer, eles também dependem de aproximações iniciais suficientemente boas. Desta maneira, assim como no método de Newton-Raphson, as convergências de tais métodos são contestáveis. A nossa propensão para a prova da convergência do método de Newton-Raphson está fundamentada em três fatos. Em primeiro lugar, existem condições usuais que garantem a sua convergência. Em segundo, há importantes referências que o recomendam. E, em terceiro lugar, os polinômios de Gegenbauer dispõem de fórmulas que viabilizam a implementação deste método. Já a preferência pelas fórmulas para os pesos da Tabela 3.1 é devida à maior propagação das mesmas na literatura e devida à facilidade dos seus cálculos quando associadas ao método de Newton-Raphson.

Para finalizar esta subseção, vale destacar o recente e admirável trabalho de Bogaert [9] que apresenta fórmulas assintóticas para o cálculo direto dos pontos e pesos para a quadratura de Gauss-Legendre sem fazer uso de nenhuma iteração! Segundo alguns experimentos realizados por Townsend [50], além deste método ser extremamente rápido, ele pode fornecer os pontos e pesos com exatidão de 16 dígitos para $n \geq 20$.

4.2.3 Aproximação inicial

Vamos agora discutir o caso da aproximação inicial para Gauss-Gegenbauer no caso principal $0 < \lambda < 1$ com mais detalhes. Denotaremos por $x_{n,k}^{(\lambda)}$ o k -ésimo zero em ordem decrescente de $P_n^{(\lambda)}$,

$$1 > x_{n,1}^{(\lambda)} > x_{n,2}^{(\lambda)} > \dots > x_{n,n}^{(\lambda)} > -1.$$

Assim, os zeros dos polinômios trigonométricos de Gegenbauer $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$ serão

$$\theta_{n,1}^{(\lambda)} = \arccos x_{n,1}^{(\lambda)}, \theta_{n,2}^{(\lambda)} = \arccos x_{n,2}^{(\lambda)}, \dots, \theta_{n,n}^{(\lambda)} = \arccos x_{n,n}^{(\lambda)},$$

organizados em ordem crescente,

$$0 < \theta_{n,1}^{(\lambda)} < \theta_{n,2}^{(\lambda)} < \dots < \theta_{n,n}^{(\lambda)} < \pi.$$

Exibimos na Subseção 4.2.1 algumas aproximações iniciais para zeros dos polinômios de Legendre ($\lambda = 1/2$) que já foram utilizadas no método de Newton-Raphson. Dentre tais

aproximações (e dentre as demais que conhecemos na literatura), aquela que julgamos ser mais usual para a finalidade deste trabalho é (4.9) porque ela é válida para todo $k = 1, \dots, n$ e não depende de zeros de outras funções. Agora notemos as desigualdades dadas por Szegő [49, p. 138-140] para os zeros $\theta_{n,k}^{(\lambda)} \in (0, \pi/2)$ de $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$ no caso principal $0 < \lambda < 1$,

$$\frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi < \theta_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{k + \lambda - 1/2}{n + 2\lambda} \pi, \quad \text{para } 0 < \lambda < \frac{1}{2}, \quad (4.11)$$

$$\frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi < \theta_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{k}{n + 1} \pi, \quad \text{para } \frac{1}{2} \leq \lambda < 1,$$

para $k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$. As desigualdades contendo $\theta_{n,k}^{(\lambda)}$ ficam invertidas para $\theta_{n,k}^{(\lambda)} \in (\pi/2, \pi)$, isto é,

$$\frac{k + \lambda - 1/2}{n + 2\lambda} \pi < \theta_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad \text{para } 0 < \lambda < \frac{1}{2}, \quad (4.12)$$

$$\frac{k}{n + 1} \pi < \theta_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad \text{para } \frac{1}{2} \leq \lambda < 1,$$

para $k = \lfloor (n+1)/2 \rfloor + 1, \dots, n$. Vê-se claramente que a aproximação inicial (4.9) é o cosseno do limite inferior das desigualdades (4.11) (e o cosseno do limite superior de (4.12)) com $\lambda = 1/2$. Por isto, julgamos que

$$x_{n,k}^{(\lambda)} \approx \cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (4.13)$$

deveria ser uma boa aproximação no método de Newton-Raphson para os zeros de $P_n^{(\lambda)}$ no caso $0 < \lambda < 1$. Sobretudo nos tornamos mais convictos desta aproximação ao saber que Petras [43] já demonstrou que tal aproximação inicial garante a convergência do método de Newton-Raphson para os zeros de Legendre ($\lambda = 1/2$).

Neste momento levantamos a pergunta que motiva nosso trabalho: quais devem ser as aproximações iniciais para que o método de Newton-Raphson seja convergente para os zeros dos polinômios ultrasféricos no caso principal $0 < \lambda < 1$? Já está demonstrado que a convergência fica garantida quando $\lambda = 1/2$ ao utilizar a aproximação (4.13). No entanto, a pergunta fica em aberto para os demais valores de λ e iremos buscar uma resposta no próximo capítulo que trata de discutir a convergência.

4.3 Comparação dos métodos

Nesta seção iremos comparar os métodos de Newton-Raphson e do autossistema para o cálculo dos pontos e dos pesos da quadratura de Gauss-Gegenbauer quando $0 < \lambda < 1$.

O método do autossistema calculará os pontos e os pesos pela sub-rotina `SGAUSQ` na linguagem FORTRAN com precisão dupla (8 bytes). Tal sub-rotina utiliza o algoritmo de Golub e Welsch [33] e foi adaptada para o caso de Gauss-Gegenbauer³.

O método de Newton-Raphson calculará os pontos e pesos por meio de uma sub-rotina criada por nós na linguagem FORTRAN que também utilizará precisão dupla. Tal método usará (4.13) como aproximação inicial para os zeros. Mais adiante vamos detalhar o algoritmo utilizado neste método.

Para aferir a exatidão utilizaremos a seguinte medição para o erro

$$\varepsilon\{V\} = \max_{1 \leq k \leq n} \left| \frac{v_k - v_k^{exato}}{v_k^{exato}} \right|, \quad v_k^{exato} \neq 0, \quad (4.14)$$

de um vetor $V = (v_1, \dots, v_n)$. Calcularemos $\varepsilon\{X\}$ e $\varepsilon\{W\}$ sendo X e W os vetores que contém os pontos e os pesos para um dado n , respectivamente⁴. O valor exato v_k^{exato} será considerado aquele obtido pelo método do autossistema por meio da sub-rotina `SGAUSQ` com precisão estendida (16 bytes) e truncado para 16 dígitos.

4.3.1 Melhor algoritmo para Newton-Raphson

Agora iremos discutir sobre o algoritmo que será utilizado no método de Newton-Raphson. Como trabalharemos com precisão dupla para este método, iremos usar *tolerância* = 10^{-15} e máximo de 10 iterações (ver Algoritmo 1). Temos 3 possibilidades para o polinômio que podem ser utilizadas no Algoritmo 1: ortogonais, mônicos ou ortonormais. Tal método necessita da avaliação do polinômio e de sua derivada. Para avaliar o polinômio podemos proceder de dois modos distintos: usando a relação de recorrência ou por meio do conhecido método de Horner, ver [35]. Porém ao optarmos por usar a relação de recorrência, podemos também calcular os coeficientes de tal fórmula separadamente. A avaliação da derivada é obtida por consequência. Resumindo, temos 3 tipos de algoritmos para o método de Newton-Raphson:

tipo I Utiliza relação de recorrência de três termos;

tipo II Utiliza relação de recorrência de três termos com os coeficientes da relação pré-calculados;

³Acrescentamos em `SGAUSQ` os parâmetros de entrada `kind = 7` (opção para a quadratura de Gauss-Gegenbauer) e `lambda` (parâmetro desta quadratura) para a sub-rotina calcular os elementos da respectiva matriz de Jacobi.

⁴Quando n for ímpar $v_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor}^{exato}$ será nulo no vetor X , então utilizaremos $1 \leq k \leq n$ com $k \neq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$.

tipo III Calcula os coeficientes do polinômio por meio de sua representação explícita ((3.1), (3.5) ou (3.6)) e avalia pelo método de Horner.

Cada um dos 3 tipos acima pode ser utilizado com cada um dos 3 polinômios (ortogonais, mônicos ou ortonormais). Portanto, ao todo, temos 9 algoritmos (Algoritmos 2 a 10 no Apêndice A). Eles utilizam a aproximação inicial (4.13) e a 3ª fórmula para o peso (ver Tabela 3.1). Escolhemos tal fórmula para os pesos porque, no geral, ela apresenta menor custo computacional com relação às constantes que aparecem nela e depende apenas de dados previamente calculados pelo método de Newton-Raphson: o zero x_i e o valor da derivada em x_i . Para realizar os testes comparativos, criamos as respectivas 9 sub-rotinas na linguagem FORTRAN que implementam os tais 9 algoritmos com precisão dupla.

Primeiramente discutiremos o tipo III. Um algoritmo do tipo III (Apêndice A.3) não se mostra eficiente com nenhum dos 3 polinômios porque os coeficientes de tais polinômios oscilam entre valores muito grandes e muito pequenos. Isto leva a um erro de arredondamento desastroso na avaliação pelo método de Horner para $n > 20$ com vários valores de λ . Portanto, descartamos o tipo III para todos 3 polinômios.

Agora discutiremos os tipos I e II. Tais algoritmos com os polinômios mônicos (Algoritmos 3 e 6) apresentam NaN⁵ na fórmula para os pesos quando $n > 1000$ com vários valores de λ . Por este motivo os polinômios mônicos ficam totalmente descartados. Restam-nos os tipos I e II com os polinômios ortogonais e ortonormais. As Tabelas 4.1 e 4.2 exibem o valor de

$$\text{tempo relativo} = \frac{\text{tempo do tipo II, em segundos}}{\text{tempo do tipo I, em segundos}}$$

para diversos valores de n e λ com os polinômios ortogonais e ortonormais, respectivamente.

Como era de se esperar, o tipo II é mais rápido do que o tipo I, pois evita o recálculo dos coeficientes da relação de recorrência. Notamos também que o tempo relativo para os polinômios ortonormais é menor em relação ao tempo relativo dos polinômios ortogonais à medida que n cresce. Isto se deve ao fato de que os termos da relação de recorrência dos polinômios ortonormais possuem uma complexidade maior do que os termos da mesma relação para os polinômios ortogonais (ver Algoritmos 2, 4, 5 e 7). Nós comparamos também os resultados dos valores dos pontos e dos pesos fornecidos pelos tipos I e II com os ortogonais (Algoritmos 2 e 5) e ortonormais (Algoritmos 4 e 7). Constatamos que os Algoritmos 4 e 7 fornecem resultados idênticos. Já os resultados dos Algoritmos 2 e 5 não apresentaram diferenças significativas.

⁵Not-a-Number, resultado de operação indefinida como $\frac{0}{0}$ ou $\frac{\infty}{\infty}$.

n	$\lambda = 0,1$	$\lambda = 0,5$	$\lambda = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$	$\lambda = 0,8$
8	0,97	0,98	1,00	1,03
13	0,92	0,87	0,96	0,75
21	0,57	0,56	0,36	0,52
34	0,36	0,42	0,43	0,42
55	0,38	0,38	0,38	0,38
89	0,36	0,36	0,36	0,46
144	0,34	0,35	0,34	0,35
233	0,22	0,34	0,38	0,34
377	0,39	0,43	0,52	0,70
610	0,58	0,42	0,50	0,47
987	0,33	0,37	0,36	0,38
1597	0,33	0,33	0,32	0,32
2584	0,33	0,33	0,33	0,33
4181	0,33	0,32	0,33	0,32
6765	0,32	0,32	0,32	0,32
10946	0,33	0,33	0,33	0,32

Tabela 4.1: Razão entre os tempos dos tipos I e II com polinômios ortogonais.

n	$\lambda = 0,1$	$\lambda = 0,5$	$\lambda = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$	$\lambda = 0,8$
8	0,81	0,77	0,75	0,79
13	0,22	0,36	0,33	0,36
21	0,21	0,20	0,21	0,19
34	0,15	0,14	0,14	0,15
55	0,13	0,13	0,13	0,13
89	0,12	0,12	0,11	0,11
144	0,11	0,28	0,17	0,11
233	0,25	0,28	0,17	0,26
377	0,11	0,24	0,17	0,27
610	0,10	0,17	0,12	0,10
987	0,10	0,10	0,11	0,10
1597	0,10	0,10	0,10	0,10
2584	0,10	0,10	0,10	0,10
4181	0,10	0,10	0,10	0,10
6765	0,10	0,10	0,10	0,10
10946	0,10	0,10	0,10	0,10

Tabela 4.2: Razão entre os tempos dos tipos I e II com polinômios ortonormais.

Logo, concluímos que, em termos de exatidão, os tipos I e II são iguais. Contudo, tendo em vista que o tipo II é mais rápido, sempre preferimos o tipo II ao tipo I.

Agora precisamos decidir se devemos utilizar os ortogonais ou os ortonormais no tipo II, isto é, devemos decidir entre os Algoritmos 5 e 7. Iremos comparar a exatidão e a velocidade de ambos. Primeiramente, vejamos as exatidões destes algoritmos. A Figura 4.1 exibe os gráficos de $\log_{10} \varepsilon\{X\}$ e de $\log_{10} \varepsilon\{W\}$ em função de $\log_{10} n$ com $\lambda = 0,5$ para $n = 8, 13, 21, \dots, 10946$ segundo a sequência de Fibonacci.

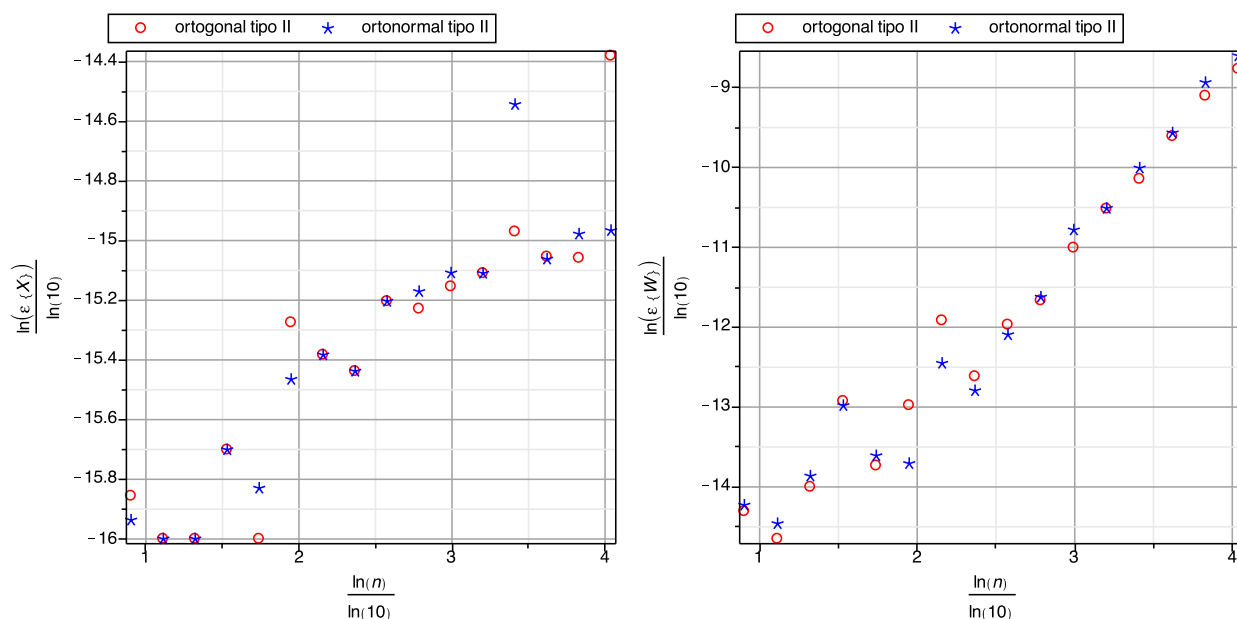


Figura 4.1: $\log_{10} \varepsilon\{X\}$ e $\log_{10} \varepsilon\{W\}$ do tipo II com $\lambda = 0,5$.

Os resultados na Figura 4.1 revelam que, em geral, as exatidões dos Algoritmos 5 e 7 são praticamente iguais. Ressaltamos que os demais valores de $\lambda = 0,1, \frac{\sqrt{5}-1}{2}$ e $0,8$ apresentaram resultados muito similares aos da Figura 4.1.

Vejamos o tempo gasto pelos Algoritmos 5 e 7. A Tabela 4.3 exibe o tempo, em segundos, gasto por eles com $\lambda = 0,5$ e $n = 8, 13, 21, \dots, 10946$ segundo a sequência de Fibonacci.

Percebemos que a Tabela 4.3 mostra que ambos são muito rápidos e de velocidades quase equivalentes. Novamente os demais valores de λ apresentaram resultados muito parecidos. Deste modo, concluímos que é indiferente utilizar o tipo II com os ortogonais ou ortonormais (Algoritmos 5 ou 7) porque eles possuem praticamente a mesma exatidão e a mesma velocidade.

n	ortogonal	ortonormal
8	0,00006	0,00005
13	0,00002	0,00003
21	0,00003	0,00003
34	0,00005	0,00005
55	0,00010	0,00011
89	0,00023	0,00025
144	0,00057	0,00060
233	0,00143	0,00148
377	0,00220	0,00324
610	0,00439	0,00603
987	0,00957	0,00873
1597	0,02109	0,02109
2584	0,05031	0,05129
4181	0,11893	0,11918
6765	0,29065	0,29051
10946	0,74298	0,73744

Tabela 4.3: Tempo em segundos gasto pelo tipo II com $\lambda = 0,5$ (Algoritmos 5 e 7).

Portanto, dentre os Algoritmos 2 a 10, elegemos os Algoritmos 5 e 7 como sendo os de maior eficiência.

Para sintetizarmos todas as conclusões obtidas aqui acerca de todos algoritmos de tipos I, II e III com os 3 polinômios, nós mostramos a Tabela 4.4. Nesta tabela o símbolo ✓ representa que o algoritmo não apresentou problemas, enquanto que, o símbolo ✗ representa que o algoritmo apresentou alguma falha. Alguns símbolos vêm acompanhados de uma observação ou justificativa.

\times	tipo I	tipo II	tipo III
ortogonais	✓	✓ mais rápido do que tipo I	✗ $n > 20$: <i>roundoff error</i>
mônicos	✗ $n > 1000$: NaN	✗ $n > 1000$: NaN	✗ $n > 20$: <i>roundoff error</i>
ortonormais	✓	✓ mais rápido do que tipo I	✗ $n > 20$: <i>roundoff error</i>

Tabela 4.4: Eficiência dos algoritmos.

Uma última observação: em todos os testes realizados nesta subseção com os tipos I e II com os polinômios ortogonais e ortonormais (Algoritmos 2, 4, 5 e 7), o método de Newton-Raphson foi interrompido quando $|z - z_1| < \textit{tolerância}$ e com menos de 10 iterações.

4.3.2 Cálculos

Como explicamos na subseção anterior, os Algoritmos 5 e 7 são equivalentes e são os mais eficientes dos apresentados neste trabalho. Sem nenhuma perda, escolheremos o 7 para ser usado no método de Newton-Raphson. Deste modo, estamos prontos para comparar a exatidão e a velocidade dos métodos de Newton-Raphson e do autossistema para o cálculo dos pontos e dos pesos.

Para aferir a exatidão de tais métodos, calculamos $\varepsilon\{X\}$ e $\varepsilon\{W\}$ por (4.14) com os valores de $\lambda = 0,1, 0,5, \frac{\sqrt{5}-1}{2}$ e $0,8$ para $n = 8, 13, 21, \dots, 10946$ segundo a sequência de Fibonacci. Utilizamos a rotina `SGAUSQ` para o autossistema e a sub-rotina criada por nós em FORTRAN com o Algoritmo 7 para Newton-Raphson. Ambos os métodos utilizaram precisão dupla (8 bytes). O valor exato foi considerado aquele fornecido pelo autossistema por meio da rotina `SGAUSQ` com precisão estendida (16 bytes) e truncado para 16 dígitos.

As Figuras 4.2 a 4.5 exibem os gráficos de $\log_{10} \varepsilon\{X\}$ e de $\log_{10} \varepsilon\{W\}$ em função de $\log_{10} n$ com $\lambda = 0,1, 0,5, \frac{\sqrt{5}-1}{2}$ e $0,8$.

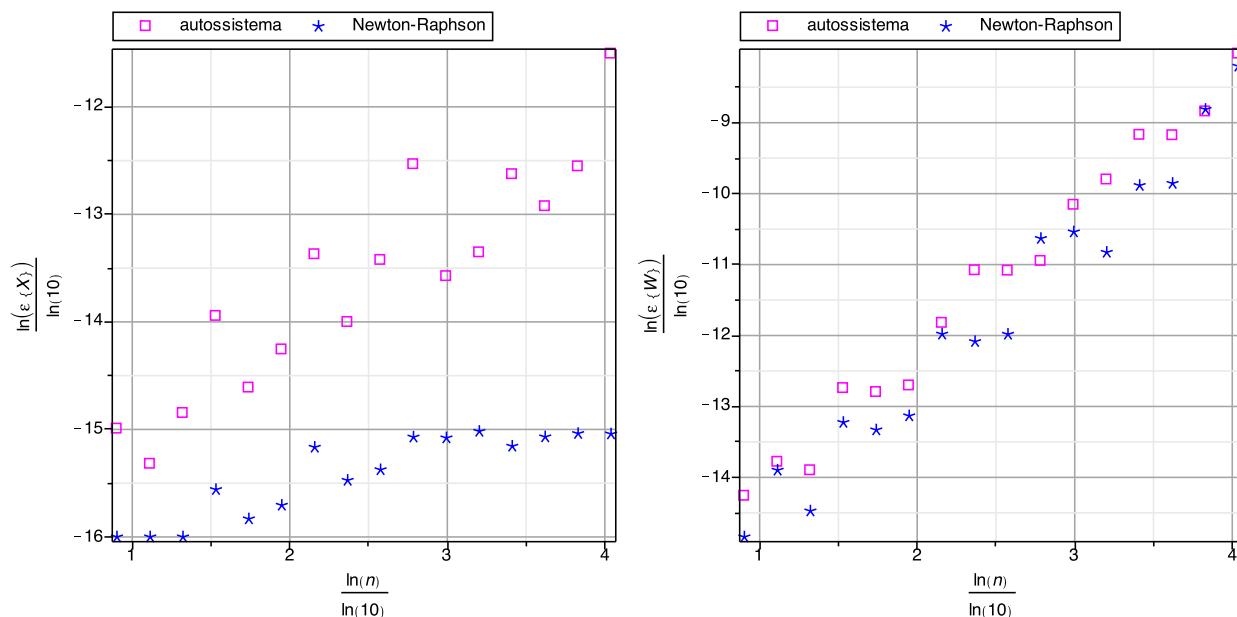


Figura 4.2: $\log_{10} \varepsilon\{X\}$ e $\log_{10} \varepsilon\{W\}$ com $\lambda = 0,1$.

É notável que o método de Newton-Raphson fornece maior exatidão para os pontos e para os pesos, especialmente para os pontos. Entretanto a diferença não é tão grande assim para os pesos. Além disto, nota-se que $\varepsilon\{W\}$ tende a crescer em ambos os métodos à medida que n aumenta. Cremos que tal crescimento em Newton-Raphson se deve à fórmula de $W_{n,i}$ utili-

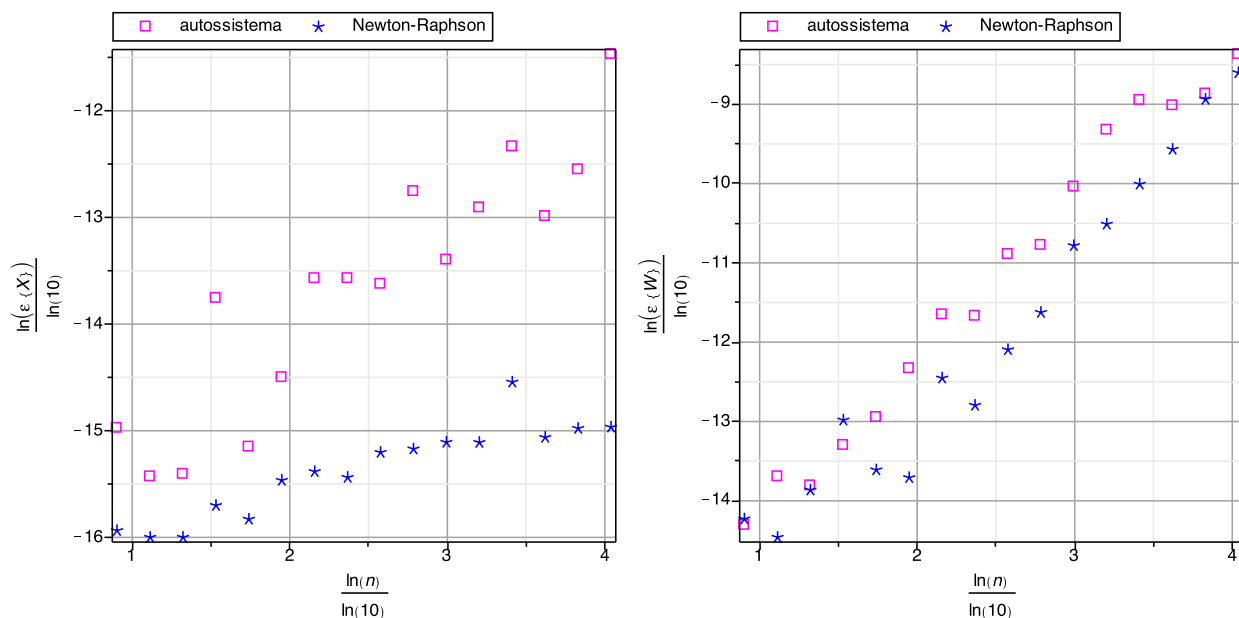


Figura 4.3: $\log_{10} \epsilon\{X\}$ e $\log_{10} \epsilon\{W\}$ com $\lambda = 0,5$.

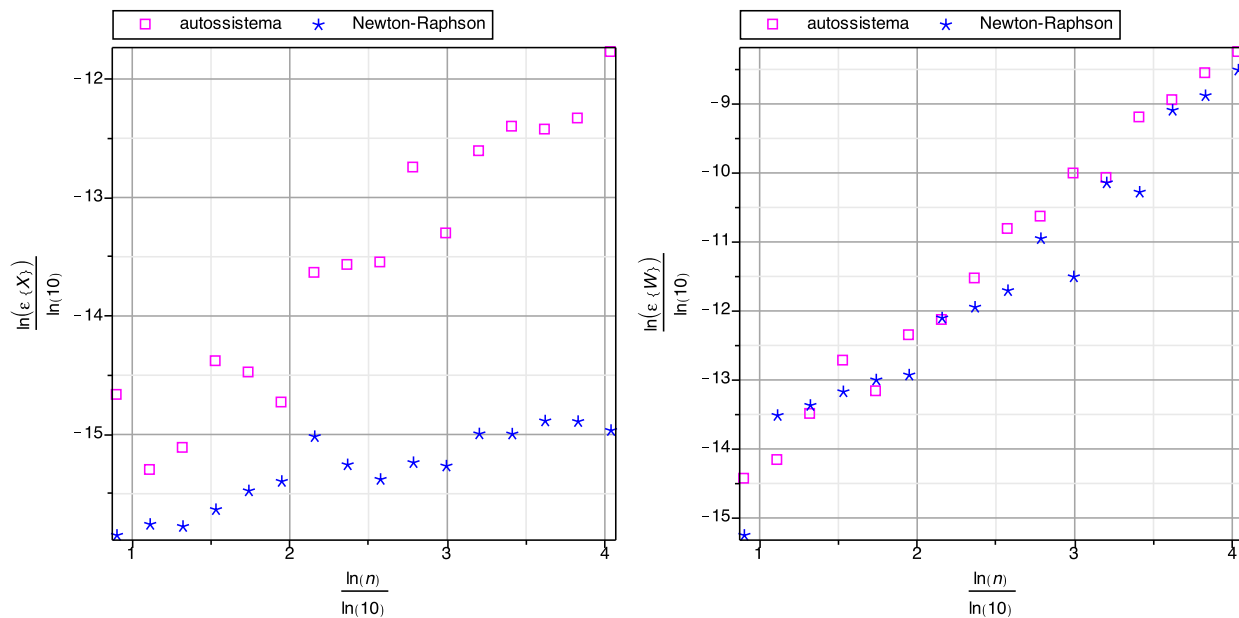


Figura 4.4: $\log_{10} \epsilon\{X\}$ e $\log_{10} \epsilon\{W\}$ com $\lambda = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$.

zada e também ao modo de avaliar a derivada. Yakimiw [53] aponta que algumas expressões algébricas para os pesos exibem uma excessiva sensibilidade à pequenas perturbações sobre

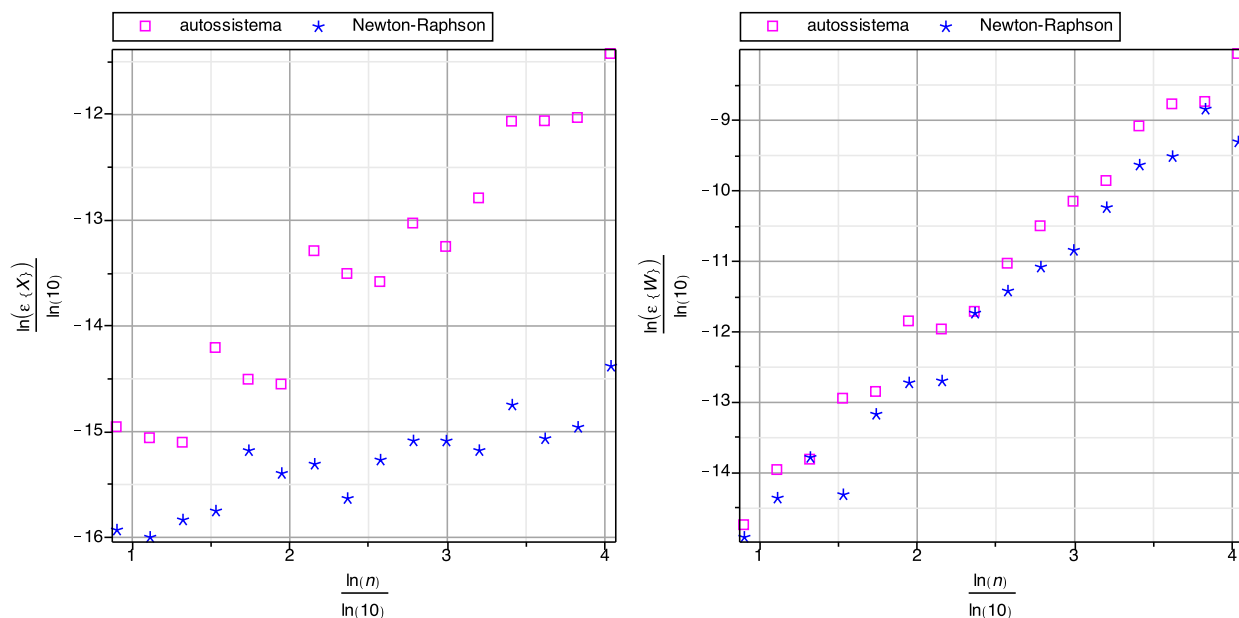


Figura 4.5: $\log_{10} \varepsilon\{X\}$ e $\log_{10} \varepsilon\{W\}$ com $\lambda = 0,8$.

os zeros e tal sensibilidade cresce junto a n . Para ilustrar este fato, tomamos a função W definida por $W: x \rightarrow W_{n,i} \Big|_{x_i=x}$, contanto que $W_{n,i} \Big|_{x_i=x}$ exista em cada x . Assim, $W(x_i) = W_{n,i}$. Exibimos a Figura 4.6 que mostra os gráficos das funções W ao tomarmos cada uma das 4 fórmulas de $W_{n,i}$ constantes na Tabela 3.1 (o tipo do polinômio é indiferente para o gráfico de W) para $n = 6$ e $\lambda = \frac{3}{10}$. Os zeros positivos estão marcados por linhas verticais tracejadas. As linhas verticais coloridas representam assíntotas das respectivas fórmulas.

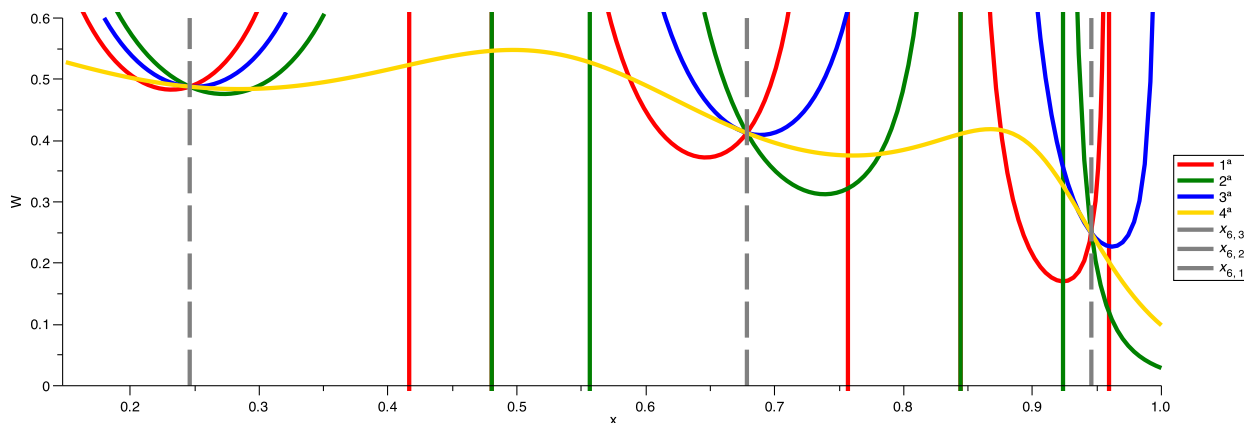


Figura 4.6: Gráficos de W com as 4 fórmulas de $W_{n,i}$ para $n = 6$ e $\lambda = \frac{3}{10}$.

Pelo gráfico, nota-se a sensibilidade do valor dos pesos mediante qualquer perturbação sobre os zeros, em especial do maior zero. Ao contrário do que gostaríamos, a fórmula que parece ser menos sensível é a 4ª. Contudo a 3ª fórmula (a qual usamos nos algoritmos) parece ser menos sensível do que a 1ª e a 2ª. Como já mencionado na Subseção 4.2.2, Yakimiy [53] apresenta uma nova fórmula para os pesos $W_{n,i}$ cujo gráfico de W é horizontal na vizinhança de cada zero. Logo pequenas perturbações sobre os zeros não afetam o cálculo dos pesos. Veja os gráficos de W com a fórmula de Yakimiy e com a 3ª fórmula para $n = 8$ e $\lambda = 1/2$ na Figura 4.7.

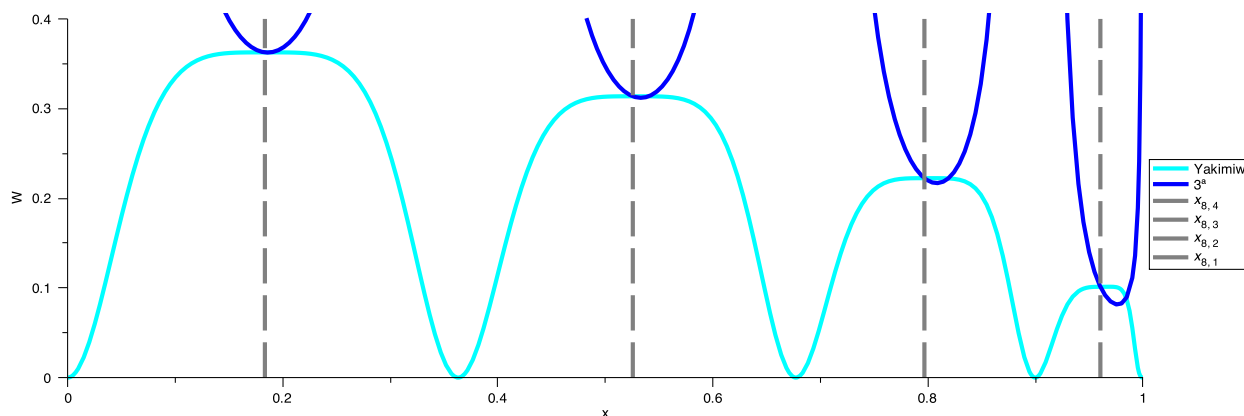


Figura 4.7: Gráficos de W com a fórmula de Yakimiy e com a 3ª de $W_{n,i}$ para $n = 8$ e $\lambda = \frac{1}{2}$.

As fórmulas para os pesos descritas em [53] podem ser empregadas em todas quadraturas de Gauss clássicas. Em [53] estão explícitas as fórmulas para os pesos de Gauss-Legendre, Gauss-Lobatto, Gauss-Radau, Gauss-Hermite e Gauss-Laguerre. Em nossos futuros trabalhos pretendemos obter as fórmulas dos pesos de Gauss-Gegenbauer. Novamente ressaltamos que não as utilizamos no presente trabalho em virtude da maior difusão das fórmulas da Tabela 3.1 na literatura. Infelizmente, apesar das fórmulas de Yakimiy serem melhores do que as presentes na Tabela 3.1, Swarztrauber [47] aponta que elas também apresentam um erro crescente. Com isto, concluímos que avaliar o polinômio (ou a derivada) por meio da fórmula de recorrência pode ser a origem do erro crescente. Logo, avaliar o polinômio por meio de fórmulas assintóticas como fazem Hale e Townsend [34], por exemplo, pode ser mais vantajoso.

Agora vejamos o tempo relativo entre ambos métodos para cálculo dos pontos e pesos dado por

$$\text{tempo relativo} = \frac{\text{tempo de Newton-Raphson, em segundos}}{\text{tempo do autossistema, em segundos}}$$

para diversos valores de n e λ na Tabela 4.5 com os cálculos dos métodos realizados em aritmética de ponto flutuante com 8 bytes.

n	$\lambda = 0,1$	$\lambda = 0,5$	$\lambda = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$	$\lambda = 0,8$
8	0,86	1,00	0,78	0,72
13	0,40	0,56	0,48	0,53
21	0,30	0,29	0,31	0,28
34	0,22	0,21	0,24	0,22
55	0,19	0,20	0,19	0,20
89	0,18	0,26	0,18	0,18
144	0,19	0,28	0,18	0,21
233	0,23	0,28	0,27	0,49
377	0,20	0,38	0,24	0,49
610	0,17	0,31	0,21	0,17
987	0,15	0,17	0,19	0,17
1597	0,14	0,16	0,16	0,16
2584	0,13	0,15	0,15	0,15
4181	0,13	0,14	0,14	0,14
6765	0,13	0,13	0,13	0,13
10946	0,13	0,13	0,13	0,13

Tabela 4.5: Tempo relativo entre Newton-Raphson e autossistema.

A Tabela 4.5 mostra que o método de Newton-Raphson é muito mais rápido do que o método do autossistema. Além disto, percebemos que, à medida que n cresce, o método de Newton-Raphson fica cada vez mais rápido em relação ao autossistema.

Como já dissemos, uma das grandes vantagens do método de Newton-Raphson está fundamentada na simetria dos zeros e na igualdade dos respectivos pesos. Deste modo, somente os zeros não negativos são calculados e os respectivos pesos ficam obtidos por consequência. Já o método do autossistema não usufrui desta vantagem, pois ele sempre calcula todos os zeros e todos os pesos.

Finalizamos esta seção concluindo que o método de Newton-Raphson (com Algoritmo 5 ou 7) é mais preciso e mais rápido do que o método do autossistema para os pontos e pesos da quadratura de Gauss-Gegenbauer para $\lambda = 0,1, 0,5, \frac{\sqrt{5}-1}{2}$ e $0,8$.

Capítulo 5

Análise da convergência de Newton-Raphson

Neste capítulo apresentaremos o nosso teorema que apresenta as aproximações iniciais para garantir a convergência do método de Newton-Raphson para os zeros positivos do polinômio ultrasférico no caso principal. Apresentaremos também quatro lemas para demonstrar tal teorema na Seção 5.2. Por consequência, obtemos outros resultados que são apresentados na Seção 5.3.

5.1 Preliminares

Sejam $x_{n,k}^{(\lambda)}$, $k = 1, 2, \dots, n$, os zeros do polinômio ultrasférico $P_n^{(\lambda)}$ organizados em ordem decrescente,

$$1 > x_{n,1}^{(\lambda)} > x_{n,2}^{(\lambda)} > \dots > x_{n,n}^{(\lambda)} > -1.$$

Logo os zeros do polinômio trigonométrico $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$ serão

$$\theta_{n,1}^{(\lambda)} = \arccos x_{n,1}^{(\lambda)}, \theta_{n,2}^{(\lambda)} = \arccos x_{n,2}^{(\lambda)}, \dots, \theta_{n,n}^{(\lambda)} = \arccos x_{n,n}^{(\lambda)},$$

organizados em ordem crescente,

$$0 < \theta_{n,1}^{(\lambda)} < \theta_{n,2}^{(\lambda)} < \dots < \theta_{n,n}^{(\lambda)} < \pi.$$

Em todo este capítulo, a menos que seja dito o contrário, estaremos no caso principal $0 < \lambda < 1$. Nosso objetivo é mostrar que, para cada $n \geq 2$, as condições do Teorema 4.1 são satisfeitas para os zeros positivos do polinômio ultrasférico quando se usa a aproximação

inicial dada em (4.13). Relembrando, esta aproximação é o cosseno do limite inferior das desigualdades (4.11) dadas por Szegö [49, p. 138-140] para $\theta_{n,k}^{(\lambda)} \in (0, \pi/2)$, a saber,

$$\frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi < \theta_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{k + \lambda - 1/2}{n + 2\lambda} \pi, \quad \text{se } 0 < \lambda < \frac{1}{2},$$

$$\frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi < \theta_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{k}{n + 1} \pi, \quad \text{se } \frac{1}{2} \leq \lambda < 1,$$
(5.1)

para $k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$. Usando que $n \geq 2$, sob as condições das desigualdades acima e pelo fato de um polinômio ser de classe C^∞ , deveremos provar que $P_n^{(\lambda)'} e P_n^{(\lambda)''}$ preservam o sinal em cada um dos intervalos

$$\left[\cos \frac{k + \lambda - 1/2}{n + 2\lambda} \pi, \cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi \right], \quad \text{se } 0 < \lambda < \frac{1}{2},$$

$$\left[\cos \frac{k}{n + 1} \pi, \cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi \right], \quad \text{se } \frac{1}{2} \leq \lambda < 1,$$
(5.2)

que contêm $x_{n,k}^{(\lambda)}$ para $k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$. Depois deveremos provar que

$$P_n^{(\lambda)} \left(x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right) P_n^{(\lambda)''} \left(x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right) > 0$$

para

$$x_{n,k}^{(\lambda)[0]} = \cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor.$$

Utilizaremos ao longo das demonstrações a seguir que o coeficiente líder do polinômio ultrasférico é positivo (3.2) e também que tais polinômios são funções pares ou ímpares (Teorema 2.8).

5.2 Teorema

Nesta seção será apresentado o nosso teorema. Para a demonstração serão necessários alguns lemas.

Lema 5.1. *Se $n = 2$, então $P_2^{(\lambda)'} e P_2^{(\lambda)''}$ preservam o sinal em cada um dos intervalos (5.2)*

e

$$P_2^{(\lambda)} \left(x_{2,1}^{(\lambda)[0]} \right) P_2^{(\lambda)''} \left(x_{2,1}^{(\lambda)[0]} \right) > 0.$$

Demonstração. Se $n = 2$ então $P_2^{(\lambda)}$ possuirá somente um zero positivo $x_{2,1}^{(\lambda)}$. Logo, como o coeficiente líder do polinômio ultrasférico é positivo e, usando que tais polinômios são funções pares ou ímpares, então $P_2^{(\lambda)'} e P_2^{(\lambda)''}$ são ambos positivos para todo $x > 0$. Além disto, $P_2^{(\lambda)}(x_{2,1}^{(\lambda)[0]}) P_2^{(\lambda)''}(x_{2,1}^{(\lambda)[0]}) > 0$ porque $x_{2,1}^{(\lambda)[0]} > x_{2,1}^{(\lambda)}$. \square

Assim as condições para convergência estão garantidas no caso $n = 2$. O caso $n = 3$ será tratado logo após o lema a seguir.

Lema 5.2. *Para cada $n \geq 4$, a primeira derivada $P_n^{(\lambda)'}$ preserva o sinal em cada um dos intervalos (5.2).*

Demonstração. Encontramos a seguinte fórmula dada por Szegö [49, p. 81 eq. (4.7.14)],

$$\frac{d}{dx} P_n^{(\lambda)}(x) = 2\lambda P_{n-1}^{(\lambda+1)}(x). \quad (5.3)$$

A igualdade acima implica que os zeros de $P_n^{(\lambda)'}$ são os $n - 1$ zeros de $P_{n-1}^{(\lambda+1)}$. Deste modo,

$$x_{n,k+1}^{(\lambda)} < x_{n-1,k}^{(\lambda+1)} < x_{n,k}^{(\lambda)}, \quad k = 1, 2, \dots, n - 1,$$

isto é,

$$\theta_{n,k}^{(\lambda)} < \theta_{n-1,k}^{(\lambda+1)} < \theta_{n,k+1}^{(\lambda)}, \quad k = 1, 2, \dots, n - 1. \quad (5.4)$$

Pelo resultado apontado por Laforgia [39, p. 216 des. (9')] temos as seguintes desigualdades para os zeros $\theta_{n-1,k}^{(\lambda+1)} \in (0, \pi/2)$ de $\mathcal{P}_{n-1}^{(\lambda+1)}$ quando $0 < \lambda < 1$, a saber

$$\frac{j_{\lambda+\frac{1}{2},k}}{\sqrt{(n+\lambda)^2 - \frac{1}{3}\lambda(\lambda+1)}} < \theta_{n-1,k}^{(\lambda+1)} < \frac{j_{\lambda+\frac{1}{2},k}}{\sqrt{(n+\lambda)^2 - \left(1 - \frac{4}{\pi^2}\right)\lambda(\lambda+1)}}, \quad (5.5)$$

$k = 1, 2, \dots, \lfloor (n-1)/2 \rfloor$, sendo $j_{v,k}$ o k -ésimo zero positivo da função de Bessel de primeira espécie $J_v(x)$ com $v > 0$.

Ao observar as desigualdades (5.4) notamos que para demonstrar este lema basta mostrar que:

- (i) $\theta_{n-1,k}^{(\lambda+1)}$ é maior do que o limite superior de $\theta_{n,k}^{(\lambda)}$ em (5.1), $k = 1, 2, \dots, \lfloor (n-1)/2 \rfloor$;
- (ii) $\theta_{n-1,k}^{(\lambda+1)}$ é menor do que o limite inferior de $\theta_{n,k+1}^{(\lambda)}$ em (5.1), $k = 1, 2, \dots, \lfloor (n-2)/2 \rfloor$.

Conforme cita Elbert [21, p. 68 des. (1.6)] temos que

$$j_{v,k} > k\pi, \quad \text{para } v > \frac{1}{2}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.6)$$

Logo, para $0 < \lambda < \frac{1}{2}$,

$$\frac{k + \lambda - 1/2}{n + 2\lambda} \pi < \frac{k}{n + 2\lambda} \pi < \frac{j_{\lambda+\frac{1}{2},k}}{\sqrt{(n+2\lambda)^2}} < \frac{j_{\lambda+\frac{1}{2},k}}{\sqrt{(n+\lambda)^2}} < \frac{j_{\lambda+\frac{1}{2},k}}{\sqrt{(n+\lambda)^2 - \frac{1}{3}\lambda(\lambda+1)}}, \quad (5.7)$$

e, para $\frac{1}{2} \leq \lambda < 1$,

$$\frac{k}{n+1} \pi < \frac{j_{\lambda+\frac{1}{2},k}}{\sqrt{(n+1)^2}} < \frac{j_{\lambda+\frac{1}{2},k}}{\sqrt{(n+\lambda)^2}} < \frac{j_{\lambda+\frac{1}{2},k}}{\sqrt{(n+\lambda)^2 - \frac{1}{3}\lambda(\lambda+1)}}. \quad (5.8)$$

Portanto (i) está demonstrado. Agora mostraremos (ii). Usaremos a propriedade da simetria dos zeros contidos em $(0, \pi)$ dos polinômios trigonométricos com relação a $\pi/2$. Também utilizaremos que as desigualdades (5.1) ficam invertidas em $(\pi/2, \pi)$, isto é,

$$\frac{k + \lambda - 1/2}{n + 2\lambda} \pi < \theta_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad \text{se } 0 < \lambda < \frac{1}{2},$$

$$\frac{k}{n+1} \pi < \theta_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad \text{se } \frac{1}{2} \leq \lambda < 1,$$

para $k = [(n+1)/2] + 1, \dots, n$. Desta maneira, iremos observar o que ocorre no intervalo $(\pi/2, \pi)$ para mostrar o que desejamos. Em outras palavras, mostraremos que sobre o intervalo $(\pi/2, \pi)$ o limite superior de $\theta_{n,n-k}^{(\lambda)}$ é menor do que $\theta_{n-1,n-k}^{(\lambda+1)}$ para $k = 1, 2, \dots, [n/2] - 1$. Lembrando que Laforgia [39] observa que o limite inferior em (5.5) é válido para todo $\theta_{n-1,k}^{(\lambda+1)} \in (0, \pi)$, isto é, para $k = 1, 2, \dots, n-1$ teremos com o resultado em (5.6) que, para $0 < \lambda < 1$,

$$\frac{n - k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi < \frac{n - k}{n + \lambda} \pi < \frac{j_{\lambda+\frac{1}{2},n-k}}{\sqrt{(n+\lambda)^2}} < \frac{j_{\lambda+\frac{1}{2},n-k}}{\sqrt{(n+\lambda)^2 - \frac{1}{3}\lambda(\lambda+1)}}, \quad (5.9)$$

o que garante (ii). □

Lema 5.3. *Se $n = 3$, então $P_3^{(\lambda)'} e P_3^{(\lambda)''}$ preservam o sinal em cada um dos intervalos (5.2)*

e

$$P_3^{(\lambda)} \left(x_{3,1}^{(\lambda)[0]} \right) P_3^{(\lambda)''} \left(x_{3,1}^{(\lambda)[0]} \right) > 0.$$

Demonstração. Caso $n = 3$, então $P_3^{(\lambda)}$ possuirá somente um zero positivo $x_{3,1}^{(\lambda)}$. Fazendo $n = 3$ e $k = 1$ nas desigualdades (5.5) e também na demonstração de (i), segue que $P_3^{(\lambda)''}$ não troca de sinal nos intervalos (5.2) que contêm $x_{3,1}^{(\lambda)}$. Como $P_3^{(\lambda)''}(x) > 0$ para $x > 0$ segue que $P_3^{(\lambda)}(x_{3,1}^{(\lambda)[0]}) P_3^{(\lambda)''}(x_{3,1}^{(\lambda)[0]}) > 0$ porque $x_{3,1}^{(\lambda)[0]} > x_{3,1}^{(\lambda)}$. \square

Por enquanto sabemos que as condições para convergência estão satisfeitas para $n = 2$ e $n = 3$. Para $n \geq 4$ ainda teríamos que mostrar que $P_n^{(\lambda)''}$ preserva o sinal em cada um dos intervalos (5.2). Entretanto a estratégia utilizada no Lema 5.2 de comparar desigualdades não é eficiente neste caso. De fato, veja que

$$\frac{d^2}{dx^2} P_n^{(\lambda)}(x) = 4\lambda(\lambda + 1) P_{n-2}^{(\lambda+2)}(x).$$

Logo, os zeros de $P_n^{(\lambda)''}$ são os $n - 2$ zeros de $P_{n-2}^{(\lambda+2)}$. Aqui fazemos uma pausa para alertarmos sobre os zeros de $\mathcal{P}_n^{(\lambda)''}$. Note que

$$\frac{d^2}{d\theta^2} \mathcal{P}_n^{(\lambda)}(\theta) = -2\lambda \cos \theta \mathcal{P}_{n-1}^{(\lambda+1)}(\theta) + 4\lambda(\lambda + 1) \sin^2 \theta \mathcal{P}_{n-2}^{(\lambda+2)}(\theta).$$

Pela igualdade acima vemos que os zeros de $\mathcal{P}_n^{(\lambda)''}$ possuem localização não trivial. Somente para citar, em nossos testes verificamos que existem n zeros de $\mathcal{P}_n^{(\lambda)''}$ no intervalo $(0, \pi)$. Por este motivo é que a demonstração da convergência do método de Fourier-Newton (ver Subseção 4.2.2) é mais complicada. Agora voltemos à discussão sobre os zeros de $P_n^{(\lambda)''}$. Testes numéricos sugerem que os zeros positivos se distribuem da seguinte forma:

$$x_{n,k+1}^{(\lambda)} < x_{n-2,k}^{(\lambda+2)} < x_{n-1,k}^{(\lambda+1)}, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor (n-2)/2 \rfloor,$$

isto é,

$$\theta_{n-1,k}^{(\lambda+1)} < \theta_{n-2,k}^{(\lambda+2)} < \theta_{n,k+1}^{(\lambda)}, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor (n-2)/2 \rfloor.$$

Mas infelizmente o limite superior das desigualdades de Laforgia [39] para os zeros $\theta_{n-2,k}^{(\lambda+2)}$, em muitos casos, é maior do que o limite inferior em (5.1) para $\theta_{n,k+1}^{(\lambda)}$. Ou seja, não há garantias de que a segunda derivada preserve o sinal sobre os intervalos (5.2) por meio deste resultado de Laforgia. Aqui vale ressaltar que a literatura está repleta de diversas fórmulas assintóticas e desigualdades para os zeros dos polinômios ultrasféricos que poderiam ser utilizadas no lugar das desigualdades de Laforgia. Veja, por exemplo, [3, 5, 6, 19, 21, 24, 27, 28, 30]. Contudo, as expressões contidas nestes trabalhos tornariam as comparações muito tortuosas porque elas dependem do cálculo de zeros de outros polinômios, servem apenas para valores particulares de λ e k ou carecem de termos passíveis de comparação com aqueles em (5.1).

Contudo, apesar da proximidade de $\theta_{n-2,k}^{(\lambda+2)}$ e $\theta_{n,k+1}^{(\lambda)}$, percebemos por meio de vários testes numéricos que os zeros $\theta_{n-2,k}^{(\lambda+2)} \in (0, \pi/2)$ ainda parecem se manter à esquerda do limite inferior de (5.1) para $\theta_{n,k+1}^{(\lambda)}$. Claramente tais zeros se mantêm à direita do limite superior de (5.1) para $\theta_{n,k}^{(\lambda)}$. Sob estas condições e utilizando que o coeficiente líder de $P_n^{(\lambda)}$ é positivo, temos que

$$P_n^{(\lambda)} \left(x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right) P_n^{(\lambda)''} \left(x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right) > 0, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor.$$

Em outras palavras, os testes numéricos apontam que $P_n^{(\lambda)''}$ preserva o sinal em cada um dos intervalos (5.2) e também apontam que $x_{n,k}^{(\lambda)[0]}$ é a aproximação inicial requerida.

Agora refletimos um pouco mais sobre as constatações numéricas feitas aqui sobre $\theta_{n-2,k}^{(\lambda+2)} \in (0, \pi/2)$. Percebemos que a vizinhança de $\theta_{n-2,k}^{(\lambda+2)}$ à esquerda do limite inferior de (5.1) para $\theta_{n,k+1}^{(\lambda)}$ leva-nos a conjecturar sobre uma interessante desigualdade como a seguir.

Conjectura 5.1. *Para cada $n \geq 4$ e $0 < \lambda < 1$ temos que*

$$x_{n-2,k}^{(\lambda+2)} > \cos \frac{k + (1 + \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor (n - 2)/2 \rfloor.$$

Isto é, para $n \geq 2$ e $2 < \lambda < 3$ temos que

$$x_{n,k}^{(\lambda)} > \cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor. \quad (5.10)$$

Observe que provar a Conjectura 5.1 implica em provar as condições faltantes para garantir a convergência no caso $n \geq 4$ e, reciprocamente, provar tais condições implica em provar a conjectura.

Enquanto ainda buscávamos uma demonstração para a Conjectura 5.1 tomamos conhecimento do trabalho de Petras [43] que versa sobre limites de erro de métodos iterativos para as aproximações dos zeros de Legendre ($\lambda = 1/2$). Em tal trabalho é apresentado um lema¹ que garante todas as condições requeridas pelo Teorema 4.1 para $n \geq 2$ quando $\lambda = 1/2$. O próximo lema, em parte, pode ser considerado uma generalização do resultado de Petras para o caso principal $0 < \lambda < 1$. A sua demonstração é mais elegante do que a do Lema 5.2 e é análoga àquela encontrada em [43].

É importante apontarmos que os resultados de Petras poderiam ser generalizados para provarmos imediatamente todas as condições requeridas para a convergência no caso principal com $n \geq 2$. Com isso os Lemas 5.1, 5.2 e 5.3 seriam totalmente dispensáveis. Todavia, se

¹Referimo-nos aos itens (b) e (c) do Lema em [43, p. 256]

a demonstração fosse realizada desta maneira, nós não iríamos notar a forte desigualdade que é proposta na Conjectura 5.1 justamente porque ela só foi percebida quando buscávamos provar as condições sobre os zeros de $P_n^{(\lambda)''}$ com a estratégia do Lema 5.2. Por este motivo, optamos por não demonstrar todas as condições sobre a convergência para $n \geq 2$ e $0 < \lambda < 1$ como fez Petras para o caso $\lambda = 1/2$.

Antes de apresentarmos o Lema 5.4, iremos fazer algumas definições e destacar alguns dos resultados já obtidos até aqui.

Sejam \mathcal{S}_k os intervalos dados por Szegö em (5.2) definidos pelas uniões disjuntas

$$\mathcal{S}_k = \mathcal{L}_k \dot{\cup} \left\{ x_{n,k}^{(\lambda)} \right\} \dot{\cup} \mathcal{U}_k, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor,$$

onde

$$\mathcal{U}_k = \left(x_{n,k}^{(\lambda)}, x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right]$$

e \mathcal{L}_k é o complementar de $\left\{ x_{n,k}^{(\lambda)} \right\} \dot{\cup} \mathcal{U}_k$ em relação a cada intervalo \mathcal{S}_k . Observando o que já foi demonstrado até aqui e utilizando que o coeficiente líder de $P_n^{(\lambda)}$ é positivo, notamos que

$$(-1)^{k+1} P_n^{(\lambda)}(x) > 0 \quad \forall x \in \mathcal{U}_k, \quad (5.11)$$

$$(-1)^{k+1} P_n^{(\lambda)}(x) < 0 \quad \forall x \in \mathcal{L}_k,$$

$$(-1)^{k+1} P_n^{(\lambda)'}(x) > 0 \quad \forall x \in \mathcal{S}_k, \quad (5.12)$$

para $n \geq 2$ e $k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$.

Segue agora o lema que prova definitivamente as condições restantes para a convergência.

Lema 5.4. *Para cada $n \geq 4$, a segunda derivada $P_n^{(\lambda)''}$ preserva o sinal em cada um dos intervalos (5.2) e*

$$P_n^{(\lambda)} \left(x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right) P_n^{(\lambda)''} \left(x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right) > 0, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor.$$

Demonstração. Pela equação diferencial (3.4),

$$\frac{P_n^{(\lambda)''} \left(x_{n,k}^{(\lambda)} \right)}{P_n^{(\lambda)'} \left(x_{n,k}^{(\lambda)} \right)} = \frac{(2\lambda + 1)x_{n,k}^{(\lambda)}}{1 - x_{n,k}^{(\lambda)^2}} > 0,$$

pois $x_{n,k}^{(\lambda)} > 0$, $k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$. Logo, $P_n^{(\lambda)''}$ e $P_n^{(\lambda)'}$ possuem o mesmo sinal em $x_{n,k}^{(\lambda)}$. Como $x_{n,k}^{(\lambda)} \in \mathcal{S}_k$, então

$$(-1)^{k+1} P_n^{(\lambda)''} \left(x_{n,k}^{(\lambda)} \right) > 0.$$

Portanto existe uma vizinhança $\mathcal{V}_k \subseteq \mathcal{S}_k$ de $x_{n,k}^{(\lambda)}$ tal que

$$\mathcal{V}_k = \{x \in \mathcal{S}_k; (-1)^{k+1} P_n^{(\lambda)''}(x) > 0\}.$$

Em \mathcal{V}_k , o polinômio $(-1)^{k+1} P_n^{(\lambda)'}$ é crescente. Logo, pela definição da derivada $P_n^{(\lambda)'}(x)$ quando $x_{n,k}^{(\lambda)} \nearrow x$ ou $x_{n,k}^{(\lambda)} \searrow x$,

$$(-1)^{k+1} P_n^{(\lambda)}(x) \leq (-1)^{k+1} P_n^{(\lambda)'}(x) (x - x_{n,k}^{(\lambda)}) \quad \forall x \in \mathcal{V}_k.$$

Daí, a equação diferencial (3.4) mostra que, para $x \in \mathcal{V}_k$,

$$(-1)^{k+1} (1 - x^2) P_n^{(\lambda)''}(x) \geq (-1)^{k+1} \left[(2\lambda + 1)x - n(n + 2\lambda) (x - x_{n,k}^{(\lambda)}) \right] P_n^{(\lambda)'}(x).$$

A solução da inequação anterior na variável x fornece toda a vizinhança \mathcal{V}_k . Por outro lado, tomemos $x \in \mathcal{S}_k$. Se o termo entre colchetes na expressão acima for positivo em \mathcal{S}_k , isto é, se

$$x - x_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{(2\lambda + 1)x}{n(n + 2\lambda)}, \quad \text{para } x \in \mathcal{S}_k, \quad (5.13)$$

então $(-1)^{k+1} P_n^{(\lambda)''}(x) > 0$ em \mathcal{S}_k . Conseqüentemente, a solução da inequação (5.13) estará contida em \mathcal{V}_k . Veja que $x \in \mathcal{L}_k$ é solução de (5.13) porque, neste caso, $x - x_{n,k}^{(\lambda)} < 0$. Logo, $\mathcal{L}_k \subset \mathcal{V}_k$.

Agora provaremos que $\mathcal{U}_k \subset \mathcal{V}_k$. Seja então $x \in \mathcal{U}_k$. Para simplificar, utilizaremos a seguinte notação para o limite inferior das desigualdades (5.1),

$$\vartheta_{n,k}^{(\lambda)} := \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi.$$

Notemos as desigualdades para $\theta_{n,k}^{(\lambda)}$, $k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$, com o limite superior dado por Gatteschi [30, p. 1560 Cor. 3.2],

$$\vartheta_{n,k}^{(\lambda)} < \theta_{n,k}^{(\lambda)} < \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} + \frac{\lambda(1 - \lambda)}{2(n + \lambda)^2} \cot \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{\pi}{2},$$

isto é,

$$\cos \left(\vartheta_{n,k}^{(\lambda)} + \frac{\lambda(1 - \lambda)}{2(n + \lambda)^2} \cot \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \right) < x_{n,k}^{(\lambda)} < \cos \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} = x_{n,k}^{(\lambda)[0]}.$$

Daí, como $x \in \mathcal{U}_k$,

$$x - x_{n,k}^{(\lambda)} < \cos \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} - \cos \left(\vartheta_{n,k}^{(\lambda)} + \frac{\lambda(1 - \lambda)}{2(n + \lambda)^2} \cot \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \right).$$

Pelo polinômio de Taylor com resto de Lagrange temos que existe

$$\eta \in \left(\vartheta_{n,k}^{(\lambda)}, \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} + \frac{\lambda(1-\lambda)}{2(n+\lambda)^2} \cot \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \right) \subset \left(0, \frac{\pi}{2} \right),$$

tal que

$$\begin{aligned} x - x_{n,k}^{(\lambda)} &< \frac{\lambda(1-\lambda)}{2(n+\lambda)^2} \cos \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} + \frac{\lambda^2(1-\lambda)^2}{8(n+\lambda)^4} \cot^2 \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \cos \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} - \frac{\lambda^3(1-\lambda)^3}{48(n+\lambda)^6} \cot^3 \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \operatorname{sen} \eta, \\ x - x_{n,k}^{(\lambda)} &< \frac{\lambda(1-\lambda)}{2(n+\lambda)^2} \cos \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \left(1 + \frac{\lambda(1-\lambda)}{4(n+\lambda)^2} \cot^2 \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \right). \end{aligned} \quad (5.14)$$

Agora obteremos quatro relações **(i)**, **(ii)**, **(iii)** e **(iv)** para utilizarmos na desigualdade acima.

$$(i) \quad \frac{\lambda(1-\lambda)}{4(n+\lambda)^2} \cot^2 \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{1}{36}.$$

De fato, utilizando que $\cot^2 x < 1/x^2$, $0 < x < \pi/2$, em [1, p. 75 des. (4.3.80)], teremos que

$$\frac{\lambda(1-\lambda)}{4(n+\lambda)^2} \cot^2 \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{1/4}{4(n+\lambda)^2 \vartheta_{n,k}^{(\lambda)2}} < \frac{1}{4(2k - (1-\lambda))^2 \pi^2} < \frac{1}{36(2k-1)^2} \leq \frac{1}{36}.$$

$$(ii) \quad \frac{\lambda(1-\lambda)}{2(n+\lambda)^2} \leq \frac{1}{160}.$$

De fato, como $n \geq 4$, então $\frac{\lambda(1-\lambda)}{2(n+\lambda)^2} \leq \frac{\lambda(1-\lambda)}{2(4+\lambda)^2} \leq \frac{1}{160}$.

$$(iii) \quad \frac{\cos \vartheta_{n,k}^{(\lambda)}}{\cos \theta_{n,k}^{(\lambda)}} < \frac{5760}{5723}.$$

De fato, novamente pelo polinômio de Taylor com resto de Lagrange e, posteriormente, utilizando **(i)** e **(ii)**,

$$\cos \theta_{n,k}^{(\lambda)} > \cos \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} - \left(\theta_{n,k}^{(\lambda)} - \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \right) \operatorname{sen} \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} - \frac{\left(\theta_{n,k}^{(\lambda)} - \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \right)^2}{2} \cos \vartheta_{n,k}^{(\lambda)},$$

$$\cos \theta_{n,k}^{(\lambda)} > \cos \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \left(1 - \frac{\lambda(1-\lambda)}{2(n+\lambda)^2} - \frac{\lambda^2(1-\lambda)^2}{8(n+\lambda)^4} \cot^2 \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \right),$$

$$\cos \theta_{n,k}^{(\lambda)} > \cos \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \left(1 - \frac{1}{160} - \frac{1}{160} \cdot \frac{1}{36} \right) = \frac{5723}{5760} \cos \vartheta_{n,k}^{(\lambda)}.$$

$$(iv) \frac{\lambda(1-\lambda)}{(n+\lambda)^2} < \frac{2\lambda+1}{n(n+2\lambda)}.$$

Basta ver que $\lambda(1-\lambda) < 2\lambda+1$ e $n^2+2\lambda n+\lambda^2 > n(n+2\lambda)$.

Retornando em (5.14),

$$x - x_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{2\lambda+1}{2n(n+2\lambda)} \cdot \frac{5760}{5723} x_{n,k}^{(\lambda)} \left(1 + \frac{1}{36}\right) < \frac{(2\lambda+1)x}{n(n+2\lambda)}.$$

Logo $x \in \mathcal{U}_k$ é solução de (5.13), ou seja, $\mathcal{U}_k \subset \mathcal{V}_k$. Portanto, $\mathcal{V}_k = \mathcal{S}_k$. Além disto, por (5.11) temos que

$$P_n^{(\lambda)} \left(x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right) P_n^{(\lambda)''} \left(x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right) > 0, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor.$$

□

Antes de apresentarmos o resultado mais importante deste trabalho, façamos uma última observação. Já que $P_n^{(\lambda)}$ e $P_n^{(\lambda)''}$ possuem o mesmo sinal em $\left(x_{n,k}^{(\lambda)}, x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right)$, então é claro que qualquer outro valor x pertencente ao intervalo anterior será tal que

$$P_n^{(\lambda)}(x) P_n^{(\lambda)''}(x) > 0, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor.$$

Logo, a convergência também é garantida para qualquer outra aproximação inicial $x \in \left(x_{n,k}^{(\lambda)}, x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right)$. Sobretudo a convergência será ainda mais rápida com tal aproximação. Para ilustrar, apresentaremos quatro possíveis valores para tal x , $k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$. Sempre tem-se que $x_{n,k}^{(\lambda)} < x$, quase sempre tem-se $x < x_{n,k}^{(\lambda)[0]}$ e, em alguns casos, $x \ll x_{n,k}^{(\lambda)[0]}$. Observe que tais valores são elementares, isto é, não dependem de zeros de outras funções.

Ahmed *et al.* [3, Teo. 4.1]

$$x = \sqrt{\frac{2n^2 + 4n + 3}{2n^2 + 1 + 2\lambda(2n + 1)}} \cos \frac{k\pi}{n + 1};$$

Elbert e Laforgia [24, Cor. 3.1] com apontamento de Elbert [21, p. 79]

$$x = \frac{\sqrt{n^2 + 2(n-1)\lambda - 1}}{n + \lambda} \cos \frac{(k-1)\pi}{n-1};$$

Förster e Petras [26, Teo. 1]

$$x = \cos \left\{ \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} + \frac{\lambda(1-\lambda)}{2(n+\lambda)^2} \left[1 - \frac{6 + \lambda(1-\lambda)(9 - 2\cos^2 \vartheta_{n,k}^{(\lambda)})}{12(n+\lambda)^2 \sin^2 \vartheta_{n,k}^{(\lambda)}} \right] \cot \vartheta_{n,k}^{(\lambda)} \right\}, \quad (5.15)$$

$$\vartheta_{n,k}^{(\lambda)} = \frac{k - (1-\lambda)/2}{n+\lambda} \pi;$$

Area *et al.* [6, Teo. 4.1] para $\frac{1}{2} < \lambda < 1$

$$x = \left\{ \frac{\cos^2(\pi/(2n))}{2(n+\lambda)^2} \cdot \left[2 + n^2 + 2n\lambda + 4k^2 + \lambda - 2k(3-2\epsilon) - \epsilon(3-\epsilon) \right. \right. \\ \left. \left. + \sqrt{(n-2k+2-\epsilon)(n+2k-1+\epsilon)(n-2k+2\lambda+1-\epsilon)(n+2k+2\lambda-2+\epsilon)} \right] \right\}^{\frac{1}{2}},$$

$\epsilon = 0$ se n for par, $\epsilon = 1$ se n for ímpar.

A seguir, o nosso principal teorema.

Teorema 5.1 (Convergência). *Para cada $n \geq 2$, o método de Newton-Raphson possui convergência garantida para os zeros positivos $x_{n,k}^{(\lambda)}$, $k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$, do polinômio ultrasférico $P_n^{(\lambda)}$ no caso principal $0 < \lambda < 1$ quando se utiliza as aproximações iniciais*

$$x_{n,k}^{(\lambda)[0]} = \cos \frac{k - (1-\lambda)/2}{n+\lambda} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor,$$

ou quaisquer outras aproximações que estejam entre $x_{n,k}^{(\lambda)}$ e $x_{n,k}^{(\lambda)[0]}$.

Demonstração. Veja que as condições para convergência dadas no Teorema 4.1 são satisfeitas segundo os Lemas 5.1 a 5.4. □

5.3 Consequências

Nesta seção iremos apresentar algumas consequências dos resultados obtidos na seção anterior. Começaremos estabelecendo a Conjectura 5.1 por meio do Lema 5.4. Isto fornecerá uma desigualdade inferior para cada um dos zeros positivos do polinômio $P_n^{(\lambda)}$, $2 < \lambda < 3$. Iremos compará-la com outras desigualdades conhecidas na literatura. Posteriormente iremos provar a validade desta desigualdade em $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$ ou $\lambda > 1$. Na verdade, provaremos que

certas desigualdades que envolvem os zeros do polinômio ultrasférico se invertem quando $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$ ou $\lambda > 1$. Também apresentaremos um teorema de entrelaçamento de zeros. Por fim iremos dar uma outra demonstração do Teorema 5.1.

Teorema 5.2 (Desigualdades em $2 < \lambda < 3$). Para cada $n \geq 2$ e $2 < \lambda < 3$ os zeros positivos $x_{n,k}^{(\lambda)}$, $k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$, do polinômio ultrasférico $P_n^{(\lambda)}$ obedecem às desigualdades

$$x_{n,k}^{(\lambda)} > \cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor.$$

Demonstração. Pela Conjectura 5.1 e usando que o coeficiente líder de $P_n^{(\lambda)}$ é positivo, o Lema 5.4 justifica imediatamente tais desigualdades. \square

Teorema 5.3 (Entrelaçamento de zeros). Para cada $n \geq 4$ e $0 < \lambda < 1$ os zeros positivos $x_{n-2,k}^{(\lambda+2)}$, $k = 1, 2, \dots, \lfloor (n-2)/2 \rfloor$, do polinômio ultrasférico $P_{n-2}^{(\lambda+2)}$ se entrelaçam com os zeros positivos $x_{n,k}^{(\lambda)}$ e $x_{n-1,k}^{(\lambda+1)}$ dos polinômios ultrasféricos $P_n^{(\lambda)}$ e $P_{n-1}^{(\lambda+1)}$ da seguinte maneira

$$x_{n-1,k+1}^{(\lambda+1)} < x_{n,k+1}^{(\lambda)} < x_{n-2,k}^{(\lambda+2)} < x_{n-1,k}^{(\lambda+1)}, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor (n-2)/2 \rfloor,$$

Demonstração. As desigualdades $x_{n-1,k+1}^{(\lambda+1)} < x_{n,k+1}^{(\lambda)}$ e $x_{n-2,k}^{(\lambda+2)} < x_{n-1,k}^{(\lambda+1)}$ são triviais. Já as desigualdades $x_{n,k+1}^{(\lambda)} < x_{n-2,k}^{(\lambda+2)}$ decorrem do Lema 5.4 e do fato do coeficiente líder do polinômio ultrasférico ser positivo. \square

Para ilustrar o entrelaçamento dos zeros, exibimos a Figura 5.1 que mostra os gráficos dos polinômios $P_8^{(1/3)}$, $P_7^{(4/3)}$ e $P_6^{(7/3)}$ no intervalo $[0, 1]$. Nota-se a proximidade dos zeros de $P_6^{(7/3)}$ à direita dos zeros de $P_8^{(1/3)}$, especialmente entre os seus menores zeros.

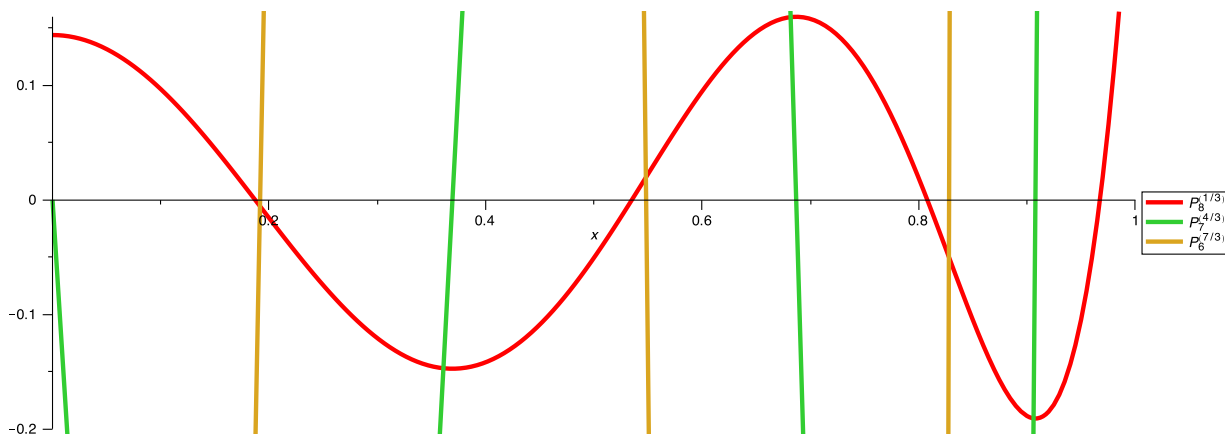


Figura 5.1: Entrelaçamento de zeros segundo o Teorema 5.3.

Agora desejamos mostrar como a desigualdade apresentada no Teorema 5.2 é forte. A Tabela 5.1 exibe os valores dados pelo limite inferior fornecido por tal teorema para cada $x_{n,k}^{(\lambda)}$, $k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$, quando $n = 11$ e $\lambda = 2,05, 2,5, 2,7$. Já a Tabela 5.2 exibe tais valores quando $n = 12$ e $\lambda = 2,1, \sqrt{5}, 2,8$. O valor considerado exato $x_{n,k}^{(\lambda)}$ sempre é aquele calculado pelo autossistema, uma vez que não temos garantida a convergência do método de Newton-Raphson nestes casos. Em tais tabelas percebe-se que a desigualdade é mais forte para os menores zeros $x_{n,k}^{(\lambda)}$, isto é, para k próximo de $\lfloor n/2 \rfloor$.

k	Teo. 5.2	$x_{11,k}^{(2,05)}$	Teo. 5.2	$x_{11,k}^{(2,5)}$	Teo. 5.2	$x_{11,k}^{(2,7)}$
1	0,9334	0,9394	0,9182	0,9280	0,9114	0,9230
2	0,8209	0,8261	0,8021	0,8105	0,7939	0,8039
3	0,6610	0,6653	0,6428	0,6495	0,6349	0,6429
4	0,4631	0,4660	0,4488	0,4535	0,4427	0,4482
5	0,2384	0,2399	0,2306	0,2330	0,2273	0,2301

Tabela 5.1: Limites inferiores para $x_{n,k}^{(\lambda)}$ pelo Teo. 5.2 para $n = 11$ e $\lambda = 2,05, 2,5$ e $2,7$.

k	Teo. 5.2	$x_{12,k}^{(2,1)}$	Teo. 5.2	$x_{12,k}^{(\sqrt{5})}$	Teo. 5.2	$x_{12,k}^{(2,8)}$
1	0,9410	0,9465	0,9369	0,9435	0,9198	0,9309
2	0,8429	0,8478	0,8377	0,8435	0,8164	0,8261
3	0,7032	0,7073	0,6978	0,7026	0,6765	0,6844
4	0,5287	0,5318	0,5241	0,5277	0,5061	0,5120
5	0,3280	0,3299	0,3250	0,3272	0,3131	0,3167
6	0,1112	0,1118	0,1101	0,1109	0,1059	0,1072

Tabela 5.2: Limites inferiores para $x_{n,k}^{(\lambda)}$ pelo Teo. 5.2 para $n = 12$ e $\lambda = 2,1, \sqrt{5}$ e $2,8$.

Agora iremos comparar a desigualdade do Teorema 5.2 com outras já conhecidas. As Tabelas 5.3 e 5.4 exibem os limites dados para o menor zero, $k = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$, para $\lambda = 2,5$ e $2,9$ por meio do Teorema 5.2 e também pelas seguintes desigualdades que são válidas no intervalo $2 < \lambda < 3$:

Laforgia [39, des. (9’)]

$$x_{n,k}^{(\lambda)} > \cos \frac{j_{\lambda-\frac{1}{2},k}}{\sqrt{(n+\lambda)^2 + (1-4/\pi^2)\lambda(1-\lambda)}}, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor; \quad (5.16)$$

Dimitrov e Nikolov [19, Teo. 2]

$$x_{n,k}^{(\lambda)} \geq \left[\frac{b - (n-2)\sqrt{\delta}}{a} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor,$$

$$b = n^3 + 2(\lambda - 1)n^2 - (3\lambda - 5)n + 4(\lambda - 1),$$

$$a = 2(n + \lambda - 1)(n^2 + n(\lambda - 1) + 4(\lambda + 1)),$$

$$\delta = n^2(n + 2\lambda)^2 + (2\lambda + 1)(n^2 + 2(\lambda + 3)n + 8(\lambda - 1)).$$

Vale lembrar que as desigualdades de Laforgia são não elementares, pois dependem dos zeros da função de Bessel². Nas tabelas sublinhamos os dígitos que são diferentes dos dígitos reais.

n	Laf	DimNik	Teo. 5.2	$x_{n,\lfloor n/2 \rfloor}^{(2,5)}$
10	0,12333	0,12450	0,12533	0,12686
12	0,10646	0,10668	0,10812	0,10909
40	0,03668	0,03561	0,03695	0,03699
50	0,02973	0,02877	0,02992	0,02994
60	0,02500	0,02414	0,02513	0,02514
70	0,02157	0,02079	0,02166	0,02167

Tabela 5.3: Lim. inf. para $x_{n,\lfloor n/2 \rfloor}^{(2,5)}$.

n	Laf	DimNik	Teo. 5.2	$x_{n,\lfloor n/2 \rfloor}^{(2,9)}$
10	0,11864	0,12122	0,12147	0,12352
12	0,10289	0,10419	0,10523	0,10656
40	0,03622	0,03529	0,03661	0,03666
50	0,02943	0,02856	0,02969	0,02972
60	0,02478	0,02399	0,02497	0,02499
70	0,02140	0,02068	0,02155	0,02156

Tabela 5.4: Lim. inf. para $x_{n,\lfloor n/2 \rfloor}^{(2,9)}$.

Nos casos mostrados nas Tabelas 5.3 e 5.4 o Teorema 5.2 apresentou resultados mais fortes. Verificamos também que quando $n \rightarrow \infty$, a desigualdade no Teorema 5.2 torna-se melhor do que a de Laforgia para um número cada vez maior de zeros positivos. Para mostrar como se dá essa diferença, fixados λ e $k \in \{1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor\}$, exibimos os gráficos da função

$$\Delta(n) = \cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi - \cos \frac{j_{\lambda - \frac{1}{2}, k}}{\sqrt{(n + \lambda)^2 + (1 - 4/\pi^2) \lambda(1 - \lambda)}},$$

para $k = \lfloor n/2 \rfloor - 2$ (3º menor zero) com $\lambda = 2,1, 2,6$ e $2,99$. Quando Δ torna-se positiva, então o limite do Teorema 5.2 torna-se melhor do que o de Laforgia. Pelos gráficos, vemos que para $k = \lfloor n/2 \rfloor - 2$, a função Δ torna-se positiva em $n = 32$. O parâmetro λ parece não interferir muito no momento em que Δ troca de sinal. Diante destas observações, estamos interessados em modelar numericamente uma relação entre n e k . Queremos saber, com um

²Para o cálculo de tais zeros, utilizamos o programa `besselzero.m` escrito por Greg von Winckel em MATLAB que calcula os zeros da função de Bessel de 1ª e 2ª espécies pelo método de Halley.

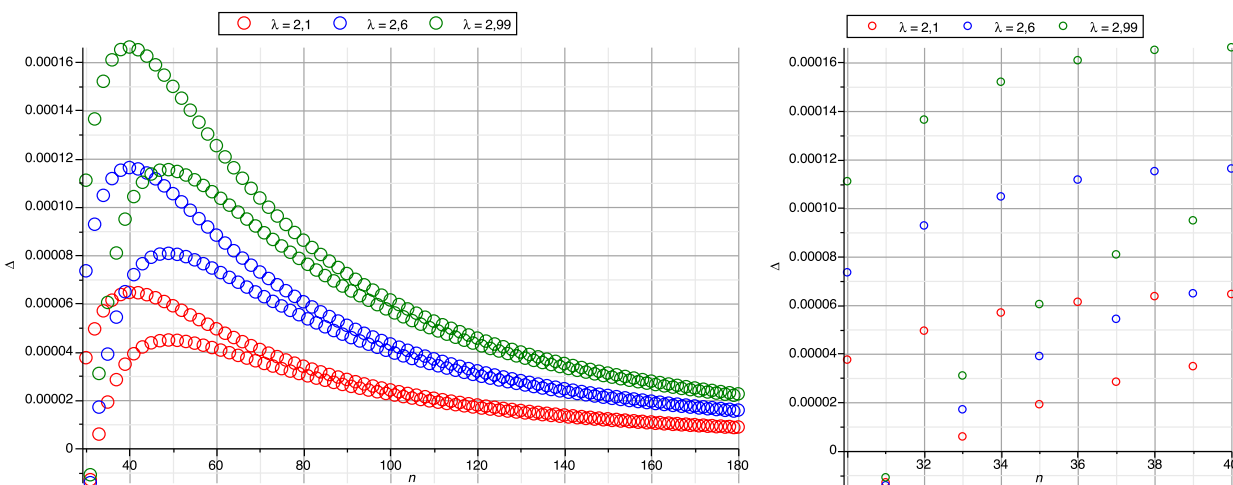


Figura 5.2: Gráficos de Δ para 3º menor zero (à esq.) com zoom (à dir.).

dado um n , para quais valores de k teremos $\Delta > 0$? Segundo vários testes numéricos que realizamos, conjecturamos que deveremos ter a relação

$$\left\lceil \frac{20n}{47} \right\rceil \leq k \leq \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor, \quad n \geq 80, \quad \forall \lambda \in (2, 3). \quad (5.17)$$

Por exemplo, para $n = 100$ deveremos ter $42 \leq k \leq 50$. Logo, $\Delta(n) > 0$ para $k = 42, 43, \dots, 50$. Assim, para cada um dos 9 menores zeros positivos de $P_n^{(\lambda)}$, a desigualdade no Teorema 5.2 é mais forte do que a de Laforgia em (5.16). Veja a Tabela 5.5 que mostra este caso para $\lambda = 2,9$. Perceba que em $k = 41$ temos $\Delta(n) < 0$.

k	Laf	Teo. 5.2	$x_{100,k}^{(2,9)}$
41	0,2859955	0,2859907	0,2860651
42	0,2566023	0,2566066	0,2566734
43	0,2269700	0,2269833	0,2270424
44	0,1971262	0,1971485	0,1971998
45	0,1670988	0,1671300	0,1671735
46	0,1369157	0,1369556	0,1369913
47	0,1066051	0,1066537	0,1066814
48	0,0761953	0,0762523	0,0762721
49	0,0457145	0,0457798	0,0457917
50	0,0151912	0,0152647	0,0152687

Tabela 5.5: Limites inferiores para $x_{100,k}^{(\lambda)}$, $41 \leq k \leq 50$, $\lambda = 2,9$.

Há mais detalhes que merecem ser observados. Os gráficos mostram que Δ tende a ser maior quando n é par e também quando $\lambda \nearrow 3$. Além disto, $\Delta \searrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$.

Agora voltemos ao Teorema 5.2. Curiosamente a desigualdade inferior deste teorema, para cada k , é o limite superior de Szegö (5.2) invertido. Mediante alguns testes nós conjecturamos que a desigualdade no Teorema 5.2 seja válida para qualquer λ fora do intervalo $[0, 1]$ e não apenas quando $2 < \lambda < 3$. É claro que quando $\lambda \nearrow 0$ ou $\lambda \searrow 1$,

$$\cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi \approx x_{n,k}^{(\lambda)},$$

pois temos o sinal de $=$ no lugar de \approx na expressão acima quando $\lambda = 0$ (Chebyshev de 1ª espécie) ou $\lambda = 1$ (Chebyshev de 2ª espécie). Todavia nossos testes mostraram que

$$\cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi \nearrow x_{n,k}^{(\lambda)} \quad \text{quando } \lambda \nearrow 0 \text{ ou } \lambda \searrow 1.$$

Portanto, segue a conjectura.

Conjectura 5.2. *Para cada $n \geq 2$ e $\lambda \in (-\frac{1}{2}, 0) \cup (1, 2] \cup [3, \infty)$ temos que os zeros positivos do polinômio ultrasférico $P_n^{(\lambda)}$ obedecem às seguintes desigualdades,*

$$x_{n,k}^{(\lambda)} > \cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor. \quad (5.18)$$

A desigualdade na conjectura é cada vez mais forte à medida que $\lambda \nearrow 0$ ou $\lambda \searrow 1$ devido à proximidade com os zeros de Chebyshev de 1ª e 2ª espécies.

Aqui vale lembrar que $x_{n,k}^{(\lambda)}$ é função decrescente de λ , ver Stieltjes [45]. Note que

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \left\{ \cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi \right\} = -\frac{(n - 2k + 1)\pi}{2(n + \lambda)^2} \operatorname{sen} \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi < 0,$$

$\forall k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$. Então, $\cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi$ também é função decrescente de λ .

Observando o modo como Szegö [49] demonstrou as desigualdades inferiores em (5.1) nós iremos demonstrar a Conjectura 5.2 para $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$ ou $\lambda > 1$. Os passos que serão realizados são análogos àqueles em Szegö [49, p. 124-126]. A ferramenta usada para estas demonstrações é o importante Teorema da Comparação de Sturm.

Teorema 5.4 (Comparação de Sturm). *Sejam f e F duas funções contínuas em $I = (x_0, X_0)$ com $f(x) \leq F(x)$ para $x \in I$. Sejam as funções y e Y não identicamente nulas em I que satisfazem às equações diferenciais*

$$y'' + f(x)y = 0, \quad Y'' + F(x)Y = 0,$$

respectivamente. Sejam x' e x'' , $x' < x''$, dois zeros consecutivos de y . Então a função Y terá ao menos uma variação de sinal no intervalo (x', x'') contanto que $f(x) \not\equiv F(x)$ em $[x', x'']$.

A afirmação também é válida para $x' = x_0$, $\left(\lim_{x \searrow x_0} y(x) = 0\right)$, se a condição adicional

$$\lim_{x \searrow x_0} \{y'(x)Y(x) - y(x)Y'(x)\} = 0$$

for satisfeita (similarmente para $x'' = X_0$).

Demonstração. Ver Szegö [48, p. 3-4]. □

A partir de agora, a menos que seja dito o contrário, estamos com $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$ ou $\lambda > 1$.

Teorema 5.5. Para cada $n \geq 2$, os zeros $\theta_{n,k}^{(\lambda)}$, $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$ ou $\lambda > 1$, de $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$ satisfazem às desigualdades

$$\theta_{n,k}^{(\lambda)} - \theta_{n,k-1}^{(\lambda)} > \frac{\pi}{n + \lambda}, \quad k = 2, 3, \dots, n.$$

Demonstração. Em Szegö [49, p. 81 eq. (4.7.11)] encontramos a relação

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} + \left\{ (n + \lambda)^2 + \frac{\lambda(1 - \lambda)}{\sin^2\theta} \right\} u = 0, \quad u = \sin^\lambda \theta \mathcal{P}_n^{(\lambda)}(\theta), \quad 0 < \theta < \pi. \quad (5.19)$$

Comparemos a equação diferencial acima com

$$\frac{d^2v}{d\theta^2} + (n + \lambda)^2 v = 0$$

a qual possui soluções

$$v = \sin \left\{ (n + \lambda) \left(\theta - \theta_{n,k-1}^{(\lambda)} \right) \right\}, \quad k = 2, 3, \dots, n.$$

Para cada k , o Teorema da Comparação de Sturm implica que entre dois zeros consecutivos de u , a função v possuirá pelo menos um zero. Os zeros de v são da forma

$$\theta_{n,k-1}^{(\lambda)} + \frac{m\pi}{n + \lambda}, \quad m \in \mathbb{Z}.$$

Portanto,

$$\theta_{n,k-1}^{(\lambda)} < \theta_{n,k-1}^{(\lambda)} + \frac{\pi}{n + \lambda} < \theta_{n,k}^{(\lambda)}, \quad k = 2, 3, \dots, n. \quad \square$$

Teorema 5.6 (Desigualdades em $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$ ou $\lambda > 1$). Para cada $n \geq 2$, os zeros $\theta_{n,k}^{(\lambda)} \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right)$, $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$ ou $\lambda > 1$, de $\mathcal{P}_n^{(\lambda)}$ satisfazem às desigualdades

$$\theta_{n,k}^{(\lambda)} < \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor.$$

Demonstração. De acordo com o Teorema 5.5 a sequência

$$\tilde{\theta}_{n,k}^{(\lambda)} = \theta_{n,k}^{(\lambda)} - \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, n$$

é crescente. Daí,

$$\tilde{\theta}_{n,1}^{(\lambda)} < \tilde{\theta}_{n,2}^{(\lambda)} < \dots < \tilde{\theta}_{n,[(n+1)/2]}^{(\lambda)}. \quad (5.20)$$

Logo, se n for ímpar, basta usar que $\tilde{\theta}_{n, \frac{n+1}{2}}^{(\lambda)} = 0$. Caso n seja par é suficiente provar que $\tilde{\theta}_{n, \frac{n}{2}}^{(\lambda)} < 0$. Veja que, pelo Teorema 5.5,

$$\theta_{n, \frac{n}{2}+1}^{(\lambda)} - \theta_{n, \frac{n}{2}}^{(\lambda)} > \frac{\pi}{n + \lambda}.$$

Usando que

$$\theta_{n, \frac{n}{2}+1}^{(\lambda)} = \pi - \theta_{n, \frac{n}{2}}^{(\lambda)}$$

na desigualdade acima, provamos o desejado. \square

Note que a expressão (5.20) mostra claramente que as as desigualdades do Teorema 5.6 são cada vez mais fortes à medida que k se aproxima de $[n/2]$, confirmando nossas observações numéricas realizadas anteriormente.

A Tabela 5.6 mostra os valores fornecidos pelas desigualdades para $n = 10$ por meio do Teorema 5.6 com $\lambda = -0,2, 1,1$ e 10 .

k	Teo. 5.6	$x_{10,k}^{(-0,2)}$	Teo. 5.6	$x_{10,k}^{(1,1)}$	Teo. 5.6	$x_{10,k}^{(10)}$
1	0,9918	0,9929	0,9562	0,9566	0,6494	0,7481
2	0,9010	0,9021	0,8364	0,8367	0,5225	0,5969
3	0,7183	0,7192	0,6500	0,6503	0,3827	0,4357
4	0,4625	0,4631	0,4119	0,4121	0,2334	0,2653
5	0,1596	0,1598	0,1410	0,1411	0,0785	0,0891

Tabela 5.6: Limites inferiores para $x_{10,k}^{(\lambda)}$, $1 \leq k \leq 5$, $\lambda = -0,2, 1,1$ e 10 .

Pela Tabela 5.6 vemos que as desigualdades são melhores quando λ está mais próximo de 0 ou 1.

A Tabela 5.7 compara as desigualdades do Teorema 5.6 com as desigualdades de Laforgia (5.16) e também com as de

Ahmed, Muldoon e Spigler [3, p. 1005]

$$x_{n,k}^{(\lambda)} > \left[\frac{2n^2 + 4n + 3}{2n^2 + 1 + 2\lambda(2n + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \cos \frac{k\pi}{n + 1}, \quad 1 < \lambda \leq \frac{3}{2},$$

para $n = 100$ com $\lambda = 1,2$ para $42 \leq k \leq 50$. Na Tabela 5.7 os resultados em negrito

k	Laf	AMS	Teo. 5.6	$x_{100,k}^{(1,2)}$
42	<u>0,2608174</u>	<u>0,2608086</u>	0,2608175	0,2608206
43	<u>0,2307272</u>	<u>0,2307222</u>	0,2307277	0,2307304
44	<u>0,2004147</u>	<u>0,2004126</u>	0,2004156	0,2004180
45	<u>0,1699090</u>	<u>0,1699091</u>	0,1699104	0,1699124
46	<u>0,1392396</u>	<u>0,1392413</u>	0,1392414	0,1392430
47	<u>0,1084361</u>	0,1084387	<u>0,1084383</u>	0,1084395
48	<u>0,0775281</u>	0,0775312	<u>0,0775306</u>	0,0775315
49	<u>0,0465454</u>	0,0465488	<u>0,0465483</u>	0,0465488
50	<u>0,0155178</u>	0,0155213	<u>0,0155211</u>	0,0155213

Tabela 5.7: Limites inferiores para $x_{100,k}^{(\lambda)}$ com $\lambda = 1,2$ para $42 \leq k \leq 50$.

representam os mais fortes. A desigualdade de Laforgia é melhor do que as outras quando $1 \leq k \leq 41$. Pela tabela, a desigualdade do Teorema 5.6 é melhor do que as outras apenas quando $42 \leq k \leq 46$. Quando $47 \leq k \leq 50$, a melhor é a de Ahmed, Muldoon e Spigler. Contudo, o Teorema 5.6 mostrou-se melhor do que a desigualdade de Laforgia para $42 \leq k \leq 50$ em concordância com a relação (5.17) para $\lambda = 1,2$.

Para valores de $\lambda > 3/2$, a Tabela 5.8 mostra as desigualdades dadas pelo Teorema 5.6 e pela desigualdade de Laforgia em (5.16) para $n = 100$ com $\lambda = 5, 100$ e 250 para $41 \leq k \leq 50$.

k	Laf	Teo. 5.6	$x_{100,k}^{(5)}$	Laf	Teo. 5.6	$x_{100,k}^{(100)}$	Laf	Teo. 5.6	$x_{100,k}^{(250)}$
41	0,28044	<u>0,28043</u>	0,28068	<u>0,13323</u>	0,14867	0,17146	<u>0,03655</u>	0,08517	0,12160
42	<u>0,25157</u>	0,25159	0,25182	<u>0,11505</u>	0,13312	0,15351	<u>0,02365</u>	0,07622	0,10880
43	<u>0,22247</u>	0,22252	0,22272	<u>0,09686</u>	0,11754	0,13553	<u>0,01079</u>	0,06727	0,09600
44	<u>0,19317</u>	0,19326	0,19343	<u>0,07867</u>	0,10192	0,11752	<u>-0,00202</u>	0,05831	0,08320
45	<u>0,16371</u>	0,16382	0,16397	<u>0,06049</u>	0,08629	0,09948	<u>-0,01479</u>	0,04935	0,07040
46	<u>0,13409</u>	0,13423	0,13436	<u>0,04233</u>	0,07063	0,08142	<u>-0,02752</u>	0,04038	0,05760
47	<u>0,10436</u>	0,10453	0,10462	<u>0,02417</u>	0,05495	0,06335	<u>-0,04020</u>	0,03141	0,04480
48	<u>0,07453</u>	0,07473	0,07480	<u>0,00605</u>	0,03926	0,04526	<u>-0,05284</u>	0,02244	0,03200
49	<u>0,04464</u>	0,04486	0,04491	<u>-0,01206</u>	0,02356	0,02716	<u>-0,06543</u>	0,01346	0,01920
50	<u>0,01470</u>	0,01496	0,01497	<u>-0,03013</u>	0,00785	0,00905	<u>-0,07797</u>	0,00449	0,00640

Tabela 5.8: Limites inferiores para $x_{100,k}^{(\lambda)}$ com $\lambda = 5, 100$ e 250 para $41 \leq k \leq 50$.

Restringimo-nos em exibir na Tabela 5.8 apenas os resultados com $41 \leq k \leq 50$. Os resultados mostraram que a desigualdade do Teorema 5.6 é melhor do que a de Laforgia

quando: $\lambda = 5$ para $42 \leq k \leq 50$, $\lambda = 100$ para $36 \leq k \leq 50$ e $\lambda = 250$ para $30 \leq k \leq 50$. Repare que a relação (5.17) foi válida em $\lambda = 5$.

Ahmed *et al.* [3] apresentam a seguinte desigualdade inferior não elementar para $x_{n,k}^{(\lambda)}$,

$$x_{n,k}^{(\lambda)} > \left[\frac{2n^2 - 2n}{2n^2 + 1 + 2\lambda(2n + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} x_{n,k}^{(-1/2)}, \quad -\frac{1}{2} < \lambda \leq 0,$$

$k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$ onde $x_{n,k}^{(-1/2)}$ é um zero de uma série hipergeométrica (confira Szegő [49, p. 63 e 80]). Devido à dificuldade em encontrar $x_{n,k}^{(-1/2)}$, optamos por não realizar comparações com tal resultado.

Segundo Area *et al.* [5] surpreendentemente a maioria dos limites para $x_{n,k}^{(\lambda)}$ quando $\lambda > 0$ somente foram obtidos durante as duas últimas décadas. Visto que estes resultados são interessantes principalmente quando λ é grande o suficiente, uma boa maneira de testar a força do limite para $x_{n,k}^{(\lambda)}$ é testando o seu comportamento quando λ diverge. É conhecido que, para n e k fixos, $1 \leq k \leq n$, a relação

$$\sqrt{\lambda} x_{n,k}^{(\lambda)} \longrightarrow h_{n,k} \quad \text{quando } \lambda \rightarrow \infty$$

é válida, onde $h_{n,k}$ é o k -ésimo zero do polinômio de Hermite de grau n com tais zeros arranjados em ordem decrescente.

Para aferir a desigualdade do Teorema 5.6, mostramos a Tabela 5.9 que exhibe

$$\hat{x}_{n,k}^{(\lambda)} := \sqrt{\lambda} \cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi,$$

quando $\lambda \rightarrow \infty$ para $n = 10$ com $k = 5$ e 3 .

λ	$\hat{x}_{10,5}^{(\lambda)}$	$\hat{x}_{10,3}^{(\lambda)}$
2	0,1846	0,8609
3	0,2088	0,9839
4	0,2239	1,0641
5	0,2337	1,1180
6	0,2401	1,1547
10	0,2481	1,2102
$h_{n,k}$	0,3429	1,7567

Tabela 5.9: Convergência de $\sqrt{\lambda} x_{n,k}^{(\lambda)}$ para $h_{n,k}$ segundo desigualdade do Teorema 5.6.

Pelo fato da desigualdade do Teorema 5.6 ser melhor para os menores zeros positivos, a convergência ocorre mais rapidamente nestes casos (compare a segunda coluna com a terceira).

Para finalizar, de posse das desigualdades dadas pelo Teorema 5.6, é possível dar uma outra demonstração do nosso Teorema 5.1. Tal demonstração é mais concisa e elegante do que aquela demonstrada anteriormente.

Outra demonstração do Teorema 5.1. Pelas desigualdades do Teorema 5.6 temos que para cada $n \geq 2$ e $2 < \lambda < 3$,

$$x_{n,k}^{(\lambda)} > \cos \frac{k - (1 - \lambda)/2}{n + \lambda} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor,$$

isto é, para cada $n \geq 4$ e $0 < \lambda < 1$,

$$x_{n-2,k}^{(\lambda+2)} > \cos \frac{k + (1 + \lambda)/2}{n + \lambda} \pi = x_{n,k+1}^{(\lambda)[0]}, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor (n-2)/2 \rfloor.$$

Logo o k -ésimo zero $x_{n-2,k}^{(\lambda+2)}$ de $P_n^{(\lambda)''}$ é maior do que o limite superior de $x_{n,k+1}^{(\lambda)}$ em (5.2) e teremos as seguintes desigualdades

$$x_{n,k}^{(\lambda)} < x_{n,k}^{(\lambda)[0]} < x_{n-2,k-1}^{(\lambda+2)} < x_{n-1,k-1}^{(\lambda+1)}, \quad k = 2, 3, \dots, \lfloor n/2 \rfloor.$$

Consequentemente, $P_n^{(\lambda)'}$ e $P_n^{(\lambda)''}$ não podem trocar de sinal em $\mathcal{U}_k = \left(x_{n,k}^{(\lambda)}, x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right]$. Daí existirá uma vizinhança à esquerda de $x_{n,k}^{(\lambda)}$ suficientemente pequena para a qual $P_n^{(\lambda)'}$ e $P_n^{(\lambda)''}$ também não trocam de sinal. Como o coeficiente líder de $P_n^{(\lambda)}$ é positivo,

$$P_n^{(\lambda)} \left(x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right) P_n^{(\lambda)''} \left(x_{n,k}^{(\lambda)[0]} \right) > 0.$$

Portanto, as condições para a convergência dadas no Teorema 4.1 ficam satisfeitas. □

Capítulo 6

Conclusões e considerações finais

Neste capítulo apresentaremos as principais conclusões obtidas neste trabalho. Daremos destaque aos resultados novos na Seção 6.3 e apresentaremos nossas idéias para trabalhos futuros na Seção 6.4.

6.1 Sobre o método de Newton-Raphson

O principal objetivo deste trabalho é apresentar condições suficientes para que o método de Newton-Raphson possua convergência garantida para os zeros positivos do polinômio ultraesférico no caso principal. Nós obtivemos este resultado no Teorema 5.1. Até então tínhamos conhecimento da convergência apenas no caso $\lambda = 1/2$ por Petras [43]. Esperamos com isso que quaisquer outros métodos que utilizem Newton-Raphson no caso principal escolham as aproximações iniciais de acordo com o Teorema 5.1 a fim de usufruir da certeza da convergência. Dentre as possíveis aproximações iniciais sugeridas, temos preferência pela de Förster e Petras [26] em (5.15) porque ela pode requerer apenas uma iteração à medida que n cresce.

Os testes que realizamos na Seção 4.3 sugerem fortemente que o método de Newton-Raphson calcula os pontos e pesos para a quadratura de Gauss-Gegenbauer, $0 < \lambda < 1$, com melhor exatidão do que o método do autossistema, além de ser muito rápido. Além disto, o cálculo dos pesos pode ser melhorado ainda mais com as fórmulas presentes em [53]. Apresentamos 9 diferentes algoritmos para o método de Newton-Raphson. Dentre estes algoritmos, recomendamos os Algoritmos 5 ou 7.

Na literatura encontram-se diversas comparações entre outros métodos com o autossistema para cálculo de zeros dos polinômios ultraesféricos, principalmente no caso $\lambda = 1/2$.

Veja, por exemplo, [34, 47, 53]. Todos são unânimes quanto à inferioridade do autossistema. Nós obtivemos semelhante conclusão com o método de Newton-Raphson para alguns valores de λ no caso principal.

6.2 Sobre os Teoremas 5.2, 5.5 e 5.6

Os Teoremas 5.5 e 5.6 são, em suma, os teoremas de Szegö [49, p. 124-126] quando $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$ ou $\lambda > 1$ com as desigualdades invertidas. O Teorema 5.2 surgiu inicialmente em forma de conjectura ao tentarmos provar que $P_n^{(\lambda)''}$ não mudava de sinal nos intervalos de Szegö de modo análogo ao realizado para $P_n^{(\lambda)'}$. Com a prova completa do Teorema 5.1 foi possível estabelecer tal conjectura como Teorema 5.2. Surpreendentemente as desigualdades que são apresentadas em tal teorema são muito fortes principalmente para os menores zeros positivos. Em alguns casos, tais desigualdades são melhores do que as demais conhecidas na literatura. Vale lembrar que as desigualdades deste teorema são elementares. O Teorema 5.2 nos levou a conjecturar a validade de suas desigualdades em $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$ ou $\lambda > 1$. Tais desigualdades foram consolidadas pelos Teoremas 5.5 e 5.6. As desigualdades apresentadas no Teorema 5.6 são muito fortes principalmente quando $\lambda \nearrow 0$ ou $\lambda \searrow 1$. Em alguns casos tais desigualdades são mais fortes do que as desigualdades não elementares de Laforgia [39]. O Teorema 5.6 pode ser utilizado para dar uma demonstração concisa e elegante do Teorema 5.1.

Os resultados dos Teoremas 5.5 e 5.6 estão provados também em Buell [11]. Neste trabalho nós estabelecemos tais resultados de forma independente porque tomamos conhecimento do trabalho de Buell [11] somente depois de termos realizado todas nossas demonstrações. Ressaltamos que nossas demonstrações diferem um pouco daquelas apresentadas em [11]. Além disto, o Teorema 5.2 (caso particular do Teorema 5.6) foi obtido por consequência imediata do nosso Teorema 5.1.

6.3 Resultados novos

Dentro do nosso conhecimento, os seguintes resultados são novos:

- Teorema 5.1

Este resultado, exceto para $\lambda = 1/2$, ainda era desconhecido por nós. A demonstração deste resultado é o principal objetivo do nosso trabalho. Com tal teorema o método de

Newton-Raphson torna-se plenamente confiável para o cálculo dos zeros dos polinômios ultrasféricos no caso principal $0 < \lambda < 1$.

- Teorema 5.3.

O entrelaçamento dos zeros de $P_{n-2}^{(\lambda+2)}$ com os zeros de $P_{n-1}^{(\lambda+1)}$ é trivial. A novidade está nas fortes desigualdades

$$x_{n,k+1}^{(\lambda)} < x_{n-2,k}^{(\lambda+2)}, \quad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor, \quad 0 < \lambda < 1.$$

6.4 Trabalhos futuros

Nossos trabalhos futuros estão na direção dos resultados que foram apresentados aqui. Pretendemos investigar as desigualdades, propriedades ou relações assintóticas que permitem envolver, além dos zeros dos polinômios ultrasféricos, os zeros da função de Bessel ou os zeros dos polinômios ortogonais de Hermite ou de Laguerre. Basta ver, por exemplo, [2, 3, 5, 6, 19–25, 28–30, 39, 41, 49, 51] (e nas suas referências) as várias e diversas relações, consequências e propriedades de tais zeros.

Pretendemos obter as fórmulas melhoradas para os pesos de Gauss-Gegenbauer que estão descritas em Yakimiw [53] e comparar a exatidão das mesmas com outros métodos melhorados. Quanto ao método de Fourier-Newton, desejamos pesquisar como ocorre a sua convergência.

A relação entre n e k em (5.17) merece mais atenção. Por enquanto tal relação está meramente baseada em fatos numéricos e não há provas sobre ela. Temos o propósito de pesquisá-la melhor.

Finalmente, ansiamos por estabelecer novas aproximações para que o método de Newton-Raphson também seja convergente tanto para os zeros dos polinômios de Jacobi com $\alpha \neq \beta$ quanto para os zeros dos polinômios ultrasféricos no caso $-\frac{1}{2} < \lambda < 0$ ou $\lambda > 1$.

Apêndice A

Algoritmos

A.1 Algoritmos tipo I

Algoritmo 2: Método de Newton-Raphson com polinômio ortogonal (tipo I)

Entrada: Número n de pontos e parâmetro $\lambda \in (0, 1)$

Saída: Vetores X e W contendo os pontos e os pesos, $X(1) > X(2) > \dots > X(n)$

$lam2 \leftarrow \lambda + \lambda$, $cte \leftarrow 4^{(1-\lambda)} * \pi * \Gamma(n + lam2) / (\Gamma^2(\lambda) * \Gamma(n + 1))$

se $n > 1$ **então**

para $i \leftarrow 1$ **até** $\lfloor n/2 \rfloor$ **faça**

$z \leftarrow \cos((i - 0,5 * (1 - \lambda)) / (n + \lambda) * \pi)$ aproximação inicial para o i -ésimo zero

repita

$p1 \leftarrow 1$; $p2 \leftarrow 0$

para $j \leftarrow 1$ **até** n **faça**

$p3 \leftarrow p2$; $p2 \leftarrow p1$

$p1 \leftarrow (2 * (j - 1 + \lambda) * z * p2 + (2 - j - lam2) * p3) / j$ {relação de recorrência (3.7)}

fim

$pp \leftarrow (-n * z * p1 + (n + lam2 - 1) * p2) / (1 - z * z)$ {derivada do polinômio por (3.13)}

$z1 \leftarrow z$

$z \leftarrow z1 - p1/pp$

até $|z - z1| < tolerância$ **ou** número máximo de iterações ser atingido;

$X(i) \leftarrow z$; $X(n + 1 - i) \leftarrow -z$

$W(i) \leftarrow cte / ((1 - z * z) * (pp * pp))$; $W(n + 1 - i) \leftarrow W(i)$

fim

fim

se n for ímpar **então**

$X(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow 0$

$pp2 \leftarrow (n + lam2 - 1) * (n + lam2 - 1) * (\Gamma(0,5 * (n - 1) + \lambda) / (\Gamma(\lambda) * \Gamma(0,5 * (n + 1))))^2$ {derivada do polinômio ao quadrado em $x = 0$ por (3.13)}

$W(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow cte/pp2$

fim

Algoritmo 3: Método de Newton-Raphson com polinômio mônico (tipo I)**Entrada:** Número n de pontos e parâmetro $\lambda \in (0, 1)$ **Saída:** Vetores X e W contendo os pontos e os pesos, $X(1) > X(2) > \dots > X(n)$ $lam2 \leftarrow \lambda + \lambda$, $cte \leftarrow 4^{(1-n-\lambda)} * \pi * \Gamma(n + lam2) * \Gamma(n + 1) / \Gamma^2(n + \lambda)$ **se** $n > 1$ **então** **para** $i \leftarrow 1$ **até** $\lfloor n/2 \rfloor$ **faça** $z \leftarrow \cos((i - 0,5 * (1 - \lambda)) / (n + \lambda) * \pi)$ aproximação inicial para o i -ésimo zero **repita** $p1 \leftarrow 1$ $p2 \leftarrow 0$ **para** $j \leftarrow 1$ **até** n **faça** $p3 \leftarrow p2$ $p2 \leftarrow p1$ $p1 \leftarrow z * p2 - 0,25 * (j - 1) * (j - 2 + lam2) / ((j - 1 + \lambda) * (j + \lambda - 2)) * p3$

{relação de recorrência (3.8)}

fim $pp \leftarrow (0,5 * n * (n + lam2 - 1) / (n + \lambda - 1) * p2 - n * z * p1) / (1 - z * z)$ {derivada do polinômio por (3.13) e (3.2)} $z1 \leftarrow z$ $z \leftarrow z1 - p1/pp$ **até** $|z - z1| < tolerância$ **ou** número máximo de iterações ser atingido; $X(i) \leftarrow z$ $X(n + 1 - i) \leftarrow -z$ $W(i) \leftarrow cte / ((1 - z * z) * (pp * pp))$ $W(n + 1 - i) \leftarrow W(i)$ **fim****fim****se** n for ímpar **então** $X(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow 0$ $pp2 \leftarrow 4/\pi * (\Gamma(0,5 * (n + 1) + \lambda) * \Gamma(0,5 * n + 1) / \Gamma(n + \lambda))^2$ {derivada do polinômio ao quadrado em $x = 0$ por (3.13) e (3.2)} $W(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow cte/pp2$ **fim**

Algoritmo 4: Método de Newton-Raphson com polinômio ortonormal (tipo I)**Entrada:** Número n de pontos e parâmetro $\lambda \in (0, 1)$ **Saída:** Vetores X e W contendo os pontos e os pesos, $X(1) > X(2) > \dots > X(n)$ $lam2 \leftarrow \lambda + \lambda$, $cte \leftarrow 2 * (n + \lambda)$ **se** $n > 1$ **então** $p0 \leftarrow 0,5^\lambda * \sqrt{\Gamma(lam2 + 1)}/\Gamma(\lambda + 0,5)$ **para** $i \leftarrow 1$ **até** $\lfloor n/2 \rfloor$ **faça** $z \leftarrow \cos((i - 0,5 * (1 - \lambda))/(n + \lambda) * \pi)$ aproximação inicial para o i -ésimo zero**repita** $p1 \leftarrow p0$ $p2 \leftarrow 0$ **para** $j \leftarrow 1$ **até** n **faça** $p3 \leftarrow p2$ $p2 \leftarrow p1$ $p1 \leftarrow 2 * \sqrt{(j - 1 + \lambda) * (j + \lambda)/(j * (j - 1 + lam2))} * z * p2 -$ $\sqrt{(j - 1) * (j + \lambda) * (j + lam2 - 2)/(j * (j + lam2 - 1) * (j + \lambda - 2))} * p3$

{relação de recorrência (3.9)}

fim $pp \leftarrow \left(\sqrt{(n + lam2 - 1) * n * (n + \lambda)/(n - 1 + \lambda)} * p2 - n * z * p1 \right) / (1 - z * z)$ {derivada do polinômio por (3.13) e (3.3)} $z1 \leftarrow z$ $z \leftarrow z1 - p1/pp$ **até** $|z - z1| < \textit{tolerância}$ **ou** número máximo de iterações ser atingido; $X(i) \leftarrow z$ $X(n + 1 - i) \leftarrow -z$ $W(i) \leftarrow cte / ((1 - z * z) * (pp * pp))$ $W(n + 1 - i) \leftarrow W(i)$ **fim****fim****se** n for ímpar **então** $X(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow 0$ $pp2 \leftarrow 2^{(lam2+1)} * (n + \lambda) / (\pi * (n + lam2 - 1)) * (\Gamma(0,5 * (n + 1) + \lambda) / \Gamma(0,5 * (n + 1)))^2 *$ $\Gamma(n + 1) / \Gamma(n + lam2 - 1)$ {derivada do polinômio ao quadrado em $x = 0$ por (3.13) e (3.3)} $W(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow cte/pp2$ **fim**

A.2 Algoritmos tipo II

Algoritmo 5: Método de Newton-Raphson com polinômio ortogonal (tipo II)

Entrada: Número n de pontos e parâmetro $\lambda \in (0, 1)$

Saída: Vetores X e W contendo os pontos e os pesos, $X(1) > X(2) > \dots > X(n)$

$lam2 \leftarrow \lambda + \lambda$, $cte \leftarrow 4^{(1-\lambda)} * \pi * \Gamma(n + lam2) / (\Gamma^2(\lambda) * \Gamma(n + 1))$

se $n > 1$ **então**

para $k \leftarrow 1$ **até** n **faça**

$rec1(k) \leftarrow 2 * (k - 1 + \lambda) / k$ {primeiro termo da relação de recorrência (3.7)}

$rec2(k) \leftarrow (2 - k - lam2) / k$ {segundo termo da relação de recorrência (3.7)}

fim

para $i \leftarrow 1$ **até** $\lfloor n/2 \rfloor$ **faça**

$z \leftarrow \cos((i - 0,5 * (1 - \lambda)) / (n + \lambda) * \pi)$ aproximação inicial para o i -ésimo zero

repita

$p1 \leftarrow 1$

$p2 \leftarrow 0$

para $j \leftarrow 1$ **até** n **faça**

$p3 \leftarrow p2$

$p2 \leftarrow p1$

$p1 \leftarrow rec1(j) * z * p2 + rec2(j) * p3$ {relação de recorrência (3.7)}

fim

$pp \leftarrow (-n * z * p1 + (n + lam2 - 1) * p2) / (1 - z * z)$ {derivada do polinômio por (3.13)}

$z1 \leftarrow z$

$z \leftarrow z1 - p1 / pp$

até $|z - z1| < \textit{tolerância}$ **ou** número máximo de iterações ser atingido;

$X(i) \leftarrow z$

$X(n + 1 - i) \leftarrow -z$

$W(i) \leftarrow cte / ((1 - z * z) * (pp * pp))$

$W(n + 1 - i) \leftarrow W(i)$

fim

fim

se n for ímpar **então**

$X(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow 0$

$pp2 \leftarrow (n + lam2 - 1) * (n + lam2 - 1) * (\Gamma(0,5 * (n - 1) + \lambda) / (\Gamma(\lambda) * \Gamma(0,5 * (n + 1))))^2$ {derivada do polinômio ao quadrado em $x = 0$ por (3.13)}

$W(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow cte / pp2$

fim

Algoritmo 6: Método de Newton-Raphson com polinômio mônico (tipo II)**Entrada:** Número n de pontos e parâmetro $\lambda \in (0, 1)$ **Saída:** Vetores X e W contendo os pontos e os pesos, $X(1) > X(2) > \dots > X(n)$ $lam2 \leftarrow \lambda + \lambda$, $cte \leftarrow 4^{(1-n-\lambda)} * \pi * \Gamma(n + lam2) * \Gamma(n + 1) / \Gamma^2(n + \lambda)$ **se** $n > 1$ **então****para** $k \leftarrow 1$ **até** n **faça** $rec(k) \leftarrow -0,25 * (j - 1) * (j - 2 + lam2) / ((j - 1 + \lambda) * (j + \lambda - 2))$ {termo da relação de recorrência (3.8)}**fim****para** $i \leftarrow 1$ **até** $\lfloor n/2 \rfloor$ **faça** $z \leftarrow \cos((i - 0,5 * (1 - \lambda)) / (n + \lambda) * \pi)$ aproximação inicial para o i -ésimo zero**repita** $p1 \leftarrow 1$ $p2 \leftarrow 0$ **para** $j \leftarrow 1$ **até** n **faça** $p3 \leftarrow p2$ $p2 \leftarrow p1$ $p1 \leftarrow z * p2 + rec(j) * p3$ {relação de recorrência (3.8)}**fim** $pp \leftarrow (0,5 * n * (n + lam2 - 1) / (n + \lambda - 1) * p2 - n * z * p1) / (1 - z * z)$ {derivada do polinômio por (3.13) e (3.2)} $z1 \leftarrow z$ $z \leftarrow z1 - p1/pp$ **até** $|z - z1| < tolerância$ **ou** número máximo de iterações ser atingido; $X(i) \leftarrow z$ $X(n + 1 - i) \leftarrow -z$ $W(i) \leftarrow cte / ((1 - z * z) * (pp * pp))$ $W(n + 1 - i) \leftarrow W(i)$ **fim****fim****se** n for ímpar **então** $X(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow 0$ $pp2 \leftarrow 4/\pi * (\Gamma(0,5 * (n + 1) + \lambda) * \Gamma(0,5 * n + 1) / \Gamma(n + \lambda))^2$ {derivada do polinômio ao quadrado em $x = 0$ por (3.13) e (3.2)} $W(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow cte/pp2$ **fim**

Algoritmo 7: Método de Newton-Raphson com polinômio ortonormal (tipo II)**Entrada:** Número n de pontos e parâmetro $\lambda \in (0, 1)$ **Saída:** Vetores X e W contendo os pontos e os pesos, $X(1) > X(2) > \dots > X(n)$ $lam2 \leftarrow \lambda + \lambda$, $cte \leftarrow 2 * (n + \lambda)$ **se** $n > 1$ **então** $p0 \leftarrow 0,5^\lambda * \sqrt{\Gamma(lam2 + 1) / \Gamma(\lambda + 0,5)}$ **para** $k \leftarrow 1$ **até** n **faça** $rec1(k) \leftarrow 2 * \sqrt{(k - 1 + \lambda) * (k + \lambda) / (k * (k - 1 + lam2))}$ {primeiro termo da relação de recorrência (3.9)} $rec2(k) \leftarrow \sqrt{(k - 1) * (k + \lambda) * (k + lam2 - 2) / (k * (k + lam2 - 1) * (k + \lambda - 2))}$ {segundo termo da relação de recorrência (3.9)}**fim****para** $i \leftarrow 1$ **até** $\lfloor n/2 \rfloor$ **faça** $z \leftarrow \cos((i - 0,5 * (1 - \lambda)) / (n + \lambda) * \pi)$ aproximação inicial para o i -ésimo zero**repita** $p1 \leftarrow p0$ $p2 \leftarrow 0$ **para** $j \leftarrow 1$ **até** n **faça** $p3 \leftarrow p2$ $p2 \leftarrow p1$ $p1 \leftarrow rec1(j) * z * p2 - rec2(j) * p3$ {relação de recorrência (3.9)}**fim** $pp \leftarrow \left(\sqrt{(n + lam2 - 1) * n * (n + \lambda) / (n - 1 + \lambda)} * p2 - n * z * p1 \right) / (1 - z * z)$ {derivada do polinômio por (3.13) e (3.3)} $z1 \leftarrow z$ $z \leftarrow z1 - p1/pp$ **até** $|z - z1| < \textit{tolerância}$ **ou** número máximo de iterações ser atingido; $X(i) \leftarrow z$ $X(n + 1 - i) \leftarrow -z$ $W(i) \leftarrow cte / ((1 - z * z) * (pp * pp))$ $W(n + 1 - i) \leftarrow W(i)$ **fim****fim****se** n for ímpar **então** $X(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow 0$ $pp2 \leftarrow 2^{(lam2+1)} * (n + \lambda) / (\pi * (n + lam2 - 1) * (\Gamma(0,5 * (n + 1) + \lambda) / \Gamma(0,5 * (n + 1))))^2 * \Gamma(n + 1) / \Gamma(n + lam2 - 1)$ {derivada do polinômio ao quadrado em $x = 0$ por (3.13) e (3.3)} $W(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow cte/pp2$ **fim**

A.3 Algoritmos tipo III

Algoritmo 8: Método de Newton-Raphson com polinômio ortogonal (tipo III)

Entrada: Número n de pontos e parâmetro $\lambda \in (0, 1)$

Saída: Vetores X e W contendo os pontos e os pesos, $X(1) > X(2) > \dots > X(n)$

$lam2 \leftarrow \lambda + \lambda$, $cte \leftarrow 4^{(1-\lambda)} * \pi * \Gamma(n + lam2) / (\Gamma^2(\lambda) * \Gamma(n + 1))$

$C \leftarrow$ coeficientes de $P_n^{(\lambda)}$ {por (3.1)}

$CD \leftarrow$ coeficientes de $P_n^{(\lambda)'}$

se $n > 1$ **então**

para $i \leftarrow 1$ **até** $\lfloor n/2 \rfloor$ **faça**

$z \leftarrow \cos((i - 0,5 * (1 - \lambda)) / (n + \lambda) * \pi)$ aproximação inicial para o i -ésimo zero

repita

$p1 \leftarrow P_n^{(\lambda)}(z)$ {pelo método de Horner com C }

$pp \leftarrow P_n^{(\lambda)'}(z)$ {pelo método de Horner com CD }

$z1 \leftarrow z$

$z \leftarrow z1 - p1/pp$

até $|z - z1| < \textit{tolerância}$ **ou** número máximo de iterações ser atingido;

$X(i) \leftarrow z$

$X(n + 1 - i) \leftarrow -z$

$W(i) \leftarrow cte / ((1 - z * z) * (pp * pp))$

$W(n + 1 - i) \leftarrow W(i)$

fim

fim

se n for ímpar **então**

$X(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow 0$

$pp2 \leftarrow (n + lam2 - 1) * (n + lam2 - 1) * (\Gamma(0,5 * (n - 1) + \lambda) / (\Gamma(\lambda) * \Gamma(0,5 * (n + 1))))^2$ {derivada do polinômio ao quadrado em $x = 0$ por (3.13)}

$W(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow cte/pp2$

fim

Algoritmo 9: Método de Newton-Raphson com polinômio mônico (tipo III)

Entrada: Número n de pontos e parâmetro $\lambda \in (0, 1)$

Saída: Vetores X e W contendo os pontos e os pesos, $X(1) > X(2) > \dots > X(n)$

$lam2 \leftarrow \lambda + \lambda$, $cte \leftarrow 4^{(1-n-\lambda)} * \pi * \Gamma(n + lam2) * \Gamma(n + 1) / \Gamma^2(n + \lambda)$

$C \leftarrow$ coeficientes de $\widehat{P}_n^{(\lambda)}$ {por (3.5)}

$CD \leftarrow$ coeficientes de $\widehat{P}_n^{(\lambda)'}$

se $n > 1$ **então**

para $i \leftarrow 1$ **até** $\lfloor n/2 \rfloor$ **faça**

$z \leftarrow \cos((i - 0,5 * (1 - \lambda)) / (n + \lambda) * \pi)$ aproximação inicial para o i -ésimo zero

repita

$p1 \leftarrow \widehat{P}_n^{(\lambda)}(z)$ {pelo método de Horner com C }

$pp \leftarrow \widehat{P}_n^{(\lambda)'}(z)$ {pelo método de Horner com CD }

$z1 \leftarrow z$

$z \leftarrow z1 - p1/pp$

até $|z - z1| < \textit{tolerância}$ **ou** número máximo de iterações ser atingido;

$X(i) \leftarrow z$

$X(n + 1 - i) \leftarrow -z$

$W(i) \leftarrow cte / ((1 - z * z) * (pp * pp))$

$W(n + 1 - i) \leftarrow W(i)$

fim

fim

se n for ímpar **então**

$X(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow 0$

$pp2 \leftarrow 4/\pi * (\Gamma(0,5 * (n + 1) + \lambda) * \Gamma(0,5 * n + 1) / \Gamma(n + \lambda))^2$ {derivada do polinômio ao quadrado em $x = 0$ por (3.13) e (3.2)}

$W(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow cte/pp2$

fim

Algoritmo 10: Método de Newton-Raphson com polinômio ortonormal (tipo III)**Entrada:** Número n de pontos e parâmetro $\lambda \in (0, 1)$ **Saída:** Vetores X e W contendo os pontos e os pesos, $X(1) > X(2) > \dots > X(n)$ $lam2 \leftarrow \lambda + \lambda$, $cte \leftarrow 2 * (n + \lambda)$ $C \leftarrow$ coeficientes de $P_n^{(\lambda)}$ {por (3.6)} $CD \leftarrow$ coeficientes de $P_n^{(\lambda) \prime}$ **se** $n > 1$ **então** **para** $i \leftarrow 1$ **até** $\lfloor n/2 \rfloor$ **faça** $z \leftarrow \cos((i - 0,5 * (1 - \lambda)) / (n + \lambda) * \pi)$ aproximação inicial para o i -ésimo zero **repita** $p1 \leftarrow P_n^{(\lambda)}(z)$ {pelo método de Horner com C } $pp \leftarrow P_n^{(\lambda) \prime}(z)$ {pelo método de Horner com CD } $z1 \leftarrow z$ $z \leftarrow z1 - p1/pp$ **até** $|z - z1| < \textit{tolerância}$ **ou** número máximo de iterações ser atingido; $X(i) \leftarrow z$ $X(n + 1 - i) \leftarrow -z$ $W(i) \leftarrow cte / ((1 - z * z) * (pp * pp))$ $W(n + 1 - i) \leftarrow W(i)$ **fim****fim****se** n for ímpar **então** $X(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow 0$ $pp2 \leftarrow 2^{(lam2+1)} * (n + \lambda) / (\pi * (n + lam2 - 1) * (\Gamma(0,5 * (n + 1) + \lambda) / \Gamma(0,5 * (n + 1)))^2 *$ $\Gamma(n + 1) / \Gamma(n + lam2 - 1)$ {derivada do polinômio ao quadrado em $x = 0$ por (3.13) e (3.3)} $W(\lfloor n/2 \rfloor + 1) \leftarrow cte/pp2$ **fim**

Referências

- [1] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Applied mathematics series. Dover Publications, 1964.
- [2] S. Ahmed, A. Laforgia, and M. E. Muldoon. On the spacing of the zeros of some classical orthogonal polynomials. *Journal of the London Mathematical Society*, 2(2):246–252, 1982.
- [3] S. Ahmed, M. E. Muldoon, and R. Spigler. Inequalities and numerical bounds for zeros of ultraspherical polynomials. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 17(4):1000–1007, 1986.
- [4] E. X. L. Andrade, C. F. Bracciali, and A. S. Ranga. *Polinômios que satisfazem uma Relação de Recorrência de Três Termos*, volume 74 of *Notas em Matemática Aplicada*. São Carlos, 2014.
- [5] I. Area, D. K. Dimitrov, E. Godoy, and F. R. Rafaeli. Inequalities for zeros of Jacobi polynomials via Obrechhoff’s theorem. *Math. Comput.*, 81(278), 2012.
- [6] I. Area, D. K. Dimitrov, E. Godoy, and A. Ronveaux. Zeros of Gegenbauer and Hermite polynomials and connection coefficients. *Mathematics of Computation*, 73(248):pp. 1937–1951, 2004.
- [7] K. E. Atkinson. *An Introduction to Numerical Analysis*. John Wiley & Sons, 1978.
- [8] J. S. Avery. *Hyperspherical Harmonics: Applications in Quantum Theory*. Reidel Texts in the Mathematical Sciences. Springer Netherlands, 1989.
- [9] I. Bogaert. Iteration-free computation of Gauss-Legendre quadrature nodes and weights. *SIAM J. Sci. Comput.*, 36(3):A1008–A1026, 2014.

-
- [10] C. F. Bracciali and E. X. L. Andrade. Zeros de polinômios ortogonais: Interpretação eletrostática e análise de frequências. UFG, 2006.
- [11] C. E. Buell. The zeros of Jacobi and related polynomials. *Duke Mathematical Journal*, 2:304–316, 1936.
- [12] F. Cajori. Historical note on the Newton-Raphson method of approximation. *The American Mathematical Monthly*, 18(2):pp. 29–32, 1911.
- [13] T. S. Chihara. *An Introduction to Orthogonal Polynomials*. Gordon and Breach, 1978.
- [14] G. Dahlquist and Å. Björck. *Numerical Methods*. Dover Books on Mathematics. Dover Publications, 2003.
- [15] P. Davis and P. Rabinowitz. Abscissas and weights for gaussian quadratures of high order. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 56(1):35–37, 1956.
- [16] P. Davis and P. Rabinowitz. Additional abscissas and weights for gaussian quadratures of high order. values for $n= 64, 80, \text{ and } 96$. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 60(6):613–614, 1958.
- [17] P. J. Davis and P. Rabinowitz. *Methods of Numerical Integration*. Academic Press, Orlando, 1984.
- [18] B. P. Demidovich and I. A. Maron. *Computational Mathematics*. Mir Pub., Moscow, 1976.
- [19] D. K. Dimitrov and G. P. Nikolov. Sharp bounds for the extreme zeros of classical orthogonal polynomials. *Journal of Approximation Theory*, 162(10):1793–1804, 2010.
- [20] D. K. Dimitrov and R. O. Rodrigues. On the behaviour of zeros of Jacobi polynomials. *Journal of Approximation Theory*, 116(2):224–239, 2002.
- [21] Á. Elbert. Some recent results on the zeros of Bessel functions and orthogonal polynomials. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 133:65–83, August 2001. 10.1016/S0377-0427(00)00635-X.
- [22] Á. Elbert and A. Laforgia. Asymptotic formulas for ultraspherical polynomials $P_n^{(\lambda)}$ and their zeros for large values of λ . *Proceedings of the American Mathematical Society*, 114(2):pp. 371–377, 1992.

- [23] Á. Elbert, A. Laforgia, and L. G. Rodonó. On the zeros of Jacobi polynomials. *Acta Mathematica Hungarica*, 64(4):351–359, 1994.
- [24] Á. Elbert and A. Laforgia. Upper bounds for the zeros of ultraspherical polynomials. *Journal of Approximation Theory*, 61(1):88 – 97, 1990.
- [25] Á. Elbert and P. D. Siafarikas. Monotonicity properties of the zeros of ultraspherical polynomials. *Journal of approximation theory*, 97(1):31–39, 1999.
- [26] K. J. Förster and K. Petras. Inequalities for the zeros of ultraspherical polynomials and Bessel functions. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 73(9):232–236, 1993.
- [27] L. Gatteschi. On the construction of some gaussian quadrature rules. In G. Hämmerlin, editor, *Numerische Integration*, volume 45 of *International Series of Numerical Mathematics / Internationale Schriftenreihe zur Numerischen Mathematik / Série Internationale D’Analyse Numérique*, pages 138–146. Birkhäuser Basel, 1979.
- [28] L. Gatteschi. Una nuova rappresentazione asintotica dei polinomi ultrasferici. *CAL-COLO*, 16(4):447–458, 1979.
- [29] L. Gatteschi. On the zeros of Jacobi polynomials and Bessel functions. In *International conference on special functions: theory and computation (Turin, 1984)*. *Rend. Sem. Mat. Univ. Politec. Torino (Special Issue)*, pages 149–177, 1985.
- [30] L. Gatteschi. New inequalities for the zeros of Jacobi polynomials. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 18(6):1549–1562, November 1987.
- [31] W. Gautschi. *Orthogonal polynomials: computation and approximation*. Oxford university press, 2004.
- [32] A. Glaser, L. Xiangtao, and V. Rokhlin. A fast algorithm for the calculation of the roots of special functions. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 29(4):1420 – 1438, 2007.
- [33] G. H. Golub and J. H. Welsch. Calculation of Gauss quadrature rules. *Mathematics of Computation*, 23(106):pp. 221–230+s1–s10, 1969.
- [34] N. Hale and A. Townsend. Fast and accurate computation of Gauss–Legendre and Gauss–Jacobi quadrature nodes and weights. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 35(2):A652 – A671, 2013.

- [35] F. B. Hildebrand. *Introduction to Numerical Analysis*. McGraw-Hill, 1956.
- [36] E. Isaacson and H. B. Keller. *Analysis of Numerical Methods*. Dover Books on Mathematics. Dover Publications, 1994.
- [37] T. H. Koornwinder. The addition formula for Jacobi polynomials I summary of results. *Indagationes Mathematicae (Proceedings)*, 75(2):188–191, 1972.
- [38] V. I. Krylov. *Approximate Calculation of Integrals*. Macmillan Co., New York, 1962.
- [39] A. Laforgia. Sugli zeri delle funzioni di Bessel. *Calcolo*, 17:211–220, 1980. 10.1007/BF02576701.
- [40] F. G. Lether. On the construction of Gauss-Legendre quadrature rules. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 4(1):47–52, 1978.
- [41] Y. C. Lun and F. R. Rafeali. Inequalities for zeros of Jacobi polynomials via Sturm’s theorem: Gautschi’s conjectures. *Numerical Algorithms*, 67(3):549–563, 2014.
- [42] L. L. Peixoto. Quadratura de Gauss iterativa com base nos polinômios ortogonais clássicos. Master’s thesis, CEFET-MG, Belo Horizonte, Dez. 2008.
- [43] K. Petras. On the computation of the Gauss–Legendre quadrature formula with a given precision. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 112(1–2):253 – 267, 1999.
- [44] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2007.
- [45] T. J. Stieltjes. Sur les racines de l’équation $X_n = 0$. *Acta Math.*, (9):385–400, 1886.
- [46] A. H. Stroud and D. Secrest. *Gaussian quadrature formulas*. Prentice-Hall series in automatic computation. Prentice-Hall, 1966.
- [47] P. N. Swarztrauber. On computing the points and weights for Gauss–Legendre quadrature. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 24(3):945–954, 2003.
- [48] G. Szegő. Inequalities for the zeros of Legendre polynomials and related functions. *Transactions of the American Mathematical Society*, 39(1):1–17, 1936.
- [49] G. Szegő. *Orthogonal Polynomials*. Colloquium Publications - American Mathematical Society. American Mathematical Society, 4th edition, 1975.

-
- [50] A. Townsend. The race to compute high-order Gauss–Legendre quadrature. *SIAM NEWS*, 2015.
- [51] F. G. Tricomi. Sugli zeri dei polinomi sferici ed ultrasferici. *Annali di Matematica Pura ed Applicata*, 31(1):93–97, 1950.
- [52] H. S. Wilf. *Mathematics for the Physical Sciences*. Wiley, New York, 1962.
- [53] E. Yakimiw. Accurate computation of weights in classical Gauss-Christoffel quadrature rules. *Journal of Computational Physics*, 129(2):406 – 430, 1996.