Vanessa Gonçalves Paschoa Ferraz

Zeros de Polinômios Ortogonais de Variável Discreta

Campinas 2012

Universidade Estadual de Campinas Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica

Vanessa Gonçalves Paschoa Ferraz

Zeros de Polinômios Ortogonais de Variável Discreta

TESE de DOUTORADO APRESENTADA AO INS-TITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA DA UNICAMP PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE DOUTOR EM MATEMÁ-TICA APLICADA.

Orientador: Prof. Dr. Dimitar Kolev Dimitrov

Coorientador: Prof. Dr. Roberto Andreani

Este exemplar corresponde à versão final da tese defendida por Vanessa Gonçalves Paschoa Ferraz, e orientada pelo Prof. Dr. Dimitar Kolev Dimitrov.

k. Dimitrov Dimitar

Prof. Dr. Dimitar Kolev Dimitrov

Prof. Dr. Roberto Andreani

Campinas, 2012.

Este trabalho teve apoio financeiro da CAPES.

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA POR MARIA FABIANA BEZERRA MULLER - CRB8/6162 BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA - UNICAMP

| Paschoa, Vanessa Gonçalves, 1986- |
|---|
| P262z Zeros de polinômios ortogonais de variável discreta / Vanessa |
| Gonçalves Paschoa Ferraz. – Campinas, SP : [s.n.], 2012. |
| Orientador: Dimitar Koley Dimitroy |
| Chentador. Dimital Kolev Dimitrov. |
| Coorientador: Roberto Andreani. |
| Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, |
| Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. |
| |
| 1. Polinômios ortogonais. 2. Equações - Raízes. I. Dimitrov, |
| Dimitar Koley, II, Andreani, Roberto, 1961-, III, Universidade |
| Estadual de Campinas, Institute de Matemática, Estatística e |
| Estadual de Campinas. Instituto de Matematica, Estatística e |
| Computação Científica. IV. Título. |
| |

Informações para Biblioteca Digital

Título em inglês: Zeros of orthogonal polynomials of discrete variable Palavras-chave em inglês: Orthogonal polynomials Roots of equations Área de concentração: Matemática Aplicada Titulação: Doutor em Matemática Aplicada Banca examinadora: Dimitar Kolev Dimitrov [Orientador] Cassio Machiaveli Oishi Fernando Rodrigo Rafaéli José Plínio de Oliveira Santos Sônia Maria Gomes Data de defesa: 15-03-2012 Programa de Pós-Graduação: Matemática Aplicada Tese de Doutorado defendida em 15 de março de 2012 e aprovada

Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.

DIMITAR KOLEV DIMITROV Prof(a). P of(a). Dr(a). SÔNIA/MARIA GOMES 0 Prof(a). Dr(a). JOSÉ PLÍNIO DE OLIVEIRA SANTOS

Prof(a). Dr(a). FERNANDO RODRIO AFAÉLI

Prof(a). Dr(a). CASSIO MACHIAVELI OISHI

A todos os interessados e apaixonados em aprender e compreender a linguagem do universo, também chamada de matemática, e àqueles que contribuíram para que eu gostasse tanto de matemática, dedico.

Agradecimentos

Agradeço imensamente ao meu orientador, Prof. Dr. Dimitar Kolev Dimitrov, por ter sido guia tão entusiasmado e tão esclarecedor nesses sete anos de convívio. Inúmeras vezes, preferiu simplesmente nos incentivar e animar em frente às barreiras que cada um de nós encontrava e, além disso, sempre aborda os problemas matemáticos com uma visão abrangente, influenciando-nos a enxergar de um modo diferente. Agradeço por esse período de grande aprendizagem matemática e também por compartilhar muitas histórias no café, com os demais colegas do grupo.

Aos meus pais, Luis e Edith, agradeço por permitiram me dedicar aos estudos, isso inclui, o esforço do meu pai em nos oferecer bons colégios, a organização de tantas coisas pela minha mãe, por me lembrar dos valores mais importantes e por acreditarem em nossa capacidade. Lembro também dos meus irmãos, Bruno, com quem cresci e tantas vezes conversamos sobre ciência, e minha irmã Andressa, que sente alegria pelas minhas conquistas.

Minha grande gratidão ao Renan, meu companheiro de todos os momentos, dos mais felizes aos mais angustiantes. Minha vida seria muito diferente sem sua presença. Obrigada pelo apoio e amor.

Não posso deixar de mencionar minha gratidão aos professores Prof. Dr. Alagacone Sri Ranga, pelos ensinamentos e pela amizade, Profa. Dra. Cleonice Fátima Bracciali, pelo carinho, atenção e amizade e Profa. Dra. Eliana Xavier L. de Andrade, pelo incentivo e amizade, além de cada aluno do grupo de pesquisa: Yen Chi Lun, amigo desde a iniciação científica, Fernando R. Rafaeli, hoje professor doutor do IBILCE-UNESP e que participa da banca examinadora, cujo ânimo nos contagia, Fábio R. Lucas, Heron M. Félix, Eliel José C. dos Santos, Mirela V. de Melo, que é companheira desde o doutorado sanduíche, Regina S. Lamblém, Marisa Costa e Guilherme L. F. da Silva. O convívio com o grupo foi fundamental na minha formação.

Lembro dos professores Prof. Dr. Miguel A. Piñar, Profa. Dra. Teresa E. Pérez e Profa. Dra. Lídia Fernandez, de Granada, Espanha, por receberem a Mirela e a mim, com muito carinho, e também, do Prof. Dr. Andrei Martinez-Finkelshtein, que nos recebeu gentilmente em Almería, Espanha.

Esta tese teve a participação do Prof. Dr. Eduardo Godoy e do Prof. Dr. Iván Area, de Vigo, Espanha, os quais tive o privilégio de conhecer e de trabalhar junto aqui no Brasil. Agradeço especialmente às correções feitas no exame de qualificação pelo Prof. Iván.

Agradeço ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da UNICAMP, ao meu co-orientador Prof. Dr. Roberto Andreani, pela parte burocrática, ao coordenador do Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada nos anos de 2008–2010, Prof. Dr. Aurélio Ribeiro L. de Oliveira pelo seu apoio, e à secretaria de Pós-Graduação, em especial à Tânia por toda ajuda e atenção. Agradeço aos meus colegas da UNICAMP, cujo convívio me beneficiou, em especial na república.

À UNESP de São José do Rio Preto, onde me graduei, e aos professores agradeço, e por toda estrutura fornecida, especialmente ao Departamento de Ciências da Computação e Estatística, por ter concedido espaço físico durante o doutorado.

Agradeço aos membros da Banca Examinadora por aceitarem o convite de participar da defesa desta tese de doutorado.

Devo mencionar também, meu agradecimento à FAPESP, pelo apoio financeiro na iniciação científica, e à CAPES, pela bolsa de doutorado e pela bolsa de doutorado sanduíche.

E acima de tudo, sou grata a Deus, o criador, a ele toda a glória da minha existência.

Resumo

Neste trabalho estudamos o comportamento de zeros de polinômios ortogonais clássicos de variável discreta. Provamos que certas funções que envolvem os zeros dos polinômios de Charlier, Meixner, Kravchuck e Hahn são funções monótonas dos parâmetros dos quais os correspondentes polinômios dependem. Com esse resultado obtemos novos limitantes extremamente precisos para os zeros dessas famílias de polinômios em função dos zeros dos polinômios ortogonais clássicos, que são mais estudados. Analisamos quais são os melhores limitantes explícitos para os zeros desses polinômios e aplicamos aos nossos resultados, obtendo assim limitantes explícitos para os zeros dos polinômios de Charlier, Meixner, Kravchuck e Hahn. São feitas comparações entre os nossos resultados e os melhores resultados encontrados na literatura para os zeros desses polinômios e verifica-se que nossos limitantes são, em uma grande parte, melhores. Devido à sua grande aplicabilidade, um estudo ainda mais minucioso foi feito para os zeros dos polinômios de Gram, um caso particular de Hahn, que resultou em limitantes para os zeros dos polinômios de Gram. Experimentos numéricos comprovam a qualidade dos resultados.

Palavras-chave: polinômios ortogonais, polinômios ortogonais de variável discreta, polinômios de Charlier, polinômios de Meixner, polinômios de Kravchuck, polinômios de Hahn, polinômios de Gram, zeros, monotonicidade, limitantes.

Abstract

In this thesis we study the behavior of zeros of classical orthogonal polynomials of discrete variable. We prove that certain functions which involve the zeros of polynomials of Charlier, Meixner, Kravchuck and Hahn are monotonic with respect to the parameters on which the polynomials depend. As a consequence of these results we obtain new extremely precise limits for the zeros of the above polynomials in terms of zeros of classical orthogonal polynomials of continuous variable which have been studied thoroughly. We analyse the best bounds for the latter zeros and apply them to obtain explicit limits for the zeros of the polynomials of Charlier, Meixner, Kravchuck and Hahn. Comparisons with the best results known in the literature show that our results are better in most of the cases. Due to its applications, we perform a very detailed study of the zeros of Gram polynomials.

Key words: orthogonal polynomials, orthogonal polynomials of discrete variable, Charlier polynomials, Meixner polynomials, Kravchuck polynomials, Hahn polynomials, Gram polynomials, zeros, monotonicity, bounds.

Sumário

| 1 | Intr | rodução | 1 |
|--|-----------------------|---|-----|
| 2 | Polinômios ortogonais | | |
| | 2.1 | Propriedades de polinômios ortogonais | 10 |
| 2.2 Zeros de polinômios ortogonais | | Zeros de polinômios ortogonais | 20 |
| | | 2.2.1 Fórmula de quadratura de Gauss | 23 |
| | 2.3 | Polinômios ortogonais de variável contínua e de variável discreta | 26 |
| | | 2.3.1 Famílias clássicas de polinômios ortogonais | 31 |
| 3 | Teo | remas para monotonicidade dos zeros | 33 |
| 4 Limitantes para zeros de polinômios ortogonais de variável conti | | | |
| | 4.1 | Polinômios de Hermite | 46 |
| | 4.2 | Polinômios de Laguerre | 48 |
| | 4.3 | Polinômios de Jacobi | 49 |
| 5 Lin | | itantes para zeros de polinômios ortogonais de variável discreta | 51 |
| | 5.1 | Polinômios de Charlier | 54 |
| | 5.2 | Polinômios de Meixner | 63 |
| | 5.3 | Polinômios de Kravchuck | 73 |
| | 5.4 | Polinômios de Hahn | 92 |
| | 5.5 | Polinômios de Gram | 106 |
| | | 5.5.1 Decomposição quadrática dos polinômios de Gram | 109 |

| 6 | Conclusão | e projetos | 141 |
|---|-----------|----------------------|-----|
| | 5.5.4 | Resultados Numéricos | 131 |
| | 5.5.3 | Grau ímpar | 121 |
| | 5.5.2 | Grau par | 110 |

Capítulo 1

Introdução

Dois problemas utilizados com muita frequência na Matemática Aplicada, Física e Engenharia são o de integração numérica e de representação de dados através do método dos mínimos quadrados. Integração numérica possui tantas aplicações técnicas que em algumas línguas os antecessores dos atuais "chips" eram chamados de "esquemas integrais". Similarmente, quando físicos e engenheiros recolhem alguns dados empíricos e desejam reconhecer os parâmetros do processo ou fenômeno que gera estes dados, e sobre o qual eles têm ideia geral, a primeira abordagem natural é recorrer ao método dos mínimos quadrados.

Surpreendentemente para os usuários destes métodos, um dos problemas matemáticos mais interessantes envolvido na elaboração dos métodos e dos correspondentes algoritmos é o de analisar o comportamento dos zeros de certos polinômios ortogonais. Em seguida descrevemos esta inesperada mas natural conexão. Esta tese é elaborada com o propósito de estudar mais detalhadamente o comportamento dos zeros dos chamados polinômios ortogonais de variável discreta, um problema, que veremos em breve, é intimamente relacionado com as questões de cálculo aproximado de somas e séries e da solução do problema dos mínimos quadrados.

Os métodos lineares para cálculo aproximado de uma integral são chamados

fórmulas de quadratura. Suponha que gostaríamos de aproximar a integral

$$I(f) = \int_{a}^{b} f(x) \, dx,$$

em que f é uma função definida em [a, b] e suficientemente suave nesse intervalo. As fórmulas de quadratura Q(f) com n nós são combinações lineares de valores de f em n pontos, que são os nós de Q(f). Em outras palavras temos,

$$I(f) = \int_{a}^{b} f(x) \, dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_{k} \, f(t_{k}) =: Q(f).$$

Um critério natural para que uma tal Q(f) aproxime bem I(f) para as funções suaves, é que ela seja exata para os polinômios de maior possível grau. Em 1814, Gauss [17] provou que existe uma única fórmula de quadratura desta forma que é exata para todos os polinômios de grau 2n - 1, isto é, que I(f) = Q(f) para todo polinômio de grau 2n - 1. Apesar de terem sido desenvolvidas várias teorias sobre fórmulas de quadratura que são ótimas, no sentido matemático, para certas classes e espaços de funções, a descoberta de Gauss é a mais utilizada em grande parte dos pacotes de "softwares" para integração numérica. É interessante observar quais problemas matemáticos surgem para elaborarmos uma fórmula de quadratura de Gauss.

É óbvio que, dado o número natural n, o problema de determinar os n nós t_k 's e os n coeficientes A_k 's não é linear. Por outro lado, uma das principais características das fórmulas de quadratura de Gauss é que seus nós t_k , k = 1, ..., n, são exatamente os zeros do n-ésimo polinômio de Legendre $P_n(x)$, que é ortogonal em [a, b] a todos os polinômios de grau menor do que n - 1, isto é, é o polinômio que satisfaz

$$\int_{a}^{b} P_n(x) q(x) \, dx = 0$$

para todo polinômio de grau que não excede n-1.

Desta forma, se determinarmos os zeros de $P_n(x)$, o problema para elaborar a fórmula de quadratura de Gauss reduz-se somente ao cálculo dos coeficientes A_k . Agora, o problema é linear e portanto bastante acessível. Eis a primeira necessidade para estudarmos os zeros de certos polinômios ortogonais (neste caso, os polinômios de Legendre).

Vale mencionar que há vasta literatura sobre o comportamento dos zeros tanto dos polinômios de Legendre como de outros polinômios ortogonais comumente conhecidos como polinômios ortogonais clássicos de variável contínua. Dentre eles, mencionamos os polinômios de Chebyshev, Gegenbauer, Jacobi, Laguerre e Hermite, sendo os zeros de cada um desses nós de outras fórmulas de quadratura do tipo Gauss.

Consideremos um problema natural que é o cálculo aproximado de somas e séries. Suponha que gostaríamos de calcular o somatório

$$\sum_{k=1}^{N} \omega_k f(x_k),$$

sendo N um número muito grande, ou até mesmo a série

$$\sum_{k=1}^{\infty} \omega_k f(x_k).$$

Em geral, os pesos ω_k são números positivos e x_k são pontos equidistantes dados a priori, e naturalmente, a última série é convergente.

Estes problemas são intrigantes por si, pois, pensando por exemplo no problema sobre as séries, há vários critérios que garantem teoricamente suas convergências, mas há poucas séries cujas somas são conhecidas explicitamente.

No caso das somas com grande número de termos a questão é mais computacional pois podem surgir erros de cálculo numérico devido exatamente ao fato de acrescentarmos grande número de termos, de quantidade muitas vezes desproporcionais, ou da própria aproximação de cada um dos termos.

Entretanto, as questões de cálculo aproximado de somas e séries possuem uma aplicação extremamente importante na solução do problema dos mínimos quadrados. O problema na forma mais simples e provavelmente a mais usada é encontrar uma função polinomial que melhor aproxima uma tabela de dados, no sentido de minimizar na norma discreta l^2 a distância entre os dados e o polinômio aproximador. Mais precisamente, seja uma tabela de dados $(x_k, y_k), k = 1, ..., N$. Buscamos um polinômio p de graumtal que

$$\min_{p} \sum_{k=1}^{N} \left(p(x_k) - y_k \right)^2 \tag{1.1}$$

seja satisfeito. Essa abordagem quadrática é a mais viável porque a solução desse problema pode ser dada através da resolução de um sistema linear.

Se escrevemos $p(x) = a_m x^m + a_{m-1} x^{m-1} + \dots + a_0$, o problema consiste em determinar os coeficientes de $a_m, a_{m-1} \dots, a_0$ de modo que p(x) satisfaça (1.1). Evidentemente, ao estabelecermos o gradiente nulo, a solução é dada pelo sistema linear

$$\left(\begin{array}{cccc} \sum_{k=1}^{N} 1 & \sum_{k=1}^{N} x_{k} & \cdots & \sum_{k=1}^{N} x_{k}^{m} \\ \sum_{k=1}^{N} x_{k} & \sum_{k=1}^{N} x_{k}^{2} & \cdots & \sum_{k=1}^{N} x_{k}^{m+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=1}^{N} x_{k}^{m} & \sum_{k=1}^{N} x_{k}^{m+1} & \cdots & \sum_{k=1}^{N} x_{k}^{2m} \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} a_{0} \\ a_{1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ a_{m} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} \sum_{k=1}^{N} y_{k} \\ \sum_{k=1}^{N} y_{k} x_{k} \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^{N} y_{k} x_{k}^{m} \end{array}\right)$$
(1.2)

Quando a quantidade de pontos N é um número muito grande e os pontos x_k encontram-se bem distribuídos no intervalo [0, 1], a matriz do sistema anterior é aproximadamente a matriz de Hilbert, que é muito mal condicionada. A matriz de (1.2) tem elementos $a_{i,j} = \sum_{k=1}^{N} x_k^{i+j-2}$, $1 \le i, j \le m+1$. Se x_k são bem distribuídos em [0, 1], então $\sum_{k=1}^{N} x_k^{\alpha} \to \int_0^1 x^{\alpha} dx$ quando $N \to \infty$. Daí, a matriz $\{a_{i,j}\}_{1\le i,j\le m+1}$ converge para a matriz de Hilbert de ordem m+1. Por exemplo, se N = 100.000 e $x_k = k/N$ o determinante da matriz $\{a_{i,j}\}_{1\le i,j\le 4}$ é aproximadamente o mesmo da matriz de Hilbert

cujo determinante é 1,65344 10^{-7} .

Suponhamos que, para um valor m fixo, conhecemos uma sequência de polinômios $\{G_n(x)\}_{n=0}^m$ em que cada polinômio $G_n(x)$ é de grau exatamente n e que são ortogonais com relação ao produto interno $\langle p,q \rangle = \sum_{k=1}^{N} p(x_k) q(x_k)$, isto é,

 $\langle G_n, q \rangle = 0$ para todo polinômio q de grau no máximo n - 1.

Essa sequência forma uma base para os polinômios de grau m, assim podemos escrever $p(x) = c_m G_m(x) + c_{m-1}G_{m-1}(x) + \cdots + c_0 G_0(x)$. Dessa forma, p(x)satisfaz (1.1) se, e somente se, os coeficientes $c_m, c_{m-1} \dots, c_0$ são a solução do sistema

$$\begin{pmatrix} \sum_{k=1}^{N} G_0(x_k)^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sum_{k=1}^{N} G_1(x_k)^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sum_{k=1}^{N} G_m(x_k)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ c_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^{N} y_k G_0(x_k) \\ \sum_{k=1}^{N} y_k G_1(x_k) \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^{N} y_k G_m(x_k) \end{pmatrix}$$

Nesse caso, a matriz é diagonal e a solução é dada explicitamente.

Em geral as somas $\sum_{k=1}^{N} G_j(x_k)^2$, j = 0, ..., m, são conhecidas. Então, a única dificuldade é calcular as somas $\sum_{k=1}^{N} y_k G_j(x_k)$, j = 0, ..., m.

Uma forma de obter um valor aproximado para $\sum_{k=1}^{N} y_k G_j(x_k)$ é através da fórmula de quadratura de Gauss. Quando $x_k = k$, a fórmula de quadratura de Gauss Q_G , é dada por

$$\sum_{k=1}^{N} f(k) \approx Q_G(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(z_i),$$

sendo z_i os zeros do *n*-ésimo polinômio de Gram, que é ortogonal com relação a $\langle p, q \rangle = \sum_{k=1}^{N} p(k) q(k)$, e os coeficientes A_i podem ser obtidos de *n* condições que determinam um sistema linear.

Os polinômios ortogonais que são relacionados com somas ou séries são chamados polinômios ortogonais de variável discreta. Diferentemente da existência de uma grande quantidade de resultados, muitas vezes extremamente precisos, sobre a localização dos zeros dos polinômios ortogonais de variável contínua, há poucos estudos sobre as propriedades dos zeros dos polinômios ortogonais de variável discreta e alguns foram obtidos somente recentemente. Nesta tese provamos teoremas que fornecem informações sobre a monotonicidade e a localização dos zeros de todas as famílias dos polinômios ortogonais de variável discreta clássicos, que são os polinômios de Charlier, polinômios de Meixner, polinômios de Kravchuck e os polinômios de Hahn. Verificamos que, na grande maioria dos casos os nossos resultados são os melhores conhecidos até agora. Estes teoremas são estabelecidos nas seções 1 a 4 do Capítulo 5 da tese, que é baseado no artigo *I. Area, D.K. Dimitrov, E. Godoy, V.G. Paschoa* - "Zeros of classical orthogonal polynomials of a discrete variable" que foi aceito para publicação em *Mathematics of Computation* [3].

Os métodos que utilizamos para obter esses resultados são baseados nos métodos usados nos artigos de M. Ismail e outros autores [21, 23, 24], e no artigo [12]. Mas, em todas as situações que trabalhamos, precisamos acrescentar novas ideias para lidarmos com os obstáculos técnicos que surgiam, devido a natureza do comportamento dos zeros dos polinômios ortogonais clássicos de variável discreta, com relação aos seus parâmetros. Por fim, conseguimos fornecer um estudo sobre esses zeros, que implica em limitantes muito precisos para os zeros dos polinômios ortogonais clássicos de variável discreta, um tópico onde havia poucos resultados precisos.

Além disso, na Seção 5 do Capítulo 5, fornecemos um estudo minucioso sobre os zeros dos polinômios de Gram, que é um caso particular dos polinômios de Hahn, cuja motivação foi exatamente sua aplicação nas fórmulas de quadratura para somas e séries e no problema dos mínimos quadrados. Seja $G_n(x; N)$ o *n*-ésimo polinômio de Gram, e seus zeros $g_{n,1}(N), \ldots, g_{n,n}(N)$. Conseguimos obter limitantes inferiores e superiores $\check{g}_{n,k}(N) \in \hat{g}_{n,k}(N)$ para cada um dos zeros $g_{n,k}(N)$, isto é, $\check{g}_{n,k}(N) < g_{n,k}(N) <$ $\hat{g}_{n,k}(N)$. Esses resultados são baseados no artigo *I. Area, D.K. Dimitrov, E. Godoy,* V.G. Paschoa - "Bounds for the positive zeros of Gram polynomials" que está em fase final de elaboração.

Para ilustrarmos a precisão destes resultados, mencionamos o seguinte fato. Lembramos que o método de Weirstrass–Dochev é um método para cálculo aproximado simultâneo de todos os zeros de um polinômio algébrico, que é uma generalização natural do método clássico de Newton para o cálculo de zeros de funções. Experimentos numéricos que executamos para vários valores de $N \in n, n < N$, mostram que, se executarmos o método de Weirstrass–Dochev para o cálculo aproximado de $g_{n,k}(N)$, com aproximações iniciais $(\check{g}_{n,k}(N) + \hat{g}_{n,k}(N))/2$, ele converge tão rapidamente, que após a segunda iteração temos uma aproximação extremamente precisa para os zeros de $G_n(x)$, com erro menor do que 10^{-8} , e na terceira iteração com erro menor do que 10^{-14} .

Em síntese, o Capítulo 2 contém resultados conhecidos da teoria de polinômios ortogonais, o Capítulo 3 contém teoremas de monotonicidade de zeros e de autovalores de matrizes, o Capítulo 4 os melhores limitantes conhecidos para zeros de polinômios ortogonais clássicos de variável contínua, e no Capítulo 5 estão os novos resultados por nós estabelecidos, enunciados nos teoremas desse capítulo e em seus corolários, com suas demonstrações.

Capítulo 2

Polinômios ortogonais

Um polinômio algébrico de grau n é toda expressão da forma

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_2 x^2 + a_1 x + a_0,$$

com a_0, a_1, \ldots, a_n números reais. Por Π_n denotaremos o espaço vetorial dos polinômios algébricos de grau no máximo n, isto é,

$$\Pi_n := \{ p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \dots + a_n x^n : a_0, a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R} \}.$$

Dizemos que um polinômio é de grau exatamente n se $p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \cdots + a_n x^n$ e $a_n \neq 0$. Denotaremos o espaço vetorial de todos os polinômios algébricos por Π , ou seja,

$$\Pi := \bigcup_{k=0}^{\infty} \Pi_k$$

Vamos considerar o espaço vetorial de polinômios com um produto interno. Para quaisquer dois elementos $p \in q$ do espaço vetorial Π , definimos o produto interno $\langle p, q \rangle$ como sendo um número real que satisfaz às seguintes condições:

- 1) $\langle p,q\rangle \ge 0 \ \forall p,q\in \Pi$ e, $\langle p,p\rangle = 0 \Leftrightarrow p = 0$,
- 2) $\langle p,q \rangle = \langle q,p \rangle \ \forall p,q \in \Pi,$
- 3) $\langle \alpha p + \beta q, s \rangle = \alpha \langle p, q \rangle + \beta \langle q, s \rangle \ \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R} \ e \ \forall p, q, s \in \Pi.$

Seja ϕ uma função não-decrescente, não-constante e limitada em um intervalo (a, b), finito ou não, que define uma medida $d\phi$ em (a, b). Definimos o produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\phi} : \Pi \times \Pi \to \mathbb{R}$ por

$$\langle p,q \rangle_{\phi} = \int_{a}^{b} p(x)q(x)d\phi(x), \quad p,q \in \Pi,$$
(2.1)

e a correspondente norma $\|\cdot\|_{\phi}: \mathbb{P} \to [0,\infty)$ por

$$||p||_{\phi} = \sqrt{\int_{a}^{b} |p(x)|^2 d\phi(x)}, \quad p \in \Pi.$$
 (2.2)

De modo geral, consideraremos o produto interno dado por (2.1) com ϕ nas condições anteriores.

Definição 2.1. Dado um produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$ em Π , uma <u>sequência de polinômios</u> <u>ortogonais</u> é uma sequência de polinômios $P_0(x)$, $P_1(x)$, $P_2(x)$,..., finita ou infinita, com cada polinômio $P_n(x)$ de grau exatamente n que satisfaz

$$\langle P_n, P_m \rangle = 0 \quad \text{se} \quad m \neq n$$

 $\langle P_n, P_n \rangle = \rho_n > 0.$

Inicialmente, podemos obter uma sequência de polinômios ortogonais através do conhecido método de ortogonalização de Gram–Schmidt.

2.1 Propriedades básicas de polinômios ortogonais

Teorema 2.1.1 (Independência linear). Toda subsequência finita $P_{i_1}(x), P_{i_2}(x) \dots$, $P_{i_n}(x)$ de uma sequência de polinômios ortogonais $P_0(x), P_1(x), P_2(x), \dots$ é um sistema de funções linearmente independentes.

Demonstração. Supomos o contrário. Então, existe uma subsequência $P_{i_1}(x), P_{i_2}(x), \ldots, P_{i_n}(x)$ e coeficientes a_1, a_2, \ldots, a_n , com pelo menos um deles diferente de zero, tais que o polinômio $p(x) = a_1 P_{i_1}(x) + a_2 P_{i_2}(x) + \cdots + a_n P_{i_n}(x)$ é identicamente nulo. Logo,

$$\langle p, P_j \rangle = 0$$
 para todo j. (2.3)

Por outro lado, seja $k, 1 \le k \le n$, tal que a_k seja diferente de zero em $p(x) = a_1 P_{i_1}(x) + \cdots + a_n P_{i_n}(x)$, então

$$\langle p, P_{i_k} \rangle = a_1 \langle P_{i_1}, P_{i_k} \rangle + \dots + a_n \langle P_{i_n}, P_{i_k} \rangle = a_k \langle P_{i_k}, P_{i_k} \rangle.$$
(2.4)

Como $\langle P_{i_k}, P_{i_k} \rangle \neq 0$, temos uma contradição com (2.3) e (2.4). A afirmação está provada.

Teorema 2.1.2 (Base para o espaço de polinômios). Se o polinômio p(x) é de grau menor do que ou igual a n, então p pode ser unicamente representado por

$$p(x) = a_0 P_0(x) + \dots + a_n P_n(x)$$

com coeficientes reais a_0, \ldots, a_n .

Demonstração. Isto é uma consequência simples do Teorema 2.1.1. Como Π_n é um espaço linear de dimensão $n + 1 \in P_0, \ldots, P_n$ são, de acordo com o Teorema 2.1.1, n + 1 elementos linearmente independentes de Π_n , eles formam base de Π_n . Então, cada elemento de Π_n pode ser unicamente representado como combinação linear deles.

É facil obter as expressões explícitas para a_k , $k = 0, \ldots, n$. De fato, temos

$$\langle p, P_k \rangle = a_0 \langle P_0, P_k \rangle + \dots + a_k \langle P_k, P_k \rangle + \dots + a_n \langle P_n, P_k \rangle$$

= $a_k \langle P_k, P_k \rangle.$

Portanto,

$$a_k = \frac{\langle p, P_k \rangle}{\langle P_k, P_k \rangle}.$$

Teorema 2.1.3. Seja um produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$ em Π . São equivalentes:

- (a) $\{P_n(x)\}$ é uma sequência de polinômios ortogonais com respeito a $\langle \cdot, \cdot \rangle$;
- (b) $\langle p, P_n \rangle = 0$ para todo polinômio p(x) de grau menor do que $n \in \langle p, P_n \rangle \neq 0$ para todo polinômio p(x) de grau exatamente n;

(c) $\langle x^m, P_n \rangle = 0$ para $m < n \ e \ \langle x^n, P_n \rangle \neq 0.$

Demonstração. Seja $\{P_n(x)\}$ uma sequência de polinômios ortogonais com respeito a $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Se p(x) é um polinômio de grau m, então existem constantes $c_{m,k}$ tais que

$$p(x) = \sum_{k=0}^{m} c_{m,k} P_k(x), \quad c_{m,m} \neq 0.$$

Pela linearidade do produto interno,

$$\langle p, P_n \rangle = \sum_{k=0}^m c_{m,k} \langle P_k, P_n \rangle = \begin{cases} 0 & \text{se } m < n, \\ c_{n,n} \langle P_n, P_n \rangle \neq 0 & \text{se } m = n. \end{cases}$$

Deste modo $(a) \Rightarrow (b)$. Claramente $(b) \Rightarrow (c)$ e também é fácil ver que $(c) \Rightarrow (a)$. \Box

Teorema 2.1.4 (Projeção ortogonal). Seja $\{P_n\}$ uma sequência de polinômios ortogonais com relação a um produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$ e f(x) uma função do completamento de Π com relação à norma induzida por $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Então,

$$\inf_{g \in \Pi_j} \|f(x) - g(x)\|^2$$

é atingido se, e somente se,

$$g(x) = c_0 P_0(x) + c_1 P_1(x) + \ldots + c_j P_j(x).$$

sendo

$$c_k = \frac{\langle f, P_k \rangle}{\langle P_k, P_k \rangle}, \quad k = 0, 1, \dots, j.$$

Esse teorema diz respeito a melhor aproximação de uma função por polinômio. Esse é um dos principais problemas da Análise Numérica, aproximar uma função complicada por uma função simples, de fácil manuseio, como um polinômio. Temos nesse teorema uma forma explícita da melhor aproximação polinomial para uma função qualquer. Esta é uma importante aplicação de uma sequência de polinômios ortogonais. Observe que o melhor aproximante depende essencilamente do produto interno que usamos. **Teorema 2.1.5** (Existência de sequência de polinômios ortogonais). A condição necessária e suficiente para a existência de uma sequência de polinômios ortogonais associada ao produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$ é

$$\Delta_{n} := \begin{vmatrix} \langle 1, 1 \rangle & \langle 1, x \rangle & \langle 1, x^{2} \rangle & \dots & \langle 1, x^{n} \rangle \\ \langle x, 1 \rangle & \langle x, x \rangle & \langle x, x^{2} \rangle & \dots & \langle x, x^{n} \rangle \\ \langle x^{2}, 1 \rangle & \langle x^{2}, x \rangle & \langle x^{2}, x^{2} \rangle & \dots & \langle x^{2}, x^{n} \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle x^{n}, 1 \rangle & \langle x^{n}, x \rangle & \langle x^{n}, x^{2} \rangle & \dots & \langle x^{n}, x^{n} \rangle \end{vmatrix} \neq 0$$
(2.5)

para $n = 0, 1, 2, \dots$

Além disso, cada sequência de polinômios ortogonais fica unicamente determinada pela escolha dos valores $K_n = \langle x^n, P_n \rangle \neq 0$. Ainda, se duas sequências de polinômios, $\{P_n(x)\} \in \{Q_n(x)\}$, são ortogonais com relação ao mesmo produto interno então para cada $n \ge 0$ existe uma constante c_n tal que $Q_n(x) = c_n P_n(x)$.

Demonstração. Para n = 0, 1, 2, ... escreva $P_n(x) = \sum_{k=0}^n a_{n,k} x^k$. Supondo $\Delta_n \neq 0$, vamos determinar os valores $a_{k,n}$ de modo que $\{P_n(x)\}$ seja uma sequência de polinômios ortogonais. Temos que,

$$\langle x^m, P_n \rangle = \sum_{k=0}^n a_{n,k} \langle x^m, x^k \rangle.$$
(2.6)

Fazendo m = 0, 1, ..., n na igualdade acima e usando a condição (c) do Teorema 2.1.3 temos n + 1 condições para a existência de sequência de polinômios ortogonais, que escrevemos de forma matricial

$$\begin{pmatrix} \langle 1,1\rangle & \langle 1,x\rangle & \langle 1,x^2\rangle & \dots & \langle 1,x^n\rangle \\ \langle x,1\rangle & \langle x,x\rangle & \langle x,x^2\rangle & \dots & \langle x,x^n\rangle \\ \langle x^2,1\rangle & \langle x^2,x\rangle & \langle x^2,x^2\rangle & \dots & \langle x^2,x^n\rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle x^n,1\rangle & \langle x^n,x\rangle & \langle x^n,x^2\rangle & \dots & \langle x^n,x^n\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{0,n} \\ a_{1,n} \\ a_{2,n} \\ \vdots \\ a_{n,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \langle x^n,P_n\rangle \end{pmatrix}.$$
(2.7)

Como $\Delta_n \neq 0$, para cada escolha do valor $\langle x^n, P_n \rangle \neq 0$ ficam determinados os coeficientes $a_{k,n}$ de tal forma que o sistema acima é satisfeito. Olhando para (2.6), esses coeficientes implicam que $\langle x^m, P_n \rangle = 0$ se m < n e $\langle x^n, P_n \rangle$ é o valor escolhido diferente de zero. Portanto, $\{P_n(x)\}$ é uma sequência de polinômios ortogonais.

Agora, seja $\{P_n(x)\}$ uma sequência de polinômios ortogonais com $\langle x^n, P_n \rangle = K_n$. Para cada *n* escrevemos $P_n(x) = \sum_{k=0}^n a_{n,k} x^k$. Pela ortogonalidade de $\{P_n(x)\}$ e (2.6),

 $(a_{n,0}, a_{n,1}, \dots, a_{n,n})^T$ é solução de (2.7).

Seja $(b_{n,0}, b_{n,1}, \dots, b_{n,n})^T$ outra solução para (2.7). Escrevendo $Q_n(x) = \sum_{k=0}^n b_{n,k} x^k$ temos que

$$\langle x^m, Q_n \rangle = \sum_{k=0}^n b_{n,k} \langle x^m, x^k \rangle$$

Como $(b_{n,0}, b_{n,1}, \ldots, b_{n,n})^T$ é solução para o sistema (2.7), temos que $\langle x^m, Q_n \rangle = 0$ para m < n e $\langle x^n, Q_n \rangle = \langle x^n P_n \rangle = K_n$. Logo $\{Q_n(x)\}$ é uma sequência de polinômios ortogonais com relação a $\langle \cdot, \cdot \rangle$ com $\langle x^n, Q_n \rangle = K_n$.

Podemos escrever $Q_n(x) = \sum_{k=0}^n c_{n,k} P_k(x)$ e pela ortogonalidade de $\{P_n(x)\}$ e $\{Q_n(x)\}$ obtemos

 $0 = \langle P_m, Q_n \rangle = c_{n,m} \langle P_m, P_m \rangle, \quad \text{para} \quad m = 0, 1, \dots, n-1.$

Portanto, $c_{n,m} = 0$ para $m = 0, 1, \ldots, n-1$. Assim, $Q_n(x) = c_{n,n}P_n(x)$. Mas

$$\langle x^n, Q_n \rangle = c_{n,n} \langle x^n, P_n \rangle.$$

Logo $c_{n,n} = 1$, pois $\langle x^n, Q_n \rangle = \langle x^n, P_n \rangle = K_n$. Concluímos então que $Q_n \equiv P_n$, para todo n. Deste modo a solução do sistema (2.7) é única, portanto $\Delta_n \neq 0$.

Por fim, sejam $\{P_n(x)\}$ e $\{Q_n(x)\}$ sequências de polinômios ortogonais com relação a $\langle \cdot, \cdot \rangle$ com $\langle x^n, Q_n \rangle \neq \langle x^n, P_n \rangle$. Escrevemos $Q_n(x)$ como $Q_n(x) = \sum_{k=0}^n c_{n,k} P_k(x)$. Para m < n, pela ortogonalidade de ambas as sequências temos

$$0 = \langle Q_m, Q_n \rangle = c_{n,m} \langle Q_m, P_m \rangle.$$

Logo, $c_{n,m} = 0$ para m < n, pois $\langle Q_m, P_m \rangle \neq 0$. Portanto, $Q_n(x) = c_{n,n}P_n(x)$. O valor de $c_{n,n}$ é dado por

$$\langle Q_n, Q_n \rangle = c_{n,n} \langle Q_n, P_n \rangle.$$

Logo, $c_{n,n} = \langle Q_n, Q_n \rangle / \langle Q_n, P_n \rangle.$

Definição 2.2. A sequência de polinômios $\{P_n\}$ é chamada <u>sequência de polinômios</u> <u>ortonormais</u> se

$$\langle P_n, P_m \rangle = \delta_{n,m}, \quad n, m = 0, 1, \dots$$

sendo $\delta_{n,m}$ o delta de Kronecker que é definido por

$$\delta_{n,m} = \begin{cases} 0 & se \quad n \neq m, \\ 1 & se \quad n = m. \end{cases}$$

Uma importante característica dos polinômios ortogonais é que quaisquer três consecutivos polinômios estão conectados através de uma simples relação.

Teorema 2.1.6 (Relação de recorrência de três termos). Os polinômios ortogonais satisfazem a relação de três termos

$$xP_k(x) = \gamma_k P_{k+1}(x) + \beta_k P_k(x) + \delta_k P_{k-1}(x), \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$
(2.8)

com condições iniciais $P_{-1}(x) := 0$, $P_0(x) = 1 e \gamma_k \delta_{k+1} > 0$.

Demonstração. Como $\{P_k(x)\}_{k=0}^N$ é base para Π_N , escrevemos para k < N fixo,

$$xP_k(x) = \sum_{j=0}^{k+1} b_j^{(k)} P_j(x).$$
(2.9)

Vamos mostrar que $b_j^{(k)} = 0$ para $j = 0, 1, \dots, k-2$ e que $\gamma_k \delta_{k+1} = b_{k+1}^{(k)} b_k^{(k+1)} > 0.$

Pelas relações de ortogonalidade

$$\int_{a}^{b} P_{j}(x)xP_{k}(x)d\phi(x) = b_{j}^{(k)}\int_{a}^{b} P_{j}(x)P_{j}(x)d\phi(x),$$
(2.10)

para j = 0, 1, ..., k.

Para $j \leq k - 2$, $P_j(x)x$ terá grau no máximo k - 1. Então, pela ortogonalidade, o lado esquerdo da equação anterior é

$$\int_{a}^{b} P_j(x) x P_k(x) d\phi(x) = 0.$$

Logo $b_j^{(k)} = 0$ para $j \le k - 2$.

Para j = k + 1, temos que

$$\int_{a}^{b} P_{k+1}(x) x P_{k}(x) d\phi(x) = b_{k+1}^{(k)} \int_{a}^{b} P_{k+1}(x)^{2} d\phi(x).$$

Considere agora (2.9) e (2.10) com k + 1 no lugar de $k, k \leq N - 1$. A expressão (2.10) com k + 1 no lugar de k e j = k é

$$\int_{a}^{b} P_{k}(x) x P_{k+1}(x) d\phi(x) = b_{k}^{(k+1)} \int_{a}^{b} P_{k}(x)^{2} d\phi(x)$$

Multiplicando as duas expressões anteriores obtemos que $b_{k+1}^{(k)}b_k^{(k+1)} > 0$, como queríamos.

Corolário 2.1.1. Seja $\{P_n(x)\}_{n=0}^N$ uma sequência de polinômios ortogonais com relação à medida $d\phi(x)$ no intervalo (a,b), satisfazendo (2.8), e seja $\mu_0 := \int_a^b d\phi(x)$. Uma sequência de polinômios ortonormais é dada por

$$p_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\mu_0}}, \quad p_k(x) = \left(\frac{\gamma_0 \gamma_1 \dots \gamma_{k-1}}{\mu_0 \delta_1 \delta_2 \dots \delta_k}\right)^{1/2} P_k(x), \quad k \ge 1$$

satisfazendo a relação de recorrência de três termos

$$xp_k(x) = a_k p_{k+1}(x) + b_k p_k(x) + a_{k-1} p_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \dots,$$
(2.11)

com

$$a_k = \sqrt{\gamma_k \, \delta_{k+1}}, \quad b_k = \beta_k.$$

Demonstração. É evidente que $\int_a^b p_0(x)^2 d\phi(x) = 1$. Também é fácil observar que $\int_a^b p_n(x)p_m(x)d\phi(x) = 0$, para $n \neq m$, pois $p_k(x)$ é múltiplo de $P_k(x)$, para todo k.

Agora, para $k \ge 1$, multiplicando a equação (2.8) por x^{k-1} , obtemos

$$x^{k}P_{k}(x) = \gamma_{k}x^{k-1}P_{k+1}(x) + \beta_{k}x^{k-1}P_{k}(x) + \delta_{k}x^{k-1}P_{k-1}(x)$$

Daí, temos que,

$$\int_{a}^{b} x^{k} P_{k}(x) d\phi(x) = \int_{a}^{b} \left(\gamma_{k} x^{k-1} P_{k+1}(x) + \beta_{k} x^{k-1} P_{k}(x) + \delta_{k} x^{k-1} P_{k-1}(x) \right) d\phi(x).$$

Pela relação de ortogonalidade entre os polinômios $P_k(x)$, segue que

$$\int_a^b x^k P_k(x) d\phi(x) = \delta_k \int_a^b x^{k-1} P_{k-1}(x) d\phi(x)$$

Aplicando sucessivamente essa igualdade, temos que

$$\int_{a}^{b} x^{n} P_{n}(x) d\phi(x) = \delta_{n} \delta_{n-1} \dots \delta_{1} \int_{a}^{b} P_{0}(x) d\phi(x)$$

 $Como P_0(x) = 1,$

$$\int_{a}^{b} x^{n} P_{n}(x) d\phi(x) = \delta_{n} \delta_{n-1} \dots \delta_{1} \mu_{0}.$$

$$(2.12)$$

Seja
$$P_n(x) = a_{n,n}x^n + a_{n,n-1}x^{n-1} + \dots + a_{n,0}$$
. Logo,

$$\int_{a}^{b} P_{n}(x)P_{n}(x)d\phi(x) = \int_{a}^{b} \left(a_{n,n}x^{n} + a_{n,n-1}x^{n-1} + \dots + a_{n,0}\right)P_{n}(x)d\phi(x)$$
$$= \int_{a}^{b} a_{n,n}x^{n}P_{n}(x)d\phi(x).$$

E, da equação (2.12), segue que

$$\int_{a}^{b} P_n(x)P_n(x)d\phi(x) = a_{n,n}\delta_n\delta_{n-1}\dots\delta_1\mu_0.$$
(2.13)

Observando o coeficiente do termo de maior grau em ambos os lados da equação (2.8), segue que, $a_{n,n} = \gamma_n a_{n+1,n+1}$. Assim, aplicando sucessivamente a relação $a_{n+1,n+1} = a_{n,n}/\gamma_n$, temos que, $a_{n+1,n+1} = a_{0,0}/(\gamma_n \gamma_{n-1} \dots \gamma_0)$. Note que, $a_{0,0} = 1$, pois $P_0(x) = 1$.

Logo, a equação (2.13) pode ser escrita como

$$\int_{a}^{b} P_{n}(x)P_{n}(x)d\phi(x) = \frac{\delta_{n}\delta_{n-1}\dots\delta_{1}\mu_{0}}{\gamma_{n-1}\gamma_{n-2}\dots\gamma_{0}}$$

Daí, concluímos que, se definirmos $p_n(x) = \sqrt{\gamma_{n-1} \dots \gamma_0 / (\delta_n \dots \delta_1 \mu_0)} P_n(x)$, e de fato podemos usar a raíz quadrada pois $\mu_0 > 0$ e $\gamma_k \delta_{k+1} > 0$, então

$$\int_{a}^{b} p_n(x) p_n(x) d\phi(x) = 1.$$

Além disso, podemos multiplicar qualquer polinômio $p_k(x)$ por -1, e ainda temos uma sequência de polinômios ortonormais.

A relação de recorrência de três termos (2.11) é facilmente obtida, ao substituirmos $P_k(x) = \sqrt{\mu_0 \delta_1 \dots \delta_k / (\gamma_0 \dots \gamma_{k-1})}$ na relação (2.8).

Da relação de recorrência (2.8) podemos obter fórmulas que são muito úteis. Por exemplo, fazendo a diferença entre as equações

$$xP_{k}(x)P_{k}(y) = \gamma_{k}P_{k+1}(x)P_{k}(y) + \beta_{k}P_{k}(x)P_{k}(y) + \delta_{k}P_{k-1}(x)P_{k}(y)$$
$$yP_{k}(y)P_{k}(x) = \gamma_{k}P_{k+1}(y)P_{k}(x) + \beta_{k}P_{k}(y)P_{k}(x) + \delta_{k}P_{k-1}(y)P_{k}(x)$$

obtemos

$$(x-y)P_k(x)P_k(y) = \gamma_k[P_{k+1}(x)P_k(y) - P_k(x)P_{k+1}(y)] + \delta_k[P_{k-1}(x)P_k(y) - P_k(x)P_{k-1}(y)].$$

Daí, somando $c_k(x-y)P_k(x)P_k(y)$ de $k = 0$ a $k = n$, com $c_0 := 1$ e $c_k = \left(\frac{\gamma_0 \dots \gamma_{k-1}}{\delta_1 \dots \delta_k}\right),$
 $k = 1, \dots, n$, obtemos a identidade de Christoffel-Darboux.

Teorema 2.1.7 (Identidade de Christoffel-Darboux). Seja $\{P_n(x)\}_{n\geq 0}$ uma sequência de polinômios ortogonais. Então,

$$K_n(x,y) := \sum_{k=0}^n c_k P_k(x) P_k(y) = c_n \gamma_n \frac{P_{n+1}(x) P_n(y) - P_n(x) P_{n+1}(y)}{x - y}, \qquad (2.14)$$

em que $c_0 := 1$ e $c_k = \left(\frac{\gamma_0 \dots \gamma_{k-1}}{\delta_1 \dots \delta_k}\right), k = 1, \dots, n.$

A função $K_n(x, y)$ é chamada de núcleo de reprodução e desempenha um papel importante na teoria dos polinômios ortogonais.

Fazendo $y \to x$ em (2.14) obtemos a forma confluente da identidade de Christoffel-Darboux.

Corolário 2.1.2. Sob as mesmas condições do teorema anterior, temos

$$K_n(x,x) := \sum_{k=0}^n c_k P_k^2(x) = c_n \gamma_n [P'_{n+1}(x) P_n(x) - P'_n(x) P_{n+1}(x)] > 0, \ \forall x \in \mathbb{R}.$$
 (2.15)

A positividade desta fórmula vem do fato de que os coeficientes da relação de recorrência satisfazem $\gamma_k \delta_{k+1} > 0$ e, portanto $c_k > 0$.

O Teorema de Favard [15, 8] que escrevemos a seguir é a recíproca do Teorema 2.1.6, ou seja, polinômios obtidos por uma relação de recorrência de três termos formam uma sequência de polinômios ortogonais com relação a uma distribuição.

Teorema 2.1.8 (J. Favard, 1935). Seja $\{p_n(x)\}_{n\geq 0}$ uma sequência de polinômios gerada por uma relação de recorrência da forma (2.11) com $a_n > 0$ e $b_n \in \mathbb{R}$. Então, existe uma medida d ϕ com relação a qual esta sequência é ortonormal.

Conhecendo esse teorema podemos entender que, de modo geral, os coeficientes $a_k e b_k$ da relação de recorrência de três termos (2.11) contém toda a informação dos respectivos polinômios ortogonais. Esse fato comprova a relevância de métodos, como os usados neste trabalho, que geram resultados para os polinômios ortogonais através da análise dos coeficientes $a_k e b_k$.

Podemos escrever às relações de recorrência de três termos (2.8) e (2.11) de forma matricial. A relação de recorrência de três termos (2.8) para k = 0, ..., n - 1, fornece o seguinte sistema matricial

$$\begin{pmatrix} \beta_{0} & \gamma_{0} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \delta_{1} & \beta_{1} & \gamma_{1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \delta_{2} & \beta_{2} & \gamma_{2} & \dots & 0 \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & & \delta_{n-2} & \beta_{n-2} & \gamma_{n-2} \\ 0 & & & 0 & \delta_{n-1} & \beta_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{0}(x) \\ P_{1}(x) \\ P_{2}(x) \\ \vdots \\ P_{n-2}(x) \\ P_{n-1}(x) \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} P_{0}(x) \\ P_{1}(x) \\ P_{2}(x) \\ \vdots \\ P_{n-2}(x) \\ P_{n-1}(x) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \gamma_{n-1}P_{n}(x) \end{pmatrix}$$

Denotaremos a matriz $n \times n$ do sistema anterior por

$$H_{n} := \begin{pmatrix} \beta_{0} & \gamma_{0} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \delta_{1} & \beta_{1} & \gamma_{1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \delta_{2} & \beta_{2} & \gamma_{2} & \dots & 0 \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & & \delta_{n-2} & \beta_{n-2} & \gamma_{n-2} \\ 0 & & & 0 & \delta_{n-1} & \beta_{n-1} \end{pmatrix}.$$
 (2.16)

De modo análogo, a relação de recorrência de três termos (2.11) para $k = 0, \ldots, n-1$, fornece o seguinte sistema matricial

$$\begin{pmatrix} b_{0} & a_{0} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_{0} & b_{1} & a_{1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{1} & b_{2} & a_{2} & \dots & 0 \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & & a_{n-3} & b_{n-2} & a_{n-2} \\ 0 & & 0 & a_{n-2} & b_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{0}(x) \\ p_{1}(x) \\ p_{2}(x) \\ \vdots \\ p_{n-2}(x) \\ p_{n-1}(x) \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} p_{0}(x) \\ p_{1}(x) \\ p_{2}(x) \\ \vdots \\ p_{n-2}(x) \\ p_{n-1}(x) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \gamma_{n-1}p_{n}(x) \end{pmatrix}$$

$$(2.17)$$

A matriz $n \times n$ do sistema anterior é uma matriz de Jacobi e será denotada

 por

$$J_n := \begin{pmatrix} b_0 & a_0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_0 & b_1 & a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_1 & b_2 & a_2 & \dots & 0 \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & & a_{n-3} & b_{n-2} & a_{n-2} \\ 0 & & & 0 & a_{n-2} & b_{n-1} \end{pmatrix}.$$

2.2 Zeros de polinômios ortogonais

Chamamos de zero de um polinômio p(x) o valor z tal que p(z) = 0. Zeros de polinômios, em geral, não podem ser obtidos explicitamente. Os zeros dos polinômios ortogonais
possuem características muito próprias, como veremos a seguir.

Teorema 2.2.1. Se a sequência $\{P_k(x)\}_{k=0}^n$ é obtida das relações de recorrência (2.8) ou (2.11), então os zeros de $P_n(x)$ são autovalores das matrizes H_n e J_n correspondentes.

Demonstração. Seja $z_{n,j}$ um zero de $P_n(x)$ e o vetor

$$\overline{P}_{n,j} := (P_0(z_{n,j}), P_1(z_{n,j}), \dots, P_{n-1}(z_{n,j}))^T.$$

Substituindo $x = z_{n,j}$ no sistema (2.16) obtemos

$$H_n \bar{P}_{n,j} = z_{n,j} \bar{P}_{n,j},$$

portanto $z_{n,j}$ é autovalor de H_n com autovetor associado $\bar{P}_{n,j}$.

Os polinômios $P_k(x)$ obtidos da relação de recorrência (2.8) e os polinômios $p_k(x)$ obtidos de (2.11) são múltiplos, de modo que, $p_k(x) = \sqrt{c_k/\mu_0} P_k(x)$ com $c_k = (\gamma_0 \gamma_1 \dots \gamma_{k-1})/(\delta_1 \delta_2 \dots \delta_k)$, para $k \ge 1$, e $\mu_0 = \int_a^b d\phi(x)$. Então, os zeros de $P_n(x)$ e $p_n(x)$ são os mesmos.

Como $z_{n,j}$ é zero de $p_n(x)$, substituindo $x = z_{n,j}$ no sistema (2.17) obtemos

$$J_n \bar{p}_{n,j} = z_{n,j} \bar{p}_{n,j},$$

sendo $\bar{p}_{n,j} := (p_0(z_{n,j}), p_1(z_{n,j}), \dots, p_{n-1}(z_{n,j}))^T$. Logo, $z_{n,j}$ é autovalor de J_n com autovetor associado $\bar{p}_{n,j}$.

Teorema 2.2.2. Seja $\{P_n(x)\}_{n=0}^N$ uma sequência de polinômios ortogonais com relação a medida $d\phi(x)$ no intervalo (a,b). Os zeros de cada polinômio ortogonal são reais, distintos e estão no intervalo (a,b).

Demonstração. Suponha que existam j zeros z_1, \ldots, z_j de $P_n(x)$ fora de (a, b), inclusive os zeros complexos. Então, $P_n(x)/(x-z_1)\cdots(x-z_j)$ é um polinômio de grau n-jcom todos os zeros em (a, b). Se j > 0 então, pela ortogonalidade,

$$\int_a^b P_n(x) \frac{P_n(x)}{(x-z_1)\cdots(x-z_k)} d\phi(x) = 0.$$

Por outro lado, $P_n^2(x)/(x-z_1)\cdots(x-z_k)$ não muda de sinal em (a,b) e, portanto, essa integral não pode se anular. Logo, j = 0 e, assim, todos os zeros de $P_n(x)$ estão em (a,b) e, portanto, são reais. Se z_0 é um zero de $P_n(x)$ de multiplicidade maior do que 1, então $P_n(x)/(x-z_0)^2$ é um polinômio de grau n-2 e, pela ortogonalidade,

$$\int_{a}^{b} P_{n}(x) \frac{P_{n}(x)}{(x-z_{0})^{2}} d\phi(x) = 0.$$

Mas $P_n^2(x)/(x-z_0)^2$ é positivo em (a,b) e, portanto, essa integral não pode se anular. Logo, todos os zeros de (a,b) são simples.

Teorema 2.2.3. Seja $\{P_n(x)\}_{n=0}^N$ uma sequência de polinômios ortogonais. Os zeros de $P_n(x)$ se entrelaçam com os zeros de $P_{n+1}(x)$, $n \ge 1$. Em outras palavras, se

$$z_{n,n} < z_{n,n-1} < \ldots < z_{n,1}$$

são os zeros de $P_n(x)$ e

$$z_{n+1,n+1} < z_{n+1,n} < \ldots < z_{n+1,1}$$

são os zeros de $P_{n+1}(x)$, arranjados em ordem decrescente, então

$$z_{n+1,n+1} < z_{n,n} < z_{n+1,n} < z_{n,n-1} \dots < z_{n+1,2} < z_{n,1} < z_{n+1,1}$$

Demonstração. Aplicando a fórmula confluente de Cristoffel-Darboux (2.15) aos zeros de $P_{n+1}(x)$ obtemos

$$c_n \gamma_n P'_{n+1}(z_{n+1,j}) P_n(z_{n+1,j}) > 0, \ j = 1, \dots, n+1.$$
 (2.18)

Como os zeros de $P_{n+1}(x)$ são reais e distintos então, pelo Teorema de Rolle, a derivada de $P_{n+1}(x)$ tem um zero em cada intervalo $(z_{n+1,j}, z_{n+1,j-1}), j = 2, ..., n+1$. Assim, $P'_{n+1}(z_{n+1,j})$ e $P'_{n+1}(z_{n+1,j-1})$ têm sinais opostos.

Por (2.18), $P'_n(z_{n+1,j}) \in P'_n(z_{n+1,j-1})$ também devem ter sinais opostos, pois têm os mesmos sinais de P'_{n+1} nesses pontos. Então, pelo Teorema do Valor Médio, $P'_n(x)$ tem um zero em cada intervalo $(z_{n+1,j}, z_{n+1,j-1}), j = 2, ..., n+1$.

2.2.1 Fórmula de quadratura de Gauss

Uma das mais importantes aplicações de polinômios ortogonais vem das fórmulas de quadratura. Dada a integral

$$I(f) := \int_{a}^{b} f(x) \, dx,$$

podemos aproximar esse valor por uma combinação linear de valores de f da seguinte forma

$$Q(f) := A_1 f(z_1) + A_2 f(z_2) + \dots + A_n f(z_n)$$
(2.19)

onde z_1, z_2, \ldots, z_n são n pontos distintos do intervalo [a, b]. As fórmulas da forma (2.19) são chamadas fórmulas de quadratura e os pontos z_1, z_2, \ldots, z_n são chamados nós.

Procuramos obter uma fórmula de quadratura que seja exata para a maior classe possível de funções. É fácil obter uma fórmula de quadratura com n nós que seja exata para polinômios de grau n - 1.

O grau de precisão algébrica de uma fórmula de quadratura é o número ktal que

$$I(f) = Q(f) \quad \forall f \in \Pi_k$$

 $I(f) \neq Q(f) \quad \text{para algum } f \in \Pi_{k+1}$

Em outras palavras, o grau de precisão algébrica de uma fórmula de quadratura é o maior grau possível de polinômios para os quais a fórmula de quadratura é exata.

Dentre todas as fórmulas de quadratura com n nós pode-se construir uma fórmula de quadratura que tenha grau de precisão algébrica máximo. Estas são as conhecidas Fórmulas de Quadratura de Gauss, que possuem grau de precisão algébrica 2n - 1. O teorema a seguir descreve a Fórmula de Quadratura de Gauss.

Teorema 2.2.4 (Fórmula de quadratura de Gauss). Seja

$$I(f) := \int_{a}^{b} f(x) \, d\phi(x).$$

O grau de precisão algébrica máximo de uma fórmula de quadratura para I(f) de n nós é 2n - 1. A fórmula de quadratura que atinge esse grau de precisão algébrica é única e é dada por

$$Q_G(f) := \lambda_1 f(z_1) + \lambda_2 f(z_2) + \ldots + \lambda_n f(z_n), \qquad (2.20)$$

onde $z_1, z_2, ..., z_n$ são os zeros do n-ésimo polinômio da sequência de polinômios ortogonais $\{P_j(x)\}_{j=0}^n$ associada ao produto interno

$$\langle p,q\rangle = \int_{a}^{b} p(x) q(x) d\phi(x)$$

e, os números λ_j (números de Christoffel), são positivos e são dados por

$$\lambda_j = \int_a^b \frac{P_n(x)}{P'_n(z_j)(x - z_j)} d\phi(x), \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Demonstração do Teorema 2.2.4. Primeiro vamos mostrar que a fórmula de quadratura (2.20) é exata para polinômios de grau 2n - 1 e depois mostramos a unicidade. Seja p(x) um polinômio de grau 2n - 1. Considere o seguinte polinômio de grau n - 1

$$L(x) := \sum_{j=1}^{n} p(z_j) \frac{P_n(x)}{P'_n(z_j)(x - z_j)},$$

Observe que

$$P'_{n}(x) = \left((x - z_{j}) \frac{P_{n}(x)}{x - z_{j}} \right)' = \left(\frac{P_{n}(x)}{x - z_{j}} + (x - z_{j}) \left[\frac{P_{n}(x)}{x - z_{j}} \right]' \right),$$

então,

$$P'_n(z_j) = \left(\frac{P_n(x)}{x - z_j}\right)\Big|_{x = z_j}$$

e, portanto, $L(z_j) = p(z_j), \, j = 1, ..., n.$

Como p(x) é de grau 2n - 1 então, p(x) - L(x) também é um polinômio de grau 2n-1 e z_1, z_2, \ldots, z_n são n de seus zeros. Assim, temos que $p(x)-L(x) = P_n(x)r(x)$ para algum polinômio r(x) de grau n - 1. Logo, $p(x) = L(x) + P_n(x)r(x)$ e

$$\int_{a}^{b} p(x) \, d\phi(x) = \int_{a}^{b} L(x) d\phi(x) + \int_{a}^{b} P_{n}(x) r(x) \, d\phi(x). \tag{2.21}$$

Pela ortogonalidade temos que $\int_a^b P_n(x)r(x)d\phi(x) = 0$. Desenvolvendo o somatório de L(x) tem-se

$$\int_{a}^{b} p(x) \, d\phi(x) = \sum_{j=1}^{n} p(z_j) \int_{a}^{b} \frac{P_n(x)}{P'_n(z_j)(x-z_j)} \, d\phi(x).$$

Portanto, temos que

$$\lambda_j = \int_a^b \frac{P_n(x)}{P'_n(z_j)(x - z_j)} \, d\phi(x), \quad j = 1, 2, \dots, n,$$

satisfazem a equação (2.20) para qualquer p(x) de grau 2n - 1.

Verifiquemos que λ_j são positivos aplicando a fórmula de quadratura (2.20) para os polinômios $P_n(x)^2/(x-z_j)^2$, de grau 2n-2. Assim, temos

$$\int_{a}^{b} \frac{P_{n}(x)^{2}}{(x-z_{j})^{2}} d\phi(x) = \lambda_{j} (P_{n}'(z_{j}))^{2}$$

e, portanto,

$$\lambda_j = \int_a^b \left(\frac{P_n(x)}{P'_n(z_j)(x-z_j)}\right)^2 d\phi(x) > 0.$$

Agora, vamos provar que está fórmula é a única com grau de precisão algébrica 2n - 1. Suponha que existam nós x_1, x_2, \ldots, x_n que não sejam os zeros de $P_n(x)$ e coeficientes B_1, B_2, \ldots, B_n , tal que

$$\int_{a}^{b} p(x) \, d\phi(x) = B_1 \, p(x_1) + B_2 \, p(x_2) + \ldots + B_n \, p(x_n) \tag{2.22}$$

seja satisfeita para polinômios p(x) de grau 2n-1.

Seja $g(x) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)$. Como os polinômios $g(x)x^k$, $k = 0, 1, \dots, n - 1$, possuem grau no máximo 2n - 1 então a fórmula de quadratura (2.22) é válida para esses polinômios. Assim, temos que

$$\int_{a}^{b} g(x) x^{k} d\phi(x) = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n-1.$$

Pelo Teorema 2.1.3, g(x) é um polinômio ortogonal de grau n para este produto interno. Então, x_1, x_2, \ldots, x_n devem ser os zeros de $P_n(x)$.

Os coeficientes B_j são obtidos aplicando a fórmula de quadratura para $f(x) = P_n(x)/(x-z_j)$ e assim obtemos $B_j = \lambda_j$.

Além disso, este é o maior grau de precisão algébrico possível pois para $p(x) = P_n(x)^2$, de grau 2n, temos

$$\int_a^b p(x) d\phi(x) > 0 \quad e \quad \lambda_1 p(z_1) + \lambda_2 p(z_2) + \ldots + \lambda_n p(z_n) = 0.$$

Corolário 2.2.1. Os coeficientes λ_j também podem ser dados por

$$\lambda_j = \frac{\alpha_n \,\rho_{n-1}}{\alpha_{n-1} \,P'_n(z_j) \,P_{n-1}(z_j)}, \quad j = 1, 2, \dots, n,$$

em que α_n é o coeficiente do termo de maior grau de $P_n(x)$ e $\rho_n = \int_a^b P_n(x)^2 d\phi(x)$,

Demonstração. Essa expressão pode ser obtida aplicando a fórmula de quadratura (2.20) para $f(x) = P_{n-1}(x)P_n(x)/(x-z_j)$ de grau 2n-1.

2.3 Polinômios ortogonais de variável contínua e de variável discreta

Estamos considerando o produto interno definido pela integral de Stieltjes

$$\langle p,q \rangle = \int_{a}^{b} p(x) q(x) d\phi(x), \qquad (2.23)$$

em que $\phi(x)$ é uma função não-decrescente e não-constante em um intervalo (a, b), finito ou não.

Se $d\phi(x)$ é uma medida absolutamente contínua em (a, b), então existe uma função $\omega(x)$, contínua e não-negativa e não identicamente nula em (a, b), tal que

$$\int_{a}^{b} f(x) d\phi(x) = \int_{a}^{b} f(x) \omega(x) dx.$$
(2.24)

Definição 2.3. Uma sequência de polinômios ortogonais obtida do produto interno

$$\langle p,q\rangle = \int_{a}^{b} p(x) q(x) \omega(x) dx,$$

 $com \ \omega(x) \ge 0, \ \omega(x) \not\equiv 0, \ \acute{e} \ chamada \ sequência \ de \ polinômios \ ortogonais \ de \ variável contínua.$

Já se $\phi(x)$ tem uma quantidade enumerável ou finita de pontos de aumento, ou seja, $\phi(x)$ é uma função "escada", então a integral acima reduz-se a um somatório.

Se x_0, x_1, x_2, \ldots são os pontos de aumento de $\phi(x)$ então existem pesos dados por $\omega(x_k) = \lim_{x \to x_k^+} \phi(x) - \lim_{x \to x_k^-} \phi(x)$, para $k = 0, 1, 2, \ldots$, tal que

$$\int_{a}^{b} f(x) d\phi(x) = \sum_{k=0}^{N} f(x_{k})\omega(x_{k}), \qquad (2.25)$$

sendo N um valor inteiro ou até mesmo $N = \infty$, isto é, uma série infinita.

Definição 2.4. Uma sequência de polinômios ortogonais obtida do produto interno

$$\langle p,q\rangle = \sum_{k=0}^{N} p(x_k)q(x_k)\,\omega(x_k),$$

onde $N \leq \infty$ e $\omega(x_k) > 0$, é chamada sequência de polinômios ortogonais de variável discreta.

Podemos verificar facilmente que (2.23) satisfaz as propriedades 2) e 3) de produto interno. A propriedade 1) $\langle p, p \rangle \ge 0$ e $\langle p, p \rangle = 0 \Leftrightarrow p = 0$ é mostrada a seguir.

Para todo polinômio algébrico p(x) temos que

$$\int_{a}^{b} \{p(x)\}^{2} d\phi(x) \ge 0.$$
(2.26)

O caso $\int_a^b \{p(x)\}^2 d\phi(x) = 0$ ocorre se, e somente se, p(x) se anula em todos os pontos de crescimento de $\phi(x)$.

Se $\phi(x)$ tem infinitos pontos de aumento então, para que a integral (2.23) seja zero, p(x) deve-se anular em um número infinito de pontos. Por ser um polinômio, então p deve ser identicamente zero.

Se $\phi(x)$ tem um número finito de pontos de aumento, digamos N+1, então a integral (2.23) de fato é uma soma finita na forma (2.25). Nesse caso, $\sum_{k=0}^{N} \{p(x_k)\}^2 \omega(x_k)$ pode ser zero para polinômios de grau maior do que ou igual a N+1 que tenham zeros em todos os pontos x_0, x_1, \ldots, x_N . Podemos garantir apenas que polinômios de grau no máximo N não possuem zeros em todos os pontos de aumento de $\phi(x)$, e portanto, satisfazem $\sum_{k=0}^{N} \{p(x_k)\}^2 \omega(x_k) > 0$. Assim, se $\phi(x)$ tem um número finito de pontos de aumento, então consideramos o produto interno dado pela soma finita (2.25) sobre o espaço vetorial Π_N . Consequentemente, a sequência de polinômios ortogonais terá polinômios com grau no máximo N, ou seja, $P_0(x), P_1(x), \ldots, P_N(x)$.

No caso em que $\phi(x)$ tem um número enumerável de pontos de aumento, x_0, x_1, \ldots , podemos escrever

$$\langle p,q\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} p(x_k) q(x_k) \omega(x_k), \quad \omega(x_k) > 0,$$
 (2.27)

sobre o espaço de polinômios Π . Nesse caso a sequência de polinômios ortogonais será $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$.

Nesses dois casos, em que $\phi(x)$ tem um número enumerável, finito ou não, de pontos de aumento, podemos considerar apenas que $\omega(x)$ seja definido para os valores $x_k, k = 0, 1, ...$

Vimos no Teorema 2.2.2 que os zeros de polinômios ortogonais são reais, simples e zeros de polinômios consecutivos se entrelaçam. Definimos $\mathcal{M}(p)$ como sendo o mínimo da distância entre os seus zeros. Mais precisamente, para um polinômios pde grau n com zeros z_1, z_2, \ldots, z_n ,

$$\mathcal{M}(p) = \min\{|z_i - z_j| : i \neq j, i, j = 1, 2, \dots, n\}.$$

No caso de polinômios de variável discreta clássicos, veremos que os zeros são bem esparsos.

Consideraremos, de agora em diante, os polinômios ortogonais de variável discreta definidos sobre um conjunto cujos pontos x_0, x_1, x_2, \ldots que são igualmente espaçados. Através de mudança de variável, podemos considerar, sem perda de generalidade, $\{x_0, x_1, x_2, \ldots\} = \{0, 1, 2, \ldots\} := \mathcal{N}$, podendo ser um conjunto finito ou infinito. Neste caso, $\{P_n(x)\}_{n \in \mathcal{N}}$ satisfazem relações de ortogonalidade do tipo

$$\sum_{k \in \mathcal{N}} \omega_k P_n(k) P_m(k) = \rho_n \delta_{nm}, \quad \omega_k > 0.$$
(2.28)

É conhecido que muitos polinômios ortogonais de variável discreta dados por (2.28) satisfazem uma equação de diferença da forma

$$P_n(x+1) = 2A_n(x) P_n(x) - B_n(x) P_n(x-1)$$
(2.29)

com A(x) e B(x) contínuas num intervalo L_n que contenha todos os zeros de $P_n(x)$. Para tais polinômios, além do fato de que os zeros de $P_n(x)$ e de $P_{n+1}(x)$ se entrelaçam, temos que sob certas condições os zeros de $P_n(x)$ se entrelaçam com os zeros de $P_n(x+1)$. Esse fato, segue do resultado de Krasikov e Zarkh [28, Teorema 1], dado a seguir, com outra demonstração.

Teorema 2.3.1. Seja $P_n(x)$ um polinômio ortogonal discreto com relação ao produto interno (2.28). Suponha que $P_n(x)$ satisfaz (2.29) e que exista $I \subset L_n$ tal que

- (i) Todos os zeros de P_n estão em I,
- (ii) $B_n(x) > 0$ para $x \in I$.

Então, $\mathcal{M}(p) > 1$. Além disso, se $A_n(x) > 0$ em I então $\mathcal{M}(p) > 2$.

Demonstração. Primeiramente observamos que a ortogonalidade implica que existe um ponto do suporte da medida, $\mathcal{N} = \{0, 1, 2, ...\}$, entre quaisquer dois zeros consecutivos de $P_n(x)$. De fato, sejam z_1 e z_2 zeros consecutivos, se não houver $x \in \mathcal{N}$ tal que $z_1 < x < z_2$ então teríamos

$$\sum_{x \in \mathcal{N}} \frac{P_n(x)P_n(x)}{(x-z_1)(x-z_2)}\omega(x) > 0.$$

Mas, $P_n(x)/((x-z_1)(x-z_2))$ é um polinômio de grau n-2, portanto pela ortogonalidade $\sum_{x \in \mathcal{N}} P_n(x) P_n(x)/((x-z_1)(x-z_2)) \omega(x;\tau) = 0$. Então temos que entre zeros consecutivos existe um número inteiro. Isso também quer dizer que em um intervalo $[m, m+1], m \in \mathcal{N}$, pode existir no máximo um zero de $P_n(x)$.

Como $P_n(x)$ satisfaz (2.29), então para todo zero z_k de $P_n(x)$ temos que

$$P_n(z_k + 1) = -B_n(z_k) P_n(z_k - 1),$$

e $B_n(z_k) > 0$. Isso implica que

sinal
$$P_n(z_k+1) = -\text{sinal } P_n(z_k-1).$$

Portanto, mesmo no caso $P_n(z_k - 1) = P_n(z_k + 1) = 0$ temos que em cada intervalo $[z_k - 1, z_k + 1]$ existe uma quantidade ímpar de zeros de $P_n(x)$.

Seja z_1 o menor zero de $P_n(x)$. Nesse caso, existe uma quantidade ímpar de zeros em $[z_1, z_1 + 1]$. Seja m o menor número inteiro maior ou igual a z_1 . Temos que $z_1 \leq m < z_1 + 1 \leq m + 1$. No intervalo [m - 1, m] existe apenas o zero z_1 . No intervalo [m, m + 1] existe no máximo um zero. Como a quantidade de zeros em $[z_1, z_1 + 1]$ deve ser um número ímpar, a única possibilidade é que exista apenas o zero z_1 em $[z_1, z_1 + 1]$. Seja z_2 o segundo menor zero, então $z_2 > z_1 + 1$ e da mesma forma só podem existir zeros no sub-intervalo $[z_2, z_2 + 1]$ de $[z_2 - 1, z_2 + 1]$. Da mesma forma que para z_1 , concluímos que existe apenas o zero z_2 em $[z_2 - 1, z_2 + 1]$. Então, prosseguimos o raciocínio para z_3 e assim sucessivamente concluímos o mesmo para todos os zeros. Portanto, para $k = 1, \ldots, n$ concluí-se que no intervalo $[z_k - 1, z_k + 1]$ existe apenas o zero z_k , ou seja, a distância entre os zeros é maior do que um.

Agora, assumindo que $A_n(x) > 0$ em I. Sejam z_1 e z_2 dois zeros consecutivos e seja $\bar{z} = (z_1 + z_2)/2$.

Se a distância de z_1 a z_2 for menor do que dois, então $\bar{z} - 1$ e $\bar{z} + 1$ estão fora do intervalo $[z_1, z_2]$. Como supomos também que $B_n(x) > 0$ então não existem zeros de $P_n(x)$ em $[z_1 - 1, z_1]$ e nem em $[z_2, z_2 + 1]$. Logo, o sinal de $P_n(\bar{z} - 1)$ é oposto ao sinal de $P_n(\bar{z})$ e o sinal de $P_n(\bar{z} + 1)$ é oposto ao sinal de $P_n(\bar{z})$, e portanto igual ao sinal de $P_n(\bar{z} - 1)$. Isso contradiz a equação (2.29) para \bar{z} , pois

$$P_n(\bar{z}+1) = 2A_n(\bar{z}) P_n(\bar{z}) - B_n(\bar{z}) P_n(\bar{z}-1).$$

Equivalentemente,

$$P_n(\bar{z}+1) + B_n(\bar{z}) P_n(\bar{z}-1) = 2A_n(\bar{z}) P_n(\bar{z})$$

implica que se os sinais de $P_n(\bar{z}+1)$ e $P_n(\bar{z}-1)$ são iguais também será o mesmo de $P_n(\bar{z})$.

As famílias de polinômios ortogonais clássicas de variável discreta, que veremos a seguir, satisfazem equações de diferença da forma (2.29). As equações de diferença destas famílias são dadas no início de cada seção dedicada aos Polinômios de Charlier, Polinômios de Meixner, Polinômios de Kravchuck e Polinômios de Hahn do Capítulo 5. Verificamos que tais equações de diferença satisfazem as hipóteses (i) e (ii) do Teorema 2.3.1 e, portanto, a distância entre os zeros de cada polinômio ortogonal de uma família clássica de variável discreta é sempre maior.

2.3.1 Famílias clássicas de polinômios ortogonais

Os polinômios ortogonais de variável contínua são relacionados com o produto interno

$$\langle p,q\rangle = \int_{a}^{b} p(x) q(x) \omega(x) dx.$$

As famílias de polinômios ortogonais clássicos de variável contínua são as seguintes:

• Polinômios de Hermite – Distribuição Normal

$$(a,b) = (-\infty,\infty), \quad \omega(x) = e^{-x^2};$$

• Polinômios de Laguerre – Distribuição Gama

 $(a,b) = (0,\infty), \qquad \omega(x) = e^{-x} x^{\alpha}, \ \alpha > -1;$

• Polinômios de Jacobi – Distribuição Beta

$$(a,b) = (-1,1), \qquad \omega(x) = (1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}, \ \alpha,\beta > -1.$$

Nessa família destacam-se:

- Polinômios de Gegenbauer ou Ultraesféricos: $\alpha = \beta$ e, portanto, $\omega(x) = (1 - x^2)^{\alpha}, \alpha > -1;$
- Polinômios de Legendre: $\alpha = \beta = 0$ e, portanto, $\omega(x) = 1$;
- Polinômios de Chebyshev de Primeira Espécie: $\alpha = \beta = -1/2$, e portanto $\omega(x) = (\sqrt{1-x^2})^{-1}$;
- Polinômios de Chebyshev de Segunda Espécie: $\alpha = \beta = 1/2$, e portanto $\omega(x) = \sqrt{1 x^2}$.

Os polinômios ortogonais de variável discreta clássicos são relacionados com o produto interno

$$\langle p,q \rangle = \sum_{k \in \mathcal{N}} p(k)q(k)\,\omega(k)$$

sendo

• Polinômios de Charlier – Distribuição de Poisson

$$\mathcal{N} = \{0, 1, 2, \ldots\}, \qquad \omega(k) = \frac{a^k}{k!}, \ a > 0;$$

• Polinômios de Meixner – Distribuição Geométrica ou de Pascal

$$\mathcal{N} = \{0, 1, 2, \dots, \}, \qquad \omega(k) = \frac{c^k(\beta)_k}{k!}, \ \beta > 0, \ 0 < c < 1,$$

 $(\beta)_k = \beta(\beta+1)\dots(\beta+k-1)$ (Símbolo de Pochhammer);

• Polinômios de Kravchuck – Distribuição Binomial

$$\mathcal{N} = \{0, 1, \dots, N\}, \qquad \omega(k) = \binom{N}{k} q^k (1-q)^{N-k}, \ 0 < q < 1;$$

• Polinômios de Hahn

Distribuição Hipergeométrica ou de Pólya

$$\mathcal{N} = \{0, 1, \dots, N\}, \qquad \omega(k) = {\binom{\alpha+k}{k}} {\binom{\beta+N-k}{N-k}}$$

para $\alpha, \beta > -1$ ou $\alpha, \beta < -N$.

Nessa família destacam-se:

Polinômios de Gram - Distribuição Uniforme: $\alpha = \beta = 0$ e, portanto, $\omega(k) = 1$. Esses polinômios também são conhecidos como Polinômios de Chebyshev Discretos, pois foram estudados inicialmente por Chebyshev.

Capítulo 3

Teoremas para monotonicidade dos zeros

Este capítulo contém as principais ferramentas que utilizamos no estudo do comportamento dos zeros de polinômios ortogonais de variável discreta.

Vamos considerar sequências de polinômios ortogonais que dependem de um parâmetro $\tau \in (\tau_1, \tau_2)$. De modo geral, podemos considerar as sequências $\{P_n(x; \tau)\}_{n \in \mathcal{N}}$, $\mathcal{N} = \{0, 1, 2, \ldots\}$ finito ou infinito, de polinômios ortogonais com relação a uma distribuição $d\phi(x; \tau)$ num intervalo [a, b] dependente de um parâmetro $\tau \in (\tau_1, \tau_2)$.

Em alguns casos esses parâmetros tem uma interpretação física. Por exemplo, os Polinômios de Laguerre dependem do parâmetro α e os Polinômios de Jacobi de parâmetros α e β . Tais parâmetros podem ser interpretados fisicamente como o valor de cargas fixas que repulsam cargas pontuais livres no intervalo de ortogonalidade, de modo que, os pontos de equilíbrio das *n* cargas livres são os zeros do *n*-ésimo polinômio ortogonal. Essa bela interpretação eletrostática para os zeros de polinômios ortogonais é devida a Stieltjes [37, 38, 39]. Szegő provou o equilíbrio como sendo o mínimo da energia do campo descrito [41, Seção 6.7] e citamos ainda os artigos [10, 13] sobre o tema. Por essa interpretação eletrostática, é fácil entender que o aumento de algum parâmetro gera um deslocamento dos pontos de equilíbrio, que são os zeros, em direção oposta à carga fixa.

Os zeros dos polinômios ortogonais discretos também possuem um comportamento monotônico em relação aos seus parâmetros, essas demonstrações são conhecidas e serão feitas no Capítulo 5.

Provavelmente, o primeiro resultado geral que lida com monotonicidade de zeros de polinômios ortogonais em relação a um parâmetro foi estabelecido por Andrei Markov em 1886 [33]. O leitor pode encontrar uma versão mais geral do Teorema de Markov no livro de Szegő [41] e no livro de Ismail [22, Teor. 7.1.1 na p. 204]. A prova do teorema foi feita através da quadratura gaussiana. Uma prova diferente e que permite uma ligeira generalização pode ser encontrada em [9].

No caso de polinômios ortogonais de variável discreta, consideramos $\{P_n(x;\tau)\}_{n\in\mathcal{N}}$ satisfazendo relações de ortogonalidade da forma

$$\sum_{k \in \mathcal{N}} P_n(k;\tau) P_m(k;\tau) \omega(k;\tau) = \rho_n(\tau) \,\delta_{nm}, \quad \omega(x,\tau) > 0, \tag{3.1}$$

com $\omega(k;\tau)$ podendo ser apenas definido para $k \in \mathcal{N} = \{0, 1, 2, ...\}$ finito ou infinito e $\tau \in (\tau_1, \tau_2).$

Aqui, escrevemos uma versão do Teorema de Markov em uma forma apropriada para os nossos estudos de variável discreta.

Teorema 3.0.2 (Markov). Sejam, para $\tau \in (\tau_1, \tau_2)$, os polinômios $\{P_n(x; \tau)\}_{n \in \mathcal{N}}$ obtidos da relação de ortogonalidade (3.1) com respeito à função peso positiva $\omega(k; \tau)$ e assumindo que $\partial \omega(k; \tau) / \partial \tau$ é contínua em (τ_1, τ_2) e $k \in \mathcal{N}$. Assumindo também que para n fixo as séries

$$\sum_{k \in \mathcal{N}} k^j \frac{\partial \omega(k;\tau)}{\partial \tau}, \quad j = 0, \dots, 2n-1,$$
(3.2)

convergem uniformemente para τ em qualquer subconjunto compacto de (τ_1, τ_2) . Então os zeros de $P_n(x, \tau)$ são funções crescentes (decrescentes) de $\tau \in (\tau_1, \tau_2)$ se

$$\frac{\partial [\ln \omega(x;\tau)]}{\partial \tau}$$

é uma função crescente (decrescente) de x em um intervalo que contém \mathcal{N} .

Demonstração. Seja $n \in \mathbb{N}$ fixo. Sejam $z_1(\tau), z_2(\tau), \ldots, z_n(\tau)$ os zeros de $P_n(x; \tau)$.

A fórmula de quadratura de Gauss escrita abaixo é exata para qualquer polinômio p(x) de grau 2n - 1, veja Teorema 2.2.4,

$$\sum_{k \in \mathcal{N}} p(k)\omega(k;\tau) = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j(\tau) p(z_j(\tau))$$
(3.3)

com

$$\lambda_j(\tau) = \sum_{k \in \mathcal{N}} \frac{P_n(k;\tau)}{P'_n(z_j(\tau);\tau)(k-z_j(\tau))} \omega(k;\tau), \qquad (3.4)$$

sendo $P'_n(x;\tau)$ a derivada de $P_n(x;\tau)$ em relação a x.

Como as séries (3.2) convergem uniformemente em compactos de (τ_1, τ_2) , então a série

$$\sum_{k \in \mathcal{N}} p(k) \frac{\partial \omega(k;\tau)}{\partial \tau}$$

é uma combinação linear das séries (3.2) e, portanto, também converge uniformemente em compactos de (τ_1, τ_2) . Logo, o lado esquerdo de (3.3) é derivável em relação a τ e pode ser derivado termo a termo [31, Cap.X Teor. 7].

A equação $P_n(x;\tau) = 0$ nos fornece os zeros de $P_n(x;\tau)$ de forma implícita. Como os zeros de $P_n(x;\tau)$ são simples então $P_n(z_j(\tau),\tau) = 0$ e $\partial P_n(z_j(\tau),\tau)/\partial x \neq 0$. Assim, pelo teorema da função implícita [32, Cap.IV Teor. 1], $z_j(\tau)$ é derivável em relação a τ .

Os *n* coeficientes λ_j são determinados pelo sistema linear dado ao considerarmos que a fórmula de quadratura (3.3) é exata para *n* polinômios que formam a base de Π_{n-1} . Ao tomarmos, por exemplo, a base $\{x^i\}_{i=0}^{n-1}$, os elementos da matriz desse sistema são $z_j(\tau)^i$, $i = 0, \ldots, n-1$, $j = 1, \ldots, n$ e o vetor da equação tem elementos $\sum_{k \in \mathcal{N}} x^i \omega(k; \tau)$. Como cada um desses elementos é derivável em relação a τ , então a solução desse sistema linear que é o vetor $(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)^T$, é derivável em relação a τ . Logo, podemos derivar o lado direito de (3.3) em relação a τ .

Derivando a expressão (3.3) obtemos

$$\sum_{k \in \mathcal{N}} p(k) \frac{\partial \omega(k;\tau)}{\partial \tau} = \sum_{j=1}^{n} \left[\frac{d\lambda_j(\tau)}{d\tau} p(z_j(\tau)) + \lambda_j(\tau) p'(x) |_{x=z_j(\tau)} \frac{dz_j(\tau)}{d\tau} \right].$$

Vamos aplicar esse resultado para $p(x) = P_n(x;\tau)^2/(x-z_i(\tau))$, que é de grau 2n-1. Observe que

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{P_n(x;\tau)^2}{x - z_i(\tau)} \right) \Big|_{x = z_i(\tau)} = \begin{cases} 0 & \text{se } j \neq i \\ (P'_n(z_i(\tau);\tau))^2 & \text{se } j = i. \end{cases}$$

Portanto,

$$\sum_{k \in \mathcal{N}} \left(\frac{P_n(k;\tau)^2}{k - z_i(\tau)} \right) \frac{\partial \omega(k;\tau)}{\partial \tau} = \lambda_i(\tau) \left(P'_n(z_i(\tau);\tau) \right)^2 \frac{dz_i(\tau)}{d\tau}$$

Acrescentamos ao fator da esquerda o termo

$$-\frac{1}{\omega(z_i(\tau);\tau)}\frac{\partial\omega(z_i(\tau);\tau)}{\partial\tau}\sum_{k\in\mathcal{N}}\left(\frac{P_n(k;\tau)^2}{k-z_i(\tau)}\right)\omega(k;\tau)=0,$$

que é zero por causa da ortogonalidade. Então, obtemos

$$\sum_{k \in \mathcal{N}} \frac{P_n(k;\tau)^2}{k - z_i(\tau)} \left[\frac{\partial \omega(k;\tau)}{\partial \tau} - \frac{\omega(z_i(\tau);\tau)}{\omega(z_i(\tau);\tau)} \frac{\partial \omega(k;\tau)}{\partial \tau} \right] = \lambda_i(\tau) \left(P'_n(z_i(\tau);\tau) \right)^2 \frac{dz_i(\tau)}{d\tau}.$$

Sabemos que $\lambda_i(\tau) > 0$ e também $\omega(k;\tau) > 0$. Logo, o sinal de $dz_i(\tau)/d\tau$ será positivo (negativo) se o sinal de

$$\frac{1}{k-z_i(\tau)} \left[\frac{1}{\omega(k;\tau)} \frac{\partial \omega(k;\tau)}{\partial \tau} - \frac{1}{\omega(z_i(\tau);\tau)} \frac{\partial \omega(z_i(\tau);\tau)}{\partial \tau} \right]$$
(3.5)

for positivo (negativo). Como,

$$\frac{\partial \left[\ln \omega(x;\tau)\right]}{\partial \tau} = \frac{1}{\omega(k;\tau)} \frac{\partial \omega(k;\tau)}{\partial \tau},$$

se $\partial [\ln \omega(x; \tau)] / \partial \tau$ for uma função crescente (decrescente) em um intervalo que contém \mathcal{N} , esse intervalo também contém os zeros de $P_n(x)$ (Teorema 2.2.2), então a expressão (3.5) será sempre positiva (negativa). Logo, o sinal de $dz_{n,i}(\tau)/d\tau$ será positivo (negativo), ou seja, $z_{n,i}(\tau)$ será função crescente (decrescente) de τ .

Os polinômios da sequência de polinômios ortogonais $\{P_n(x;\tau)\}_{n\in\mathcal{N}}$ satisfazem a relação de recorrência de três termos da forma

$$xP_k(x;\tau) = \gamma_k(\tau)P_{k+1}(x;\tau) + \beta_k(\tau)P_k(x;\tau) + \delta_k(\tau)P_{k-1}(x;\tau), \quad k = 1, 2, \dots$$
(3.6)

com condições iniciais $P_0(x;\tau) = 1$, $P_1(x,\tau) = (x - \beta_0(\tau))/\gamma_0(\tau) \in \gamma_k(\tau)\delta_{k+1}(\tau) > 0$.

Como anteriormente, associamos a matriz $n\times n$

$$H_{n}(\tau) = \begin{pmatrix} \beta_{0}(\tau) & \gamma_{0}(\tau) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \delta_{1}(\tau) & \beta_{1}(\tau) & \gamma_{1}(\tau) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \delta_{2}(\tau) & \beta_{2}(\tau) & \gamma_{2}(\tau) & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & \delta_{n-2}(\tau) & \beta_{n-2}(\tau) & \gamma_{n-2}(\tau) \\ 0 & & 0 & \delta_{n-1}(\tau) & \beta_{n-1}(\tau) \end{pmatrix}$$

à essa relação de recorrência.

Seja $\{p_n(x,\tau)_{n\in\mathcal{N}}\}$ a sequência de polinômios paramétricos ortonormais com relação ao mesmo produto interno, que são dados por

$$p_0(x;\tau) = (\mu_0)^{-1/2}, \qquad p_k(x;\tau) = \left(\frac{\gamma_0\gamma_1\dots\gamma_{k-1}}{\mu_0\delta_1\delta_2\dots\delta_k}\right)^{1/2} P_k(x;\tau)$$

onde $\mu_0 = \int_a^b d\phi(x;\tau),$ e que satisfazem a relação de três termos

$$xp_k(x;\tau) = a_{k+1}(\tau)p_{k+1}(x;\tau) + b_k(\tau)p_k(x;\tau) + a_k(\tau)p_{k-1}(x;\tau),$$
(3.7)

 com

$$a_k(\tau) = \sqrt{\gamma_k(\tau)\delta_{k+1}(\tau)}, \quad e \quad b_k(\tau) = \beta_k(\tau) \qquad k \ge 0.$$
 (3.8)

Analogamente, consideramos a matriz

$$J_{n}(\tau) = \begin{pmatrix} b_{0}(\tau) & a_{0}(\tau) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_{0}(\tau) & b_{1}(\tau) & a_{1}(\tau) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{1}(\tau) & b_{2}(\tau) & a_{2}(\tau) & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & a_{n-3}(\tau) & b_{n-2}(\tau) & a_{n-2}(\tau) \\ 0 & & 0 & a_{n-2}(\tau) & b_{n-1}(\tau) \end{pmatrix}.$$
 (3.9)

Como vimos no capítulo anterior, Teorema 2.2.1, os zeros dos polinômios $P_n(x;\tau)$ são os mesmos dos polinômios $p_n(x;\tau)$ e, além disso, são autovalores das ma-

`

trizes $H_n(\tau) \in J_n(\tau)$, com autovetor associado ao autovalor $z_{n,j}$

$$\bar{P}_{n,j}(\tau) = (P_0(z_{n,j}(\tau)), P_1(z_{n,j}(\tau)), \dots, P_{n-1}(z_{n,j}(\tau)))^T \quad \text{em relação a } H_n(\tau), \text{ e}$$
$$\bar{p}_{n,j}(\tau) = (p_0(z_{n,j}(\tau)), p_1(z_{n,j}(\tau)), \dots, p_{n-1}(z_{n,j}(\tau)))^T \quad \text{em relação a } J_n(\tau).$$

Considere a matriz de derivadas de $J_n(\tau)$, em que cada elemento é o respectivo elemento de J_n derivado em relação a τ , dada por

$$J'_{n}(\tau) = \begin{pmatrix} b'_{0}(\tau) & a'_{0}(\tau) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a'_{0}(\tau) & b'_{1}(\tau) & a'_{1}(\tau) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a'_{1}(\tau) & b'_{2}(\tau) & a'_{2}(\tau) & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & a'_{n-3}(\tau) & b'_{n-2}(\tau) & a'_{n-2}(\tau) \\ 0 & & 0 & a'_{n-2}(\tau) & b'_{n-1}(\tau) \end{pmatrix}$$
(3.10)

O próximo teorema é uma versão do bem conhecido teorema de química quântica sobre a derivada de autovalores que dependem de um parâmetro, o qual foi provado em 1937 por Hans Hellmann, químico-físico alemão, pioneiro na química quântica, e, em 1939 por Richard P. Feynman, físico norte-americano ganhador do prêmio Nobel de Física em 1965, [16, 18, 22].

Teorema 3.0.3 (Hellmann-Feynman). Seja $z(\tau)$ autovalor de uma matriz simétrica $A(\tau)$ com autovetor $p(\tau)$. Suponha que os elementos de $A(\tau)$ e de $p(\tau)$ sejam diferenciáveis. Então, $z(\tau)$ é diferenciável e

$$z'(\tau) = \frac{p(\tau)^T A'(\tau) p(\tau)}{p(\tau)^T p(\tau)}.$$

Demonstração. O autovalor $z(\tau)$ é diferenciável, pois é dado por

$$z(\tau) = \frac{p(\tau)^T A(\tau) p(\tau)}{p(\tau)^T p(\tau)},$$

e esta é uma função diferenciável se $A(\tau)$
e $p(\tau)$ são diferenciáveis.

Derivando a equação $A(\tau) p(\tau) = z(\tau) p(\tau)$ obtemos

$$A'(\tau) \, p(\tau) + A(\tau) \, p'(\tau) = z'(\tau) \, p(\tau) + z(\tau) \, p'(\tau)$$

e, multiplicando à esquerda por $p(\tau)^T$, obtemos

$$p(\tau)^T A'(\tau) \, p(\tau) + p(\tau)^T A(\tau) \, p'(\tau) = z'(\tau) \, p(\tau)^T p(\tau) + z(\tau) \, p(\tau)^T p'(\tau).$$

Como $p(\tau)^T A(\tau) = (A(\tau) p(\tau))^T = z(\tau) p(\tau)^T$, então a equação acima é simplesmente

$$p(\tau)^T A'(\tau) p(\tau) = z'(\tau) p(\tau)^T p(\tau)$$

e, portanto,

$$z'(\tau) = \frac{p(\tau)^T A'(\tau) p(\tau)}{p(\tau)^T p(\tau)}$$

| E. | | |
|----|--|---|
| | | L |
| | | |
| | | L |
| | | |
| | | |

A proposição a seguir segue da aplicação do Teorema 3.0.3 para $A(\tau) = J_n(\tau)$. Para *n* fixo, vamos denotar $J'_n = J'_n(\tau)$ dada em (3.10), os autovalores $z_j(\tau) = z_{n,j}(\tau)$ e os autovetores por $\bar{p}_j = \bar{p}_{n,j}(\tau)$, $1 \le j \le n$.

Proposição 3.0.4. Para todo zero $z_j(\tau)$, $1 \le j \le n$, de $p_n(x;\tau)$, temos

$$z_j'(\tau) = \frac{\bar{p}_j^T J_n' \bar{p}_j}{\bar{p}_j^T \bar{p}_j}.$$

Ainda, se J'_n é uma matriz positiva (negativa) definida, então os zeros $z_j(\tau)$ de $p_n(x;\tau)$ são funções crescentes (decrescentes) de τ .

Uma maneira de verificar que a matriz J'_n é positiva definida é pelo Teorema de Wall-Wetzel. Esse teorema foi originalmente usado pelos autores em [42] para o estudo de frações contínuas positivas definidas, que relaciona certas matrizes triangulares definidas positivas com uma sequência encadeada. Uma outra demonstração é dada em [24].

Definição 3.1. Uma sequência $\{a_i\}_{i=1}^{\infty}$ é chamada sequência encadeada se existe $\{g_k\}_{k=0}^{\infty}$ tal que

- *i*) $0 \le g_0 < 1$, $0 < g_n < 1$, $n = 1, 2, 3, \dots$
- *ii)* $a_n = (1 g_{n-1})g_n, n = 1, 2, 3, \dots$
- A sequência $\{g_k\}_{k=0}^{\infty}$ é chamada sequência paramétrica.

Teorema 3.0.5 (Wall-Wetzel). Seja A_n uma matriz simétrica tridiagonal da forma

$$A_{n} = \begin{pmatrix} d_{0} & s_{0} & 0 & \cdots & 0 \\ s_{0} & d_{1} & s_{1} & \cdots & 0 \\ 0 & s_{1} & d_{2} & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & d_{n-1} \end{pmatrix}.$$
 (3.11)

Se $d_i > 0$ $(d_i < 0)$, i = 0, ..., n - 1, a matrix A_n é positiva (negativa) definida se, e somente se,

$$\left\{\frac{s_i^2}{d_i \, d_{i+1}}\right\}_{i=0,1,\dots,n-2}$$

formam uma sequência encadeada.

Em particular, $\{1/2, 1/4, 1/4, 1/4, ...\}$ é uma sequência encadeada, cuja sequência paramétrica é $g_0 = 0$ e $g_k = 1/2, k \ge 1$. Além disso, toda sequência limitada superiormente por uma sequência encadeada também é uma sequência encadeada [8, Teor. 5.7]. A Proposição 3.0.4, juntamente com o Teorema de Wall-Wetzel e os fatos anteriores implicam a seguinte proposição.

Proposição 3.0.6. Sejam $\{P_n(x)\}_{n \in \mathcal{N}}$ uma sequência de polinômios ortogonais que satisfaz a relação de recorrência (3.6), e $a_i(\tau)$ e $b_i(\tau)$ definidos por (3.8). Denote $a'_i = a'_i(\tau)$ e $b'_i = b'_i(\tau)$, que são os elementos de $J'_n(\tau)$ definida em (3.10). Se $b_i > 0$ $(b_i < 0), i = 0, ..., n - 1, e$

$$\frac{(a'_0)^2}{b'_0 b'_1} \le \frac{1}{2}, \quad \frac{(a'_i)^2}{b'_i b'_{i+1}} \le \frac{1}{4}, \ i = 1, \dots, n-2,$$

então os zeros $z_j(\tau)$, $1 \leq j \leq n$, de $p_n(x;\tau)$ são funções crescentes (decrescentes) de τ .

Outro resultado que usaremos é um corolário do Teorema de Perron-Frobenius [19, Teoremas 8.4.4 e 8.4.5] que diz respeito apenas ao maior autovalor.

Teorema 3.0.7 (Perron-Frobenius). Seja $H_n(\tau)$ uma matriz tridiagonal $n \times n$ com elementos fora da diagonal positivos. Se os elementos de $H_n(\tau)$ são funções nãodecrescentes (não-crescentes) de τ , então o maior autovalor de $H_n(\tau)$ é função nãodecrescente (não-crescente) de τ .

Demonstração. Seja, para uma matriz A quadrada,

$$\rho(A) = \max\{|\lambda| : \lambda \text{ é autovalor de } A\}.$$

Temos que, veja Corolário 5.6.14 de [19],

$$\rho(A) = \lim_{k \to \infty} \left(\|A^k\|_2 \right)^{1/k},$$

onde $||A||_2 = \left(\sum_{i,j=1}^n |a_{i,j}|^2\right)^{1/2}$ para $A = \{a_{i,j}\}_{i,j=1}^n$.

Para matrizes de mesma ordem $A \in B$, escreveremos $A \leq B$, se cada elemento de A é menor ou igual ao respectivo elemento de B. Se A é uma matriz com todos os elementos não negativos e $A \leq B$, também temos $A^k \leq B^k$, para todo k > 0. Por [19, (8.1.16)], segue que $||A^k||_2 \leq ||B^k||_2$. Logo, $(||A^k||_2)^{1/k} \leq (||B^k||_2)^{1/k}$, para todo k > 0 e, portanto, $\rho(A) \leq \rho(B)$.

O Teorema 8.4.4(b) diz que, se A é uma matriz irredutível e não negativa, então o seu maior autovalor é $\rho(A)$. A definição de matriz irredutível é dada em [19, (6.2.21) e (6.2.22)]. Para essa demonstração é suficiente que, toda matriz tridiagonal com elementos da subdiagonal positivos é uma matriz irredutível, veja [19, Teorema 6.2.24(e) e Definição 6.2.7].

Portanto, podemos concluir que, se $A \in B$ são matrizes tridiagonais, com os elementos da diagonal não negativos e os elementos da subdiagonal positivos, e $A \leq B$, então o maior autovalor de A é menor ou igual ao maior autovalor de B.

Seja $H_n(\tau)$ uma matriz tridiagonal $n \times n$ com elementos fora da diagonal

positivos e $d_1(\tau), d_2(\tau), \ldots, d_n(\tau)$ os elementos da diagonal. Definimos

$$\bar{d}(\tau) = \begin{cases} 0, & \text{se } d_i(\tau) \ge 0 \ \forall i, \\ -\min\{d_1(\tau), d_2(\tau), \dots, d_n(\tau)\}, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Assim, a matriz $\bar{H}_n(\tau) = H_n(\tau) + \bar{d}(\tau) I$ é tridiagonal, com os elementos da diagonal não negativos e os elementos da subdiagonal positivos.

Se os elementos de $H_n(\tau)$ são funções não-decrescentes de τ , então para todo $\epsilon > 0$, temos que $H_n(\tau) \leq H_n(\tau + \epsilon)$. Logo,

$$H_n(\tau) + \bar{d}(\tau) I \le H_n(\tau + \epsilon) + \bar{d}(\tau) I.$$

Temos que, $A = H_n(\tau) + \bar{d}(\tau) I$ e $B = H_n(\tau + \epsilon) + \bar{d}(\tau) I$ são matrizes tridiagonais, com os elementos da diagonal não negativos, os elementos da subdiagonal positivos e $A \leq B$. Logo, o maior autovalor de $H_n(\tau) + \bar{d}(\tau) I$ é menor ou igual ao maior autovalor de $H_n(\tau + \epsilon) + \bar{d}(\tau) I$. Seja a_{τ} o maior autovalor de $H_n(\tau) = a_{\tau+\epsilon}$ o maior autovalor de $H_n(\tau + \epsilon)$. Então, o maior autovalor de $H_n(\tau) + \bar{d}(\tau) I$ é $a_{\tau} + \bar{d}(\tau)$ e o maior autovalor de $H_n(\tau + \epsilon) + \bar{d}(\tau) I$ é $a_{\tau+\epsilon} + \bar{d}(\tau)$, e eles satisfazem

$$a_{\tau} + \bar{d}(\tau) \le a_{\tau+\epsilon} + \bar{d}(\tau).$$

Logo, $a_{\tau} \leq a_{\tau+\epsilon}$.

Assim, concluímos que, se $H_n(\tau)$ uma matriz tridiagonal com elementos fora da diagonal positivos e seus elementos são funções não-decrescentes de τ , então os seus autovalores também são funções não-decrescentes de τ .

Para o caso em que os elementos da matriz são funções não-crescentes de τ , a demonstração deve ser feita para $H_n(\tau)$ e $H_n(\tau - \epsilon)$, tomando o incremento da diagonal em relação à matriz $H_n(\tau - \epsilon)$. Isto é, se $d_1(\tau, \epsilon), d_2(\tau, \epsilon), \ldots, d_n(\tau, \epsilon)$ são os elementos da diagonal de $H_n(\tau - \epsilon)$, definimos

$$\bar{d}(\tau,\epsilon) = \begin{cases} 0, & \text{se } d_i(\tau,\epsilon) \ge 0 \ \forall i, \\ -\min\{d_1(\tau,\epsilon), d_2(\tau,\epsilon), \dots, d_n(\tau,\epsilon)\}, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Dessa forma, $H_n(\tau - \epsilon) + \bar{d}(\tau, \epsilon) I \leq H_n(\tau) + \bar{d}(\tau, \epsilon) I$, são matrizes tridiagonais, com os elementos da diagonal não negativos e os elementos da subdiagonal positivos, daí o resultado segue de modo análogo ao anterior.

Capítulo 4

Limitantes para zeros de polinômios ortogonais de variável contínua

Neste capítulo colocamos os melhores resultados que temos encontrado de limitantes explícitos para os zeros de polinômios ortogonais clássicos de variável contínua: Hermite, Laguerre e Jacobi. Fizemos comparações desses resultados e destacamos onde cada resultado é o melhor dentre os demais.

Daremos definições para alguns polinômios através de funções hipergeométricas. Uma função hipergeométrica ${}_{n}F_{m}$ é definida por

$${}_{n}F_{m}\left(\begin{array}{c|c}a_{1},a_{2},\ldots,a_{n}\\b_{1},b_{2},\ldots,b_{m}\end{array}\middle|x\right) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a_{1})_{k}(a_{2})_{k}\ldots(a_{n})_{k}}{k!\,(b_{1})_{k}(b_{2})_{k}\ldots(b_{m})_{k}}x^{k}$$
(4.1)

sendo $(a)_k$ o símbolo de Pochhammer que é o produto de k termos do seguinte modo $(a)_k = a(a+1)\dots(a+k-1), e b_j \neq -(m-1), -(m-2), -(m-3), \dots, 0$ para $j = 1, \dots, m.$

Observe que se houver algum $a_j = -r$, sendo -r um número inteiro negativo, então ${}_nF_m$ será um polinômio de grau no máximo r. Se $a_j = -r$ for o maior inteiro negativo, então ${}_nF_m$ é um polinômio de grau r.

4.1 Polinômios de Hermite

Os polinômios de Hermite são dados através de função hipergeométrica por, veja [26],

$$H_n(x) = (2x)^n {}_2F_0 \left(\begin{array}{c|c} -n/2, -(n-1)/2 \\ - \end{array} \right) - \frac{1}{x^2} \right).$$

Denotamos os zeros de $H_n(x)$ em ordem decrescente por

$$h_{n,n} < h_{n,n-1} < \ldots < h_{n,2} < h_{n,1}.$$

Lembramos que os polinômios de Hermite são simétricos em relação à origem, isto é, $H_n(x) = (-1)^n H_n(-x)$, e portanto

$$h_{n,n-j+1} = -h_{n,j}$$
 para $j = 1, 2, \dots, n$

O primeiro resultado que temos fornece quotas superiores para os zeros positivos, que são $h_{n,\lfloor n/2 \rfloor} < \ldots < h_{n,1}$, e por causa da simetria, também temos quotas inferiores para os zeros negativos, $h_{n,n} < \ldots < h_{\lfloor (n+3)/2 \rfloor}$, onde o símbolo $\lfloor x \rfloor$ denota o maior inteiro menor do que x. Este resultado é encontrado em [4, (1.5)].

Proposição 4.1.1. Os zeros positivos de $H_n(x)$ são limitados por

$$h_{n,j} \le \sqrt{2n-2} \cos \frac{(j-1)\pi}{n-1}, \quad j = 1, \dots, \lfloor n/2 \rfloor.$$

Simultaneamente, os zeros negativos de $H_n(x)$ são limitados por

$$-\sqrt{2n-2}\cos\frac{(j-1)\pi}{n-1} \le h_{n,n-j+1}, \quad j = 1, \dots, \lfloor n/2 \rfloor.$$

Em particular,

$$-\sqrt{2n-2} \le h_{n,n} < h_{n,1} \le \sqrt{2n-2}.$$

A última desigualdade é obtida pelos limitantes inferior e superior dos zeros extremos, $h_{n,n}$ e $h_{n,1}$, do polinômio de Hermite. Para o maior zero de $H_n(x)$ apresentamos dois resultados que são ainda melhores. Em [11, Teorema 2] é fornecido o limitante: **Proposição 4.1.2.** O maior zero de $H_n(x)$ satisfaz

$$h_{n,1}^2 \le \frac{n^2 - \frac{3}{2}n + 2 + (n-2)\sqrt{n^2 + n + 4}}{n+4}$$
(4.2)

para todo $n \in \mathbb{N}$ e a estimativa mais exata

$$h_{n,1}^2 \le \frac{n^2 - \frac{5}{2}n + \frac{15}{2} + (n-3)\sqrt{n^2 + n + 10}}{n+3}$$
(4.3)

é válida se n é um número ímpar.

Quando n é um valor grande, são conhecidos limitantes mais precisos, que de fato são assintoticamente exatos. Esses limitantes são fornecidos por Szegő em [41, (6.32.3)] e são dados na próxima proposição.

Proposição 4.1.3. Para o maior zero de $H_n(x)$, temos

$$h_{n,1} \le (2n+1)^{1/2} - 6^{-1/3}(2n+1)^{-1/6}i_1,$$

sendo i_1 o menor zero da função de Airy [41, 1.81]. Como $6^{-1/3}i_1 \ge 1.85575$, então

$$h_{n,1} \le (2n+1)^{1/2} - 1.85575 (2n+1)^{-1/6}.$$
 (4.4)

Notamos que a potência $6^{-1/3}$ aparece errada como sendo $6^{1/2}$ em algumas versões do livro de Szegő. Verificamos que o valor correto é como escrito na proposição acima, $6^{-1/3}$.

Uma estimativa muito interessante fornece um limitante inferior para o menor zero positivo de Hermite. O Teorema 2 de [11] fornece:

Proposição 4.1.4. O menor zero positivo de $H_n(x)$ é limitado inferiormente por

$$\frac{n^2 - \frac{3}{2}n + 2 - (n-2)\sqrt{n^2 + n + 4}}{n+4} \le h_{n,\lfloor n/2 \rfloor}^2.$$
(4.5)

Se n é ímpar, o limitante é mais preciso e dado por

$$\frac{n^2 - \frac{5}{2}n + \frac{15}{2} - (n-3)\sqrt{n^2 + n + 10}}{n+3} \le h_{n,\lfloor n/2 \rfloor}^2.$$
(4.6)

Verificamos que, quando $n \leq 8$, os limites (4.2) e (4.3) são melhores do que (4.4). Enquanto o limite para os zeros extremos da Proposição 4.1.1 são sempre piores. Vale mencionar que a Proposição 4.1.1 fornece limitantes superiores para todos os zeros positivos de Hermite e a Proposição 4.1.4 fornece um tipo de limitante diferente dos demais.

4.2 Polinômios de Laguerre

Os polinômios de Laguerre que usaremos são definidos por

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{(\alpha+1)_n}{n!} {}_1F_1 \left(\begin{array}{c|c} -n \\ \alpha+1 \end{array} \middle| x \right),$$

para $\alpha > -1$. Seus zeros são denotados em ordem decrescente por

$$0 < x_{n,n}(\alpha) < \ldots < x_{n,1}(\alpha).$$

O melhor resultado encontrado na literatura de limitantes para os zeros extremos de $L_n^{(\alpha)}(x)$ para valores de α grandes, isto é, quando $\alpha \to \infty$, são dados em [27, Teorema 1]. Escrevemos na proposição abaixo esses valores.

Proposição 4.2.1. Os zeros extremos de $L_n^{(\alpha)}(x)$ são limitados por

$$\left(\sqrt{n+\alpha+1} - \sqrt{n}\right)^2 + 3\frac{\left(\sqrt{n+\alpha+1} - \sqrt{n}\right)^{4/3}}{\left(4\sqrt{n(n+\alpha+1)}\right)^{1/3}} < x_{n,n}(\alpha)$$

e

$$x_{n,1}(\alpha) < \left(\sqrt{n+\alpha+1} + \sqrt{n}\right)^2 - 3\frac{\left(\sqrt{n+\alpha+1} + \sqrt{n}\right)^{4/3}}{\left(4\sqrt{n(n+\alpha+1)}\right)^{1/3}} + 2.$$

O melhor limitante para o maior zero dos polinômios de Laguerre quando n tende a infinito, é dado por Szegő em [41, (6.32.2)].

Proposição 4.2.2. O maior zero de $L_n^{(\alpha)}(x)$ é limitado por

$$x_{n,1}(\alpha) \le ((4n+2\alpha+2)^{1/2}-6^{-1/3}(4n+2\alpha+2)^{-1/6}i_1)^2,$$

sendo i_1 o menor zero da função de Airy [41, 1.81]. O valor i_1 é o melhor valor possível para $n \to \infty$. Como $6^{-1/3}i_1 \ge 1.85575$, então

$$x_{n,1}(\alpha) \le ((4n+2\alpha+2)^{1/2} - 1.85575(4n+2\alpha+2)^{-1/6})^2.$$
(4.7)

Notamos que, aqui também aparece um erro na potência $6^{-1/3}$ no livro de Szegő, [41, (6.32.2)].

Em [11, Teorema 1], é fornecido mais um limitante para os zeros extremos de Laguerre, que são melhores do que os anteriores para valores pequenos de $n \in \alpha$.

Proposição 4.2.3. Os zeros extremos de $L_n^{(\alpha)}$ são limitados por

$$\frac{2n^2 + n(\alpha - 1) + 2(\alpha + 1) - 2(n - 1)\sqrt{n^2 + (n + 2)(\alpha + 1)}}{n + 2} < x_{n,n}(\alpha)$$

e

$$x_{n,1}(\alpha) < \frac{2n^2 + n(\alpha - 1) + 2(\alpha + 1) + 2(n - 1)\sqrt{n^2 + (n + 2)(\alpha + 1)}}{n + 2}$$

4.3 Polinômios de Jacobi

Usaremos a definição para os polinômios de Jacobi

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{(\alpha+1)_n}{n!} {}_2F_1 \left(\begin{array}{c} -n, n+\alpha+\beta+1\\ \alpha+1 \end{array} \middle| \frac{1-x}{2} \end{array} \right).$$

Seus zeros são denotado por $x_{n,j}(\alpha,\beta)$, arranjados em ordem decrescente, isto é

$$-1 < x_{n,n}(\alpha,\beta) < \ldots < x_{n,1}(\alpha,\beta) < 1.$$

Os melhores resultados com limitantes para esses zeros que encontramos são dois resultados recentes. O primeiro deles foi obtido em [11, Teorema 1], no qual se estabelece:

Proposição 4.3.1. Os zeros extremos $x_{1,1}(\alpha,\beta)$ e $x_{n,n}(\alpha,\beta)$ dos polinômios de Jacobi $P_n^{(\alpha,\beta)}$ são limitados por

$$\frac{B-4(n-1)\sqrt{\Delta}}{A} \leq x_{n,n}(\alpha,\beta)$$
$$x_{n,1}(\alpha,\beta) \leq \frac{B+4(n-1)\sqrt{\Delta}}{A},$$

em que

$$B = (\beta - \alpha)((\alpha + \beta + 6)n + 2(\alpha + \beta)),$$

$$A = (2n + \alpha + \beta)(n(2n + \alpha + \beta) + 2(2 + \alpha + \beta)),$$

$$\Delta = n^{2}(n + \alpha + \beta + 1)^{2} + (\alpha + 1)(\beta + 1)(n^{2} + (\alpha + \beta + 4)n + 2(\alpha + \beta)).$$

O segundo é um limite para os zeros dos polinômios de Jacobi obtido por Krasikov [27, Teorema 2].

Proposição 4.3.2. Os zeros extremos $x_{1,1}(\alpha,\beta)$ e $x_{n,n}(\alpha,\beta)$ dos polinômios de Jacobi $P_n^{(\alpha,\beta)}$ são limitados por

$$C + 3 \frac{(1 - C^2)^{2/3}}{(2R)^{1/3}} \leq x_{n,n}(\alpha, \beta)$$

$$x_{n,1}(\alpha, \beta) \leq D - 3 \frac{(1 - D^2)^{2/3}}{(2R)^{1/3}} + \frac{4(\alpha - \beta)(\alpha + \beta + 2)}{((2n + \alpha + \beta + 1)^2 + 2\alpha + 2\beta + 3)^{3/2}},$$

sendo

$$R = \sqrt{((2n + \alpha + \beta + 1)^2 - (\alpha - \beta)^2 + 2\alpha + 2\beta + 3)(4n^2 + 4n(\alpha + \beta + 1))},$$

$$C = -(R + (\alpha - \beta)(\alpha + \beta + 2))((2n + \alpha + \beta + 1)^2 + 2\alpha + 2\beta + 3)^{-1},$$

$$D = (R - (\alpha - \beta)(\alpha + \beta + 2))((2n + \alpha + \beta + 1)^2 + 2\alpha + 2\beta + 3)^{-1}.$$

Em geral, os limitantes da Proposição 4.3.2 são melhores do que os da Proposição 4.3.1 para valores de α e β grandes. Por outro lado, se α e β são pequenos, para polinômios de até certo grau, os limitantes da Proposição 4.3.1 são melhores do que os da Proposição 4.3.2. Se os valores de α e β são desproporcionais, então para os menores valores de n os limitantes da Proposição 4.3.1 são melhores e a partir de certo grau os limitantes da Proposição 4.3.2 são melhores.

Capítulo 5

Monotonicidade e limitantes para zeros de polinômios ortogonais de variável discreta clássicos

Neste capítulo descrevemos os resultados por nós estabelecidos sobre monotonicidade de certas funções que envolvem os zeros de polinômios ortogonais de variável discreta clássicos: Charlier, Meixner, Kravchuck e Hahn, com relação aos seus parâmetros.

Inicialmente mencionamos que os zeros dos polinômios de Charlier, Meixner, Kravchuck e Hahn são funções monotônicas de seus parâmetros, fatos descritos no teorema a seguir. Este comportamento dos zeros dos polinômios ortogonais de variável discreta clássicos com relação aos seus parâmetros já é um fato conhecido. No artigo [36] é feita a demonstração da mesma forma que será feita nesta tese, no início das seções 1, 2, 3 e 4 deste capítulo. Tais demonstrações seguem do Teorema de Markov, apresentado no Capítulo 3.

Teorema 5.0.3. Seja $\{P_n(x)\}$ qualquer uma das quatro sequências clássicas de polinômios ortogonais de variável discreta (Charlier, Meixner, Kravchuk e Hahn). Então, para $n, j \in \mathbb{N}$ com $1 \leq j \leq n$, temos que

• $c_{n,j}(a)$ são funções crescentes de a, para $a \in (0, \infty)$;

- $m_{n,j}(\beta, c)$ são funções crescentes de ambos $\beta \in (0, \infty)$ e $c \in (0, 1)$;
- κ_{n,j}(p, N) são funções crescentes do parâmetro p ∈ (0, 1) e são funções crescentes de N no sentido que κ_{n,j}(p, N) < κ_{n,j}(p, N + 1) para N ≥ n;
- q_{n,j}(α, β, N) são funções crescentes de α ∈ (-1,∞), funções decrescentes de β ∈ (-1,∞) e funções crescentes de N, ou seja, q_{n,j}(α, β, N) < q_{n,j}(α, β, N+1) sendo N ≥ n.

As demonstrações desses fatos serão feitas separadamente para cada família, no início das próximas seções.

Os teoremas das seções 1, 2, 3, 4 e 5 deste capítulo são os nossos resultados. Provamos, com a colaboração do Prof. Dr. Dimitar K. Dimitrov, do Prof. Dr. Ivan Area e do Prof. Dr. Eduardo Godoy, esses dois últimos da Universidade de Vigo - Espanha, que certas funções que envolvem os zeros dos polinômios ortogonais de variável discreta clássicos possuem um comportamento monotônico com relação aos parâmetros analisados. Além de caracterizar melhor o comportamento dos zeros dos polinômios ortogonais de variável discreta clássicos com relação a variação de algum parâmetro, estes resultados implicam em limitantes muito precisos para os zeros de tais polinômios. Estes resultados foram descritos no artigo [3].

Os limitantes para os zeros dos polinômios de Charlier, Meixner, Kravchuck e Hahn são dados em função dos zeros dos polinômios de Hermite, Laguerre, Jacobi e Hermite, respectivamente. Esses limitantes têm as seguintes vantagens: resgatam o comportamento dos zeros dos polinômios de Charlier, Meixner, Kravchuck e Hahn, que são funções implícitas destes parâmetros; dependem dos zeros dos polinômios ortogonais de variável contínua clássicos, para os quais existe vasto estudo e limitantes explícitos muito precisos como os que estão no Capítulo 4; com o uso dos limitantes do Capítulo 4 pode-se obter limitantes explícitos para os zeros dos polinômios de Charlier, Meixner, Kravchuck e Hahn e testes numéricos comprovam que estes limitantes são, para a maior parte dos valores dos parâmetros, os melhores limitantes encontrados para tais zeros. Sejam, os zeros dos polinômios de Charlier, $C_n(x; a)$, denotados por $c_{n,j}(a)$, os zeros dos polinômios de Meixner, $M_n(x; \beta, c)$, denotados por $m_{n,j}(\beta, c)$, os zeros dos polinômios de Kravchuck, $K_n(x; p, N)$, denotados por $\kappa_{n,j}(p, N)$, e os zeros dos polinômios de Hahn, $Q_n(x; \alpha, \beta, N)$, por $q_{n,j}(\alpha, \beta, N)$.

A notação e as fórmulas dadas neste capítulo foram obtidas de [26]. Lembramos que as funções hipergeométricas ${}_{n}F_{m}$ são definidas por (4.1).

Os gráficos e os dados das tabelas numéricas foram obtidos no programa Mathematica, os valores numéricos para os zeros dos polinômios foram obtidos pelo comando NSolve.

5.1 Polinômios de Charlier

Os polinômios de Charlier, $C_n(x; a)$, a > 0, que satisfazem a relação de ortogonalidade

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^k}{k!} C_n(k;a) C_m(k;a) = a^{-n} e^a n! \,\delta_{n,m}$$

 $\operatorname{com} n, m \in \mathbb{N}$, são definidos por [8]

$$C_n(x;a) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \binom{x}{k} k! \frac{(-1)^k}{a^k}$$

ou, através de função hipergeométrica, por

$$C_n(x;a) = {}_2F_0\left(\begin{array}{c} -n, -x \\ -\end{array} \middle| -\frac{1}{a} \right).$$

Os polinômios de Charlier satisfazem a relação de recorrência de três termos

$$-xC_k(x;a) = aC_{k+1}(x;a)(k+a) - C_k(x;a) + kC_{k-1}(x;a)$$
(5.1)

e também a relação de diferença

$$C_n(x+1;a) = \frac{x+a-n}{a} C_n(x;a) - \frac{x}{a} C_n(x-1;a), \quad a > 0.$$

A equação de diferença dos polinômios de Charlier satisfaz a hipótese (ii)do Teorema 2.3.1, pois $B_n(x) = x/a > 0$ e, portanto, os zeros de $C_n(x; a)$ tem distância maior do que um entre si.

A monotonicidade dos zeros $c_{n,j}(a)$ com relação ao parâmetro a pode ser provada através do Teorema 3.0.2. Para isto, calculamos a derivada logarítmica de $\omega(k; a) = a^k/k!$. Consideremos a extensão contínua para $x \in (0, \infty), \, \omega(x; a) = a^x/\Gamma(x+$ 1), sendo $\Gamma(x)$ a função Gama, que é definida por $\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt$, veja por exemplo [41, Seção 1.7]. Assim,

$$\frac{\partial}{\partial a} \left[\ln \frac{a^x}{\Gamma(x+1)} \right] = \frac{\partial}{\partial a} \left[x \ln(a) + \ln(\Gamma(x+1)) \right] = \frac{x}{a},$$

que é função crescente de $x \in (0, \infty)$. Então, o Teorema de Markov imediatamente implica que os zeros de $C_n(x; a)$ são funções crescentes de a > 0. A Figura 5.1 ilustra esse resultado. Nesta figura estão os gráficos dos zeros de $C_5(x; a)$ como funções do parâmetro a, sendo que cada curva corresponde a um dos zeros $c_{5,1}(a)$, $c_{5,2}(a)$, $c_{5,3}(a)$, $c_{5,4}(a)$ e $c_{5,5}(a)$, que são funções contínuas do parâmetro a.



Figura 5.1: Gráficos de $c_{5,1}(a)$, $c_{5,2}(a)$, $c_{5,3}(a)$, $c_{5,4}(a)$ e $c_{5,5}(a)$ como funções do parâmetro *a*.

Para obtermos os resultados de valores limitantes para os zeros vamos relacionar os zeros dos polinômios de Charlier $C_n(x; a)$ com os zeros dos polinômios de Hermite

$$H_n(x) = (2x)^n {}_2F_0 \left(\begin{array}{c} -n/2, -(n-1)/2 \\ - \end{array} \right)$$

baseados na relação limite [26, (2.12.1)]

$$\lim_{a \to \infty} (2a)^{\frac{n}{2}} C_n(a + x\sqrt{2a}; a) = (-1)^n H_n(x).$$

Denotamos os zeros de $C_n(x; a)$ dependentes do parâmetro a por

$$c_{n,n}(a) < \ldots < c_{n,2}(a) < c_{n,1}(a),$$

e os zeros de $H_n(x)$ por

$$h_{n,n} < \ldots < h_{n,2} < h_{n,1},$$

ambos ordenados em ordem decrescente.

Pelo fato de que zeros são funções contínuas dos coeficientes dos polinômios temos

$$(c_{n,j}(a) - a) / \sqrt{2a} \to h_{n,j} \quad \text{quando} \quad a \to \infty.$$
 (5.2)

Teorema 5.1.1. Seja $n \in \mathbb{N}$ e a > 0. Então, para todo $j, 1 \leq j \leq n$, as funções $(c_{n,j}(a) - a)/\sqrt{2a}$ decrescem $e(c_{n,j}(a) - a - n + 1)/\sqrt{2a}$ crescem para $a \in (0, \infty)$. Além disso, as desigualdades

$$a + \sqrt{2a} h_{n,j} \le c_{n,j}(a) \le a + n - 1 + \sqrt{2a} h_{n,j},$$

são satisfeitas para $j = 1, \ldots, n$.

Demonstração. Sejam

$$\tilde{C}_n(x;a) = (-1)^n (2a)^{\frac{n}{2}} C_n(a + x\sqrt{2a};a)$$

com zeros $(c_{n,j}(a) - a)/\sqrt{2a}$.

Fazendo a mudança de variável de x para $a + x\sqrt{2a}$ na relação de recorrência (5.1), obtemos que os polinômios $\tilde{C}_n(x; a)$ satisfazem a relação de recorrência

$$x\tilde{C}_k(x;a) = \frac{1}{2}\tilde{C}_{k+1}(x;a) + \frac{k}{\sqrt{2a}}\tilde{C}_k(x;a) + k\tilde{C}_{k-1}(x;a).$$

Os correspondentes polinômios ortonormais de $\tilde{C}_n(x; a)$ satisfazem a relação de recorrência de três termos da forma (3.7) com

$$a_k(a) = \sqrt{\frac{k+1}{2}}$$
 e $b_k(a) = \frac{k}{\sqrt{2a}}$.

Temos que $a'_k(a)$ não depende de a, portanto $a'_k(a) = 0$ para todo k e $b'_k(a) = -k(2a)^{-3/2}$ para k = 0, ..., n-1. Então, a matriz tridiagonal $J'_n(a)$, definida em (3.10), é uma matriz diagonal com elementos da diagonal $b'_k(a)$ negativos com exceção do primeiro elemento que é nulo. Logo $J'_n(a)$ é uma matriz definida negativa, então o
Teorema de Hellmann–Feynman, mais especificamente a Proposição 3.0.4, implica que os zeros de $\tilde{C}_n(x; a)$, que são $(c_{n,j}(a) - a) / \sqrt{2a}$, são funções decrescentes de a.

Pela relação limite do início dessa seção, vimos que $(c_{n,j}(a) - a) / \sqrt{2a}$ convergem para $h_{n,j}$ quando $a \to \infty$. Pelo comportamento monotonicamente decrescente em relação a a e pela convergência para $h_{n,j}$, temos que

$$h_{n,j} \le \frac{(c_{n,j}(a) - a)}{\sqrt{2a}}, \quad j = 1, \dots, n$$

Isolando $c_{n,j}(a)$, obtemos o resultado do teorema

$$a + \sqrt{2a}h_{n,j} \le c_{n,j}(a), \quad j = 1, \dots, n.$$
 (5.3)

Agora, para n fixo, vamos considerar os polinômios de grau $k,\,1\leq k\leq n,$ dados por

$$\hat{C}_k(x;a) = (-1)^k (2a)^{\frac{k}{2}} C_k(a+n-1+x\sqrt{2a};a),$$

cujos zeros são $(c_{k,j}(a) - a - n + 1) / \sqrt{2a}, 1 \le j \le k.$

Fazendo a mudança de variável apropriada em (5.1), obtemos que $\hat{C}_k(x; a)$ satisfazem

$$x\hat{C}_k(x;a) = \frac{1}{2}\hat{C}_{k+1}(x;a) - \frac{n-k-1}{\sqrt{2a}}\hat{C}_k(x;a) + k\hat{C}_{k-1}(x;a).$$

Os correspondentes polinômios ortonormais de $\hat{C}_k(x; a)$ obe decem a relação de recorrência de três termos (3.7) com

$$a_k(a) = \sqrt{\frac{k+1}{2}}$$
 e $b_k(a) = \frac{-n+k+1}{\sqrt{2a}}$.

Os elementos da matriz correspondente $J'_n(a)$, são $a'_k(a) = 0, k = 0, \ldots, n-2$, e $b'_k(a) = (n-k-1)/(2a)^{3/2} > 0, k = 0, \ldots, n-1$. Como $J'_n(a)$ é uma matriz diagonal com elementos da diagonal positivos com exceção último que é nulo, a matriz $J'_n(a)$ é definida positiva e, pela Proposição 3.0.4, temos que $(c_{n,j}(a) - a - n + 1)/\sqrt{2a}$ são funções crescentes de a.

Do limite (5.2) também obtemos que

$$(c_{n,j}(a) - a - n + 1) / \sqrt{2a} \to h_{n,j}$$
 quando $a \to \infty$.

O comportamento monotonicamente crescente de $(c_{n,j}(a) - a - n + 1) / \sqrt{2a}$ e a convergência acima nos mostram que

$$\frac{c_{n,j}(a) - a - n + 1}{\sqrt{2a}} \le h_{n,j}, \quad j = 1, \dots, n,$$

que implica

$$c_{n,j}(a) \le a + n - 1 + \sqrt{2a} h_{n,j}, \quad j = 1, \dots, n.$$
 (5.4)

Com este resultado em mãos, podemos usar os limitantes para os zeros dos polinômios de Hermite dados no Capítulo 4 para obter limitantes explícitos para os zeros dos polinômios de Charlier.

Usando os limitantes para os zeros positivos de Hermite dados na Proposição 4.1.1, imediatamente obtemos:

Corolário 5.1.1. Sejam $n \in \mathbb{N}$, $n \ge 2$ $e \ a > 0$. Então as designaldades

$$c_{n,j}(a) \le a + n - 1 + 2\sqrt{(n-1)a} \cos \frac{(j-1)\pi}{n-1}$$

e

$$a - 2\sqrt{(n-1)a} \cos \frac{(j-1)\pi}{n-1} \le c_{n,n+1-j}(a)$$

são satisfeitas para $j = 1, ..., \lfloor n/2 \rfloor$. Em particular, os zeros dos polinômios de Charlier satisfazem

$$a - 2\sqrt{(n-1)a} \le c_{n,j}(a) \le a + n - 1 + 2\sqrt{(n-1)a}, \quad j = 1, \dots, n.$$

Para os zeros extremos de Hermite um melhor limitante é dado pela Proposição 4.1.2. Então (5.3) e (5.4) implicam:

Corolário 5.1.2. Sejam $n \in \mathbb{N}$, $n \ge 2$, $e \ a > 0$. Então os zeros de Charlier satisfazem

$$a - \sqrt{a \, \frac{2n^2 - 3n + 4 + 2(n-2)\sqrt{n^2 + n + 4}}{n+4}} \le c_{n,n}(a) \tag{5.5}$$

e

$$c_{n,1}(a) \le a + n - 1 + \sqrt{a \, \frac{2n^2 - 3n + 4 + 2(n-2)\sqrt{n^2 + n + 4}}{n+4}}.$$
(5.6)

Se n é um inteiro ímpar, então melhores limitantes são dados por

$$a - \sqrt{a \, \frac{2n^2 - 5n + 15 + 2(n-3)\sqrt{n^2 + n + 10}}{n+3}} \le c_{n,n}(a) \tag{5.7}$$

e

$$c_{n,1}(a) \le a + n - 1 + \sqrt{a \, \frac{2n^2 - 5n + 15 + 2(n-3)\sqrt{n^2 + n + 10}}{n+3}}.$$
 (5.8)

O melhor limite de $h_{n,1}$ para valores grandes de n é o fornecido na Proposição 4.1.3. Aplicando esse resultado em (5.3) e (5.4) obtemos:

Corolário 5.1.3. Sejam $n \in \mathbb{N}$, $n \ge 2$, $e \mid a > 0$. Então,

$$a - \sqrt{(4n+2)a} + 1.85575\sqrt{2a}(2n+1)^{-1/6} \le c_{n,n}(a)$$

e

$$c_{n,1}(a) \le a + n - 1 + \sqrt{(4n+2)a} - 1.85575\sqrt{2a}(2n+1)^{-1/6}$$

são satisfeitas.

Como visto na Seção 1 do Capítulo 4, quando $n \leq 8$, os limitantes (4.2) e (4.3) são melhores do que (4.4). Então, do mesmo modo acontece com os corolários acima, o resultado do Corolário 5.1.2 é melhor do que o resultado do Corolário 5.1.3 quando $n \leq 8$.

Além desses, podemos formular um corolário que limita os zeros dos polinômios de Charlier centralmente, isto é, os $\lfloor n/2 \rfloor$ maiores zeros de $C_n(x; a)$ serão limitados inferiormente e os $\lfloor n/2 \rfloor$ menores zeros de $C_n(x; a)$ serão limitados superiormente. Para isso, usamos a Proposição 4.1.4.

Corolário 5.1.4. Sejam $n \in \mathbb{N}$, $n \ge 2$, $e \ a > 0$. Então, são satisfeitas

$$a + \sqrt{a \, \frac{2n^2 - 3n + 4 - 2(n-2)\sqrt{n^2 + n + 4}}{n+4}} \le c_{n,\lfloor n/2 \rfloor}(a)$$

e

$$c_{n,\lfloor(n+3)/2\rfloor}(a) \le a+n-1 - \sqrt{a \, \frac{2n^2 - 3n + 4 - 2(n-2)\sqrt{n^2 + n + 4}}{n+4}}$$

Ilustramos nossos resultados com a figura abaixo. Ela mostra os zeros de $C_5(x; a)$, em linhas contínuas e, em linhas pontilhadas, os limitantes para os zeros extremos fornecidos no Corolário 5.1.2 e os limitantes centrais são do Corolário 5.1.4.



Figura 5.2: Gráficos em relação ao parâmetro a dos zeros de $C_5(x; a)$ em traço contínuo, dos limitantes para os zeros extremos de grau ímpar do Corolário 5.1.2 e dos limitantes centrais do Corolário 5.1.4, ambos os limitantes em traços pontilhados.

Os melhores limitantes conhecidos na literatura para os zeros de Charlier foram obtidos recentemente por Krasikov e Zarkh [28, Teor.5]. Os autores provaram que

$$c_{n,1}(a) < (\sqrt{a} + \sqrt{n})^2 - \frac{3a^{1/6}(\sqrt{a} + \sqrt{n})^{2/3}}{2^{2/3}n^{1/6}}$$
(5.9)

е

$$(\sqrt{a} - \sqrt{n})^2 + \frac{3a^{1/6}(\sqrt{a} - \sqrt{n})^{2/3}}{2^{2/3}n^{1/6}} < c_{n,n}(a)$$
(5.10)

sob a restrição n < a.

Nossos Corolários 5.1.2 e 5.1.3 fornecem os primeiros resultados válidos para quaisquer valores de n e a com uma pequena exceção, quando o limitante inferior é um número negativo. Vamos comparar assintoticamente nossos resultados com os obtidos em [28], quando esses são válidos. Se fixarmos $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 3$, os limitantes obtidos no Corolário 5.1.3 são assintoticamente melhores que (5.9) e (5.10), quando $a \rightarrow \infty$. Quando a < n somente os limitantes dados pelos nossos resultados são válidos. O vasto número de experimentos numéricos que fizemos mostra que, quando n é fixo, as estimativas (5.9) e (5.10) são melhores quando a está em um intervalo (n, a_1) . Finalmente, as estimativas no Corolário 5.1.3 começam a ser mais precisas para os valores restantes de $a \in (a_1, \infty)$. A tabela numérica 5.1 ilustra esse fenômeno.

Além disso, o Corolário 5.1.1 fornece limitantes não somente para os zeros extremos, mas para todos os zeros dos polinômios de Charlier.

Na Tabela 5.1 fornecemos resultados numéricos através do software *Mathe*matica para os zeros extremos de $C_5(x; a)$ que aparecem nas colunas centrais, ao lado aparecem os valores dos limitantes (5.8) e (5.7) do Corolário 5.1.2, e nas colunas mais externas os limitantes fornecidos por Krasikov e Zarkh, (5.9) e (5.10). Nas duas colunas inicias aparecem os valores dos referidos limitantes inferiores para o menor zero, $c_{5,5}(a) =: c_{5,5}$, do polinômio de Charlier de grau cinco, enquanto nas últimas duas colunas aparecem os valores dos referidos limitantes superiores de $c_{5,1}(a) =: c_{5,1}$.

Destacamos com um contorno retangular qual dos limitantes, por nós fornecido em comparação com os limitantes do artigo de Krasikov e Zarkh, são mais próximos ao valor numérico de $c_{5,5}$ e $c_{5,1}$. Quando não houver contorno em nenhum dos limitantes é porque ambos os limitantes estão fora do intervalo que contém os pontos do suporte da medida, que no caso dos polinômios de Charlier é $[0, \infty)$.

Tabela 5.1: Valores numéricos do menor zero de $C_5(x; a)$, $c_{5,5}$, e do maior zero, $c_{5,1}$, os limitantes inferiores (5.10) e (5.7) de $c_{5,5}$ e os limitantes superiores (5.9) e (5.8) de $c_{5,1}$, para n = 5 e valores de a iguais a 0.1, 5, 10, 50, 100, 500, 1000, 2000 e 5000.

| a | (5.10) | (5.7) | $C_{5,5}$ | $C_{5,1}$ | (5.8) | (5.9) |
|------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 0.1 | | -0.8067 | 0.0000 | 4.4330 | 5.0067 | |
| 5 | | -1.4112 | 1.0000 | 14.2858 | 15.4112 | |
| 10 | 2.8735 | 0.9332 | 3.4568 | 21.8798 | 23.0668 | 22.6141 |
| 50 | 31.3089 | 29.7261 | 32.4089 | 72.9684 | 74.2739 | 74.3490 |
| 100 | 72.4871 | 71.3284 | 74.0665 | 131.3159 | 132.6716 | 133.1878 |
| 500 | 435.1245 | 435.8882 | 438.7849 | 566.6016 | 568.1118 | 570.5634 |
| 1000 | 907.1004 | 909.6547 | 912.3308 | 1093.0562 | 1094.3453 | 1098.5891 |
| 2000 | 1867.4602 | 1872.2324 | 1874.9137 | 2130.4734 | 2131.7676 | 2138.2301 |
| 5000 | 4788.8001 | 4797.9817 | 4800.6676 | 5204.7197 | 5206.0183 | 5216.8907 |

5.2 Polinômios de Meixner

Os polinômios de Meixner, $M_n(x; \beta, c), \beta > 0 \in 0 < c < 1$, podem ser definidos por

$$M_n(x;\beta,c) = {}_2F_1 \left(\begin{array}{c} -n, -x \\ \beta \end{array} \middle| 1 - \frac{1}{c} \right)$$

e tais polinômio satisfazem a relação de ortogonalidade

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\beta)_k c^k}{k!} M_n(k; \beta, c) M_m(k; \beta, c) = \frac{c^{-n} n!}{(\beta)_n (1-c)^{\beta}} \delta_{n,m},$$

 $\operatorname{com} n, m \in \mathbb{N}.$

A relação de recorrência de três termos para os polinômios $M_n(x; \beta, c)$ é

$$(c-1)xM_{k}(x;\beta,c) = c(k+\beta)M_{k+1}(x;\beta,c) - (k+(k+\beta)c)M_{k}(x;\beta,c) + kM_{k-1}(x;\beta,c),$$
(5.11)

e a relação de diferença

$$M_n(x+1;\beta,c) = \frac{x + (x+\beta)c + n(1-c)}{c(x+\beta)} M_n(x;\beta,c) - \frac{x}{c(x+\beta)} M_n(x-1;\beta,c).$$

A equação de diferença dos polinômios de Meixner satisfaz a hipótese (i) do Teorema 2.3.1, pois $B_n(x) = x/(c(x + \beta)) > 0$ e, portanto, os zeros de $M_n(x; \beta, c)$ têm distância maior do que um entre si.

Para provarmos a monotonicidade dos zeros $m_{n,j}(\beta, c)$ com relação aos parâmetros β e c, através do Teorema 3.0.2, precisamos das derivadas logarítmicas de $\omega(k; \beta, c)$ com relação a β e a c. A extensão contínua de $\omega(k; \beta, c) = (\beta)_k c^k / k!$ é dada por $\omega(x; \beta, c) = \Gamma(x + \beta)c^x / (\Gamma(\beta)\Gamma(x + 1))$. Em relação a β , temos

$$\frac{\partial}{\partial\beta} \left[\ln \frac{\Gamma(x+\beta)c^x}{\Gamma(\beta)\Gamma(x+1)} \right] = \frac{\partial}{\partial\beta} \left[\ln(\Gamma(x+\beta)) + x\ln(c) - \ln(\Gamma(\beta)) - \ln(\Gamma(x+1)) \right]$$
$$= \Gamma'(x+\beta)/\Gamma(x+\beta) - \Gamma'(\beta)/\Gamma(\beta)$$
$$= \Psi(x+\beta) - \Psi(\beta).$$

A função $\Psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$ é a derivada logarít
mica da função gama, também conhecida como função digama, e é conhecido que
 $\Psi(x)$ é uma função crescente para x > 0,

veja [1, (6.4.10)]. Logo, os zeros dos polinômios de Meixner são funções crescentes de β .

Em relação a c, verificamos que

$$\frac{\partial}{\partial c} \left[\ln \frac{\Gamma(x+\beta)c^x}{\Gamma(\beta)\Gamma(x+1)} \right] = \frac{\partial}{\partial c} \left[\ln(\Gamma(x+\beta)) + x\ln(c) - \ln(\Gamma(\beta)) - \ln(\Gamma(x+1)) \right]$$
$$= \frac{x}{c}.$$

Como c > 0, então a derivada logarítmica com respeito a c também é função crescente de x, para x > 0 e, o Teorema de Markov novamente implica que os zeros de $M_n(x; \beta, c)$ deslocam-se para a direita no intervalo $(0, \infty)$ quando c varia de 0 a ∞ .

As próximas figuras ilustram esses resultados com os gráficos dos zeros dos polinômios de Meixner de grau cinco com um dos parâmetros fixado. Na Figura 5.3 os zeros são plotados para c = 0.7 e em função do parâmetro β e na Figura 5.4 os zeros são plotados para $\beta = 10$ e em função do parâmetro c.



Figura 5.3: Gráficos de $m_{5,1}(\beta, 0.7)$, $m_{5,2}(\beta, 0.7)$, $m_{5,3}(\beta, 0.7)$, $m_{5,4}(\beta, 0.7)$ e $m_{5,5}(\beta, 0.7)$ como funções do parâmetro β .



Figura 5.4: Gráficos de $m_{5,1}(10,c), m_{5,2}(10,c), m_{5,3}(10,c), m_{5,4}(10,c)$ e $m_{5,5}(10,c)$ como funções do parâmetro c.

Os próximos resultados são motivados pela relação limite entre os polinômios de Laguerre e os polinômios de Meixner [26, (2.9.2)]

$$\lim_{c \to 1} M_n\left(\frac{x}{1-c}; \alpha+1, c\right) = \frac{L_n^{(\alpha)}(x)}{L_n^{(\alpha)}(0)}.$$
(5.12)

Teorema 5.2.1. Sejam $n \in \mathbb{N}$, $\beta > 0$ $e \ 0 < c < 1$. Então, $((1-c)m_{n,j}(\beta,c)-c\beta)/\sqrt{c}$ são funções decrescentes de $c \ e \ ((1-c)m_{n,j}(\beta,c)-c\beta-n+1)/\sqrt{c}$ são funções crescentes de c, quando $c \in (0,\infty)$. Além disso, as desigualdades

$$\frac{\sqrt{c}}{1-c} \left(x_{n,j}(\beta-1) - \beta \left(1-\sqrt{c}\right) \right)$$

$$\leq m_{n,j}(\beta,c)$$

$$\leq \frac{\sqrt{c}}{1-c} \left(x_{n,j}(\beta-1) - \beta(1-\sqrt{c}) + (n-1)\frac{(1-\sqrt{c})^2}{\sqrt{c}} \right)$$

são satisfeitas para $j = 1, \ldots, n$.

Esse resultado também foi obtido por Ismail e Muldoon em [24, Teorema 6.2], com uma demonstração ligeiramente diferente.

Demonstração. Vamos definir novos polinômios com os argumentos dos polinômios de Meixner modificados do seguinte modo

$$\tilde{M}_{k}(x;\alpha,c) := (-1)^{k} M_{k} \left(\frac{\sqrt{c} x + c(\alpha+1)}{1-c}; \alpha+1, c \right), \\ \hat{M}_{k}(x;\alpha,c) := (-1)^{k} M_{k} \left(\frac{\sqrt{c} x + c(\alpha+\alpha) + n - 1}{1-c}; \alpha+1, c \right),$$

sendo n na segunda definição um valor inteiro fixo.

Pela relação limite (5.12), temos que as igualdades

$$\lim_{c \to 1} \tilde{M}_n(x; \alpha, c) = \frac{(-1)^n L_n^{(\alpha)}(x + \alpha + 1)}{L_n^{(\alpha)}(0)},$$
(5.13)

$$\lim_{c \to 1} \hat{M}_n(x; \alpha, c) = \frac{(-1)^n L_n^{(\alpha)}(x + \alpha + 2n - 1)}{L_n^{(\alpha)}(0)}$$
(5.14)

são satisfeitas.

Fazendo respectivas substituições na variável x em (5.11), obtemos a nova relação de recorrência de três termos para $\tilde{M}_k(x; \alpha, c)$

$$x\tilde{M}_k(x;\alpha,c) = \sqrt{c}(k+\alpha+1)\tilde{M}_{k+1}(x;\alpha,c) + \frac{k(1+c)}{\sqrt{c}}\tilde{M}_k(x;\beta,c) + \frac{k}{\sqrt{c}}\tilde{M}_{k-1}(x;\beta,c),$$

e para $\hat{M}_k(x; \alpha, c)$

$$x\hat{M}_{k}(x;\alpha,c) = \sqrt{c}(k+\alpha+1)\hat{M}_{k+1}(x;\alpha,c) - \frac{(n-k-1)(1+c)}{\sqrt{c}}\hat{M}_{k}(x;\beta,c) + \frac{k}{\sqrt{c}}\hat{M}_{k-1}(x;\beta,c).$$

Os coeficientes para a relação de recorrência de polinômios ortonormais, dados no Corolário 2.1.1, são

$$\tilde{a}_k(c) = \hat{a}_k(c) = \sqrt{(k+1)(k+\alpha+1)},$$
$$\tilde{b}_k(c) = \frac{k(1+c)}{\sqrt{c}} \quad \text{e} \quad \hat{b}_k(c) = -\frac{(n-k-1)(1+c)}{\sqrt{c}},$$

respectivamente para $\tilde{M}_n(x; \alpha, c) \in \hat{M}_n(x; \alpha, c)$.

A fim de usarmos a Proposição 3.0.4, vamos fazer as derivadas com respeito a c de $\tilde{b}_k(c)$, $1 \le k \le n-1$, e $\tilde{a}_k(c)$, $1 \le k \le n-2$, que são os elementos da matriz $J'_n(c)$ relativa aos polinômios ortonormais de $\tilde{M}_n(x;\beta,c)$. Paralelamente fazemos as derivadas com respeito a c dos elementos $\hat{b}_k(c)$, $1 \le k \le n-1$, e $\hat{a}_k(c)$, $1 \le k \le n-2$, que são os elementos da matriz $J'_n(c)$ relativa aos polinômios ortonormais de $\hat{M}_n(x;\beta,c)$. Obtêm-se

$$\tilde{b}'_k(c) = -k(1-c)/(2c^{3/2})$$
 e $\tilde{a}'_k(c) = 0$

е

$$\hat{b}'_k(c) = (n-1-k)(1-c)/(2c^{3/2})$$
 e $\hat{a}'_k(c) = 0$

Desse modo, vemos que as matrizes $J'_n(c)$ relativas aos polinômios ortonormais de $\tilde{M}_n(x; \alpha, c)$ e $\hat{M}_n(x; \alpha, c)$ são matrizes diagonais e, além disso, os elementos da diagonal $\tilde{b}'_k(c)$, $1 \leq k \leq n-1$, são negativos com exceção do primeiro que é nulo, enquanto os elementos da diagonal $\hat{b}'_k(c)$, $1 \leq k \leq n-1$, são positivos com exceção do último que é nulo.

Então, pela Proposição 3.0.4, temos que os zeros de $\tilde{M}_n(x; \alpha, c)$ são funções decrescentes de c e os zeros de $\hat{M}_n(x; \alpha, c)$ são funções crescentes de c.

Os zeros de $\tilde{M}_n(x; \alpha, c)$ são

$$\frac{(1-c)m_{n,j}(\alpha+1,c)-c(\alpha+1)}{\sqrt{c}},$$

que são funções decrescentes de c, enquanto os zeros de $\hat{M}_n(x;\alpha,c), 1 \leq j \leq n$ são

$$\frac{(1-c)m_{n,j}(\alpha+1,c)-c(\alpha+n)-n+1}{\sqrt{c}},$$

 $1 \leq j \leq n$, que são funções crescentes de c, para $c \in (0, 1)$.

As fórmulas (5.13) e (5.14) implicam que os zeros desses polinômios satisfa-

zem

$$[(1-c)m_{n,j}(\alpha+1,c) - c(\alpha+1)]/\sqrt{c} \to x_{n,j}(\alpha) - \alpha - 1$$

е

$$[(1-c)m_{n,j}(\alpha+1,c) - c(\alpha+1) - n + 1]/\sqrt{c} \to x_{n,j}(\alpha) - \alpha - 2n + 1,$$

quando $c \to 1$.

Como visto, as funções que aparecem do lado esquerdo das expressões acima têm comportamento monotônico. Logo, os valores da direita limitam tais funções da seguinte forma

$$[(1-c)m_{n,j}(\alpha+1,c) - c(\alpha+1)]/\sqrt{c} \ge x_{n,j}(\alpha) - \alpha - 1$$

е

$$[(1-c)m_{n,j}(\alpha+1,c) - c(\alpha+1) - n + 1]/\sqrt{c} \le x_{n,j}(\alpha) - \alpha - 2n + 1.$$

Essas desigualdades são equivalentes às desigualdades do Teorema 5.2.1 e, para obtê-las, basta isolar $m_{n,j}(\alpha + 1, c)$ e trocar $\alpha + 1$ por β .

Agora, usamos limitantes explícitos para os zeros dos polinômios de Laguerre para obter limitantes explícitos para os zeros dos polinômios de Meixner.

O melhor limite para os zeros extremos de $L_n^{(\alpha)}(x)$, quando α é grande, é dado na Proposição 4.2.1. Usando esses limitantes nas desigualdades do Teorema 5.2.1 obtemos

Corolário 5.2.1. Sejam $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$, 0 < c < 1 $e \beta > 0$. Os zeros extremos dos polinômios de Meixner $M_n(x; \beta, c)$ são limitados da seguinte forma,

$$\frac{\sqrt{c}}{1-c} \left((\sqrt{n+\beta} - \sqrt{n})^2 + 3 \frac{(\sqrt{n+\beta} - \sqrt{n})^{4/3}}{(4\sqrt{n(n+\beta)})^{1/3}} - \beta(1-\sqrt{c}) \right) < m_{n,n}(\beta,c)$$

e

$$m_{n,1}(\beta,c) < \frac{\sqrt{c}}{1-c} \left((\sqrt{n+\beta} + \sqrt{n})^2 - 3\frac{(\sqrt{n+\beta} + \sqrt{n})^{4/3}}{(4\sqrt{n(n+\beta)})^{1/3}} + 2 - \beta(1-\sqrt{c}) + (n-1)\frac{(1-\sqrt{c})^2}{\sqrt{c}} \right).$$

O melhor limitante para o maior zero de $L_n^{(\alpha)}(x)$ quando $n \to \infty$, é dado por Szegő, [41, (6.32.6)], descrito aqui na Proposição 4.2.2. Esse limitante usado no limitante superior para os zeros de Meixner do Teorema 5.2.1 nos fornece o seguinte resultado. Corolário 5.2.2. Sejam $n \in \mathbb{N}$, $n \ge 2$, 0 < c < 1 $e \beta > 0$. O maior zero de $M_n(x; \beta, c)$ satisfaz

$$m_{n,1}(\beta,c) < \frac{\sqrt{c}}{1-c} \left(\left((4n+2\beta)^{1/2} - 1.85575(4n+2\beta)^{-1/6} \right)^2 - \beta(1-\sqrt{c}) + (n-1)\frac{(1-\sqrt{c})^2}{\sqrt{c}} \right)$$

Temos ainda o resultado obtido pelo uso da Proposição 4.2.3.

Corolário 5.2.3. Sejam $n \in \mathbb{N}$, $n \ge 2$, 0 < c < 1 $e \beta > 0$. Então,

$$\frac{\sqrt{c}}{1-c} \left(\frac{2n^2 + n(\beta - 2) + 2\beta - 2(n-1)\sqrt{n^2 + (n+2)\beta}}{n+2} - \beta(1-\sqrt{c}) \right) \le m_{n,n}(\beta,c)$$
(5.15)

$$m_{n,1}(\beta,c) \leq \frac{\sqrt{c}}{1-c} \left(\frac{2n^2 + n(\beta-2) + 2\beta + 2(n-1)\sqrt{n^2 + (n+2)\beta}}{n+2} -\beta(1-\sqrt{c}) + (n-1)\frac{(1-\sqrt{c})^2}{\sqrt{c}} \right).$$
(5.16)

Ilustramos nossos resultados com tabelas para n = 5. A Figura 5.5 mostra os zeros de $M_5(x; \beta, 0.7)$ em relação a β , em linhas contínuas, e os correspondentes limitantes do Corolário 5.2.3, em linhas tracejadas. Do mesmo modo, a Figura 5.6 mostra os zeros de $M_5(x; 10, c)$ em relação a c e os correspondentes limitantes do Corolário 5.2.3.



Figura 5.5: Gráficos dos zeros de $M_5(x;\beta,0.7)$ em traços contínuos e limitantes do Corolário 5.2.3 para c = 0.7 em traços pontilhados, com relação ao parâmetro β .



Figura 5.6: Gráficos dos zeros de $M_5(x; 10, c)$ em traços contínuos e limitantes do Corolário 5.2.3 para $\beta = 10$ em traços pontilhados, com relação ao parâmetro c.

Krasikov and Zarkh [28, Teorema 7] provaram que

$$\mu_1 + \frac{3c^{1/6}\mu_1^{1/3}(\mu_1 + \beta)^{1/3}}{2^{2/3}(1-c)^{1/3}n^{1/6}(n+\beta)^{1/6}} < m_{n,n}(\beta, c),$$
(5.17)

se
$$n < \beta c/(1-c)$$
, e

$$m_{n,1}(\beta,c) < \mu_2 - \begin{cases} \frac{3c^{1/6}\mu_2^{1/3}(\mu_2 + \beta)^{1/3}}{2^{2/3}(1-c)^{1/3}n^{1/6}(n+\beta)^{1/6}}, & \mu_2 \le \mu_1 + \sqrt{\mu_1(\mu_1 + \beta)}, \\ \frac{3c^{1/3}(\sqrt{\mu_1} + \sqrt{\mu_1 + \beta})^{2/3}}{(1-c)^{2/3}}, & \mu_2 > \mu_1 + \sqrt{\mu_1(\mu_1 + \beta)}, \end{cases}$$
(5.18)

em que
$$\mu_1 = (\sqrt{n} - \sqrt{c(n+\beta)})^2 / (1-c)$$
 e $\mu_2 = (\sqrt{n} + \sqrt{c(n+\beta)})^2 / (1-c)$.

Vamos comparar assintoticamente nossos resultados com esses anteriores, obtidos em [28]. Para β e c fixos, os limitantes (5.17) e (5.18) não são válidos para valores grandes de n. Se $n \leq 6$ e $\beta \rightarrow \infty$, os limitantes do Corolário 5.2.3 são mais precisos que (5.17) e (5.18), enquanto que, se $n \geq 6$, os limitantes (5.17) e (5.18) são mais precisos que aqueles obtidos nos corolários anteriores.

Para $c \to 0$, nossos resultados são melhores. Para $c \to 1$, o limite inferior do Corolário 5.2.1 e (5.17) são assintoticamente iguais. Experimentos numéricos mostram que, para $c \to 1$, a estimativa superior dos corolários anteriores, especialmente no Corolário 5.2.1, são mais exatas que (5.18) para a maioria dos valores de $n \in \beta$. As tabelas numéricas abaixo ilustram esses fenômenos, sendo destacados os melhores limitantes.

Tabela 5.2: Valores numéricos do menor zero de $M_5(x; \beta, 0.7)$, $m_{5,5}$, e do maior zero, $m_{5,1}$, os limitantes inferiores (5.17) e (5.15) de $m_{5,5}$ e os limitantes superiores (5.18) e (5.16) de $m_{5,1}$, para n = 5, c = 0.7 e valores de β iguais a 0.1, 5, 20, 100, e 500.

| β | (5.17) | (5.15) | $m_{5,5}$ | $m_{5,1}$ | (5.16) | (5.18) |
|-----|----------|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 0.1 | | 0.0118 | 0.0218 | 31.2943 | 32.6834 | 49.5072 |
| 5 | 2.5826 | 2.9145 | 3.4007 | 50.5901 | 52.6473 | 66.7876 |
| 20 | 21.4951 | 21.6617 | 23.1023 | 100.8055 | 103.9001 | 111.1347 |
| 100 | 163.3832 | 163.4497 | 167.4339 | 329.7718 | 335.4455 | 336.1549 |
| 500 | 993.2798 | 993.3690 | 1003.0964 | 1360.7678 | 1372.1928 | 1372.3100 |

Tabela 5.3: Valores numéricos do menor zero de $M_5(x; 10, c)$, $m_{5,5}$, e do maior zero, $m_{5,1}$, os limitantes inferiores (5.17) e (5.15) de $m_{5,5}$ e os limitantes superiores (5.18) e (5.16) de $m_{5,1}$, para n = 5, $\beta = 10$ e valores de c iguais a 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, e 0.9.

| с | (5.17) | (5.15) | $m_{5,5}$ | $m_{5,1}$ | (5.16) | (5.18) |
|-----|---------|---------|-----------|-----------|----------|----------|
| 0.1 | | -0.7950 | 0.0258 | 8.4283 | 9.1108 | 9.2950 |
| 0.3 | | 0.0409 | 0.7556 | 17.7329 | 18.6418 | 21.4749 |
| 0.5 | 2.3068 | 2.3280 | 3.0000 | 33.1590 | 34.5207 | 40.0471 |
| 0.7 | 7.9671 | 8.2040 | 9.0673 | 68.2082 | 70.6912 | 81.4756 |
| 0.9 | 37.4251 | 38.5348 | 40.9496 | 241.7715 | 249.9915 | 286.5523 |

5.3 Polinômios de Kravchuck

Os polinômios de Kravchuck, $K_n(x; p, N)$, 0 , definidos por

$$K_n(x;p,N) = {}_2F_1 \left(\begin{array}{c|c} -n,-x \\ -N \end{array} \middle| -\frac{1}{p} \right).$$

satisfazem as relações de ortogonalidade

$$\sum_{k=0}^{N} \binom{N}{k} p^{k} (1-p)^{N-k} K_{n}(k;p,N) K_{m}(k;p,N) = \frac{(-1)^{n} n!}{(-N)_{n}} \left(\frac{1-p}{p}\right)^{n} \delta_{n,m}$$

para $n, m \leq N$.

Os polinômios de Kravchuk $K_n(x; p, N)$ obe
decem a relação de recorrência de três termos

$$-xK_{k}(x; p, N) = p(N - k)K_{k+1}(x; p, N)$$

$$- (p(N - k) + k(1 - p))K_{k}(x; p, N) + k(1 - p)K_{k-1}(x; p, N)$$
(5.19)

e satisfazem a relação de diferença

$$K_n(x+1;p,N) = \frac{p(N-x) + x(1-p) - n}{p(N-x)} K_n(x;p,N) - \frac{x(1-p)}{p(N-x)} K_n(x-1;p,N).$$

Nessa equação de diferença, temos $B_n(x) = x(1-p)/(p(N-x)) > 0$, para $x \in (0, N)$ e, portanto, pelo Teorema 2.3.1, os zeros de $K_n(x; p, N)$ têm distância maior do que um entre si.

A monotonicidade dos zeros $\kappa_{n,j}(p, N)$ com relação ao parâmetro p pode ser provada através do Teorema 3.0.2. Temos $\omega(k; p, N) = \binom{N}{k} p^k (1-p)^N$, cuja extensão contínua é

$$\omega(x;p,N) = \frac{\Gamma(N+1)p^x(1-p)^{N-x}}{\Gamma(N+1-x)\Gamma(x+1)}$$

Calculando a derivada logarítmica de $\omega(x; p, N)$ com respeito a p obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial p} \left[\ln \frac{\Gamma(N+1)p^x(1-p)^{N-x}}{\Gamma(N+1-x)\Gamma(x+1)} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial p} \left[\ln(\Gamma(N+1)) + x\ln(p) + (N-x)\ln(1-p) - \ln(\Gamma(N+1-x)) - \ln(\Gamma(x+1)) \right] \\ &= \frac{x}{p} - \frac{N-x}{1-p} = \frac{x-Np}{p(1-p)}, \end{aligned}$$

que é obviamente uma função crescente de x. Então, os zeros de $K_n(x, p, N)$ são funções crescentes de p. A Figura 5.7 ilustra esse comportamento.



Figura 5.7: Gráficos dos zeros $\kappa_{5,1}(p, 30)$, $\kappa_{5,2}(p, 30)$, $\kappa_{5,3}(p, 30)$, $\kappa_{5,4}(p, 30)$ e $\kappa_{5,5}(p, 30)$ como funções do parâmetro p.

A monotonicidade de $\kappa_{n,j}(p, N)$ com respeito a N, isto é, a desigualdade $\kappa_{n,j}(p, N) < \kappa_{n,j}(p, N + 1)$, foi estabelecida por L. Chihara e D. Stanton em 1990 [7, Teor. 3.1]. Também, há uma demonstração desse fato por Jordaan e Toókos em [25]. A demonstração segue imediatamente do entrelaçamento dos zeros dos polinômios da relação contígua

$$K_n(x; p, N+1) = \frac{N-n+1}{N+1} K_n(x; p, N) + \frac{n}{N+1} K_{n-1}(x; N).$$

Mencionamos que essa relação aparece com um erro na pag. 2020 de [25].

A Figura 5.8 ilustra, considerando N variando continuamente, o crescimento dos zeros da equação $K_n(x; p, N) = 0$ em relação a N.



Figura 5.8: Gráficos dos zeros $\kappa_{5,1}(0.7, N)$, $\kappa_{5,2}(0.7, N)$, $\kappa_{5,3}(0.7, N)$, $\kappa_{5,4}(0.7, N)$ e $\kappa_{5,5}(0.7, N)$ como funções de N.

Os resultados sobre os zeros dos polinômios de Kravchuk que obtivemos são motivados pela relação limite [26, (2.10.2)],

$$\lim_{N \to \infty} \sqrt{\binom{N}{n}} K_n(pN + x\sqrt{2p(1-p)N}; p, N) = \frac{(-1)^n H_n(x)}{\sqrt{2^n n! \left(\frac{p}{1-p}\right)^n}},$$
(5.20)

entre os polinômios de Kravchuk, com o argumento modificado, e os polinômios de Hermite.

O próximo teorema fornece resultados detalhados que provamos sobre os zeros extremos de $K_n(x; p, N)$.

Teorema 5.3.1. Sejam $n, N \in \mathbb{N}$, com $n \leq N$ $e \mid 0 .$

(i) Seja $0 . Em função do maior zero de <math>K_n(x; p, N)$, temos que

$$\frac{\kappa_{n,1}(p,N) - pN - (1-2p)(n-1)}{\sqrt{N}}$$

é função crescente de N, enquanto

$$\frac{\kappa_{n,1}(p,N) - pN}{\sqrt{N - n + 1}}$$

é função decrescente de N. Em função do menor zero de $K_n(x; p, N)$, temos que

$$\frac{\kappa_{n,n}(p,N) - pN - (1-2p)(n-1)}{\sqrt{N-n+1}}$$

é função crescente de N, enquanto

$$\frac{\kappa_{n,n}(p,N) - pN}{\sqrt{N}}$$

é função decrescente de N. Além disso, temos os limitantes:

$$pN - \sqrt{2p(1-p)N}h_{n,1} \le \kappa_{n,n}(p,N)$$
$$\le pN + (1-2p)(n-1) - \sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}h_{n,1}$$

e

$$pN + \sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}h_{n,1} \le \kappa_{n,1}(p,N)$$

$$\le pN + (1-2p)(n-1) + \sqrt{2p(1-p)N}h_{n,1},$$

sendo $h_{n,1}$ o maior zero de $H_n(x)$.

(ii) Seja $1/2 \le p < 1$. Em função do maior zero de $K_n(x; p, N)$, temos que

$$\frac{\kappa_{n,1}(p,N) - pN}{\sqrt{N}}$$

 \acute{e} função crescente de N e

$$\frac{\kappa_{n,1}(p,N) - pN + (2p-1)(n-1)}{\sqrt{N-n+1}}$$

é função decrescente de N. Em função do menor zero de $K_n(x; p, N)$, temos que

$$\frac{\kappa_{n,n}(p,N) - pN}{\sqrt{N - n + 1}}$$

é função crescente de N, enquanto

$$\frac{\kappa_{n,n}(p,N) - pN + (2p-1)(n-1)}{\sqrt{N}}$$

é função decrescente de N . Além disso, temos os limitantes:

$$pN - (2p - 1)(n - 1) - \sqrt{2p(1 - p)N}h_{n,1} \le \kappa_{n,n}(p, N) \le pN - \sqrt{2p(1 - p)(N - n + 1)}h_{n,1}$$

$$e$$

$$pN - (2p - 1)(n - 1) + \sqrt{2p(1 - p)(N - n + 1)}h_{n,1} \le \kappa_{n,1}(p, N)$$
$$\le pN + \sqrt{2p(1 - p)N}h_{n,1}$$

sendo $h_{n,1}$ o maior zero de $H_n(x)$.

Demonstração. A relação de ortogonalidade dada no início implica que

$$\langle K_n(x;p,N), K_n(x;p,N) \rangle = \frac{(-1)^n n!}{(-N)_n} \left(\frac{1-p}{p}\right)^n.$$

Logo, os polinômios ortonormais de Kravchuk são dados por

$$\frac{1}{\sqrt{\frac{(-1)^n n!}{(-N)_n} \left(\frac{1-p}{p}\right)^n}} K_n(x;p,N) = \sqrt{\binom{N}{n} \left(\frac{p}{1-p}\right)^n} K_n(x;p,N).$$

Fazendo uma alteração no argumento desses, definimos

$$\tilde{K}_n(x;p,N) := (-1)^n \sqrt{\binom{N}{n} \left(\frac{p}{1-p}\right)^n} K_n(pN + x\sqrt{2p(1-p)N};p,N).$$

Por (5.20), temos

$$\lim_{N \to \infty} \tilde{K}_n(x; p, N) = \frac{H_n(x)}{\sqrt{2^n n!}}.$$
(5.21)

A relação de recorrência de três termos de $\tilde{K}_n(x;p,N)$ é

$$x\tilde{K}_{k}(x;p,N) = \sqrt{\frac{k+1}{2}} \left(1 - \frac{k}{N}\right) \tilde{K}_{k+1}(x;p,N) + \frac{k(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)N}} \tilde{K}_{k}(x;p,N)$$
(5.22)
+ $\sqrt{\frac{k}{2}} \left(1 - \frac{k-1}{N}\right) \tilde{K}_{k-1}(x;p,N).$

A partir dessa relação, obtemos a matriz de Jacobi ${\cal J}_n(N) =$

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \dots & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1-2p}{\sqrt{2p(1-p)N}} & \sqrt{1-\frac{1}{N}} & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & \frac{(n-2)(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)N}} & \sqrt{\frac{n-1}{2}\left(1-\frac{n-2}{N}\right)} \\ 0 & & \sqrt{\frac{n-1}{2}\left(1-\frac{n-2}{N}\right)} & \frac{(n-1)(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)N}} \end{pmatrix},$$

cujos elementos são

$$a_k(N) = \sqrt{\frac{k+1}{2}\left(1-\frac{k}{N}\right)}, \quad 0 \le k \le n-2,$$
 (5.23)

$$b_k(N) = \frac{k(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)N}}, \quad 0 \le k \le n-1.$$
(5.24)

A matriz de derivadas $J_n^\prime(N)$ é

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{-(1-2p)}{2\sqrt{2p(1-p)}N^{3/2}} & \frac{1}{\sqrt{2(N-1)}N^{3/2}} & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & \frac{-(n-2)(1-2p)}{2\sqrt{2p(1-p)}N^{3/2}} & \frac{-(n-2)}{2N^{3/2}(N-n+2)^{1/2}} \\ 0 & & \frac{-(n-2)}{2N^{3/2}(N-n+2)^{1/2}} & \frac{-(n-1)(1-2p)}{2\sqrt{2p(1-p)}N^{3/2}} \end{pmatrix},$$

cujos elementos não-nulos são

$$a'_k(N) = \frac{k\sqrt{k+1}}{2\sqrt{2(N-k)}N^{3/2}}, \quad 1 \le k \le n-2,$$

$$b'_k(N) = \frac{-k(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)}N^{3/2}}, \quad 1 \le k \le n-1.$$

A primeira idéia é usar a Proposição 3.0.4. No entanto, o sinal da diagonal depende de p ser maior ou menor do que 1/2. Por isso, vamos separar em dois casos: $0 . Deste modo, temos <math>b'_k(N) > 0$ se $1/2 \leq p < 1 \in b'_k(N) < 0$ se $0 . Ainda assim, a matriz <math>J'_n(N)$ nem sempre é positiva definida ou negativa definida. Entretanto, se $1/2 \le p < 1$, podemos verificar que os elementos de $J_n(N)$ são funções crescentes de N, pois os elementos de $J'_n(N)$ são positivos. Então, podemos usar o Teorema de Perron-Frobenius. Logo, pelo Teorema 3.0.7, garantimos que o maior zero de de $\tilde{K}_k(x; p, N)$ é função crescente de N.

Por outro lado, a relação limite (5.21) garante, pela continuidade dos zeros, que o maior zero de $\tilde{K}_k(x; p, N)$ converge para $h_{n,1}$, quando $N \to \infty$. O maior zero de $\tilde{K}_k(x; p, N)$ é

$$\frac{\kappa_{n,1}(p,N) - pN}{\sqrt{2p(1-p)N}}.$$

Então, por causa de seu comportamento crescente em relação a N e da convergência para $h_{n,1}$, temos

$$\frac{\kappa_{n,1}(p,N) - pN}{\sqrt{2p(1-p)N}} \le h_{n,1} \quad \text{para} \quad 1/2 \le p < 1.$$

De outro modo, podemos escrever essa desigualdade como no Teorema 5.3.1 na forma

$$\kappa_{n,1}(p,N) \le pN + \sqrt{2p(1-p)N} h_{n,1}$$
 para $1/2 \le p < 1.$

Para provar os demais resultados, precisamos fazer mais sete modificações no argumento de $\tilde{K}_k(x; p, N)$. Para não trabalharmos com diversas notações, vamos usar de modo abusivo \hat{K} para todas as modificações e também denotaremos os coeficientes da relação de recorrência de três termos sempre por $\hat{a}_k \in \hat{b}_k$.

A primeira e mais simples modificação é para o caso em que 0 < $p \leq 1/2.$ Considere

$$\hat{K}_n(x; p, N) = (-1)^n \tilde{K}_n(-x; p, N).$$
(5.25)

Fazendo modificações nos polinômios da relação (5.22), obtemos uma relação de recorrência de três termos da forma (3.7) para os polinômios $\hat{K}_k(x; p, N)$, definidos acima, com

$$\hat{a}_k(N) = -\sqrt{\frac{k+1}{2}\left(1-\frac{k}{N}\right)}$$
 e $\hat{b}_k(N) = \frac{k(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)N}}.$

Esses coeficientes são os elementos da matriz de Jacobi $J_n(N)$ da forma (3.11) associada à relação de recorrência de três termos. Observe que todos os elementos de $J_n(N)$, $\hat{a}_k(N)$, $0 \le k \le n-2$, e $\hat{b}_k(N)$, $0 \le k \le n-1$, são funções crescentes de N. Então, pelo Teorema 3.0.7 (Perron– Frobenius), temos que o maior zero de $\hat{K}_n(x;p,N) = (-1)^n \tilde{K}_n(-x;p,N)$ é função crescente de N.

Pela relação (5.21), temos que o maior zero de $\hat{K}_k(x; p, N)$, que é $(-\kappa_{n,n}(p, N) + pN)/\sqrt{2p(1-p)N}$, converge para o maior zero de $H_n(-x)$, quando $N \to \infty$. Então, por causa do comportamento monotonicamente crescente e limitado por $-h_{n,n}$, temos

$$\frac{-\kappa_{n,n}(p,N) + pN}{\sqrt{2p(1-p)N}} \le -h_{n,n}, \quad \text{para} \quad 0$$

Lembrando que $-h_{n,n} = h_{n,1}$ podemos escrever

$$pN - \sqrt{2p(1-p)N}h_{n,1} \le \kappa_{n,n}(p,N),$$

para 0 , como no Teorema 5.3.1.

Vamos continuar no caso 0 . Mas agora vamos trabalhar com nfixo e definir para <math>k = 0, 1, ..., n:

$$\hat{K}_k(x; p, N) = \tilde{K}_k \left(x + \frac{(n-1)(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)N}}; p, N \right).$$
(5.26)

Observe que a transformação no argumento depende de n.

Fazendo as devidas modificações nos polinômios da relação (5.22), obtemos uma relação de recorrência de três termos da forma (3.7) para os polinômios (5.26) com coeficientes

$$\hat{a}_k(N) = \sqrt{\frac{k+1}{2}\left(1-\frac{k}{N}\right)}$$
 e $\hat{b}_k(N) = -\frac{(n-1-k)(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)N}}$.

Esses coeficientes são os elementos da matriz de Jacobi $J_n(N)$ associada à relação de recorrência.

Novamente, os elementos $\hat{a}_k(N)$, $1 \le k \le n-2$, e $\hat{b}_k(N)$, $1 \le k \le n-1$, de $J_n(N)$ são funções crescentes de N. Então, pelo Teorema de Perron-Frobenius, temos que o maior zero de $\hat{K}_n(x; p, N)$, que é

$$\frac{\kappa_{n,1}(p,N) - pN - (1-2p)(n-1)}{\sqrt{2p(1-p)N}},$$

é função crescente de N.

Vemos, pela relação (5.21), que os zeros de $\hat{K}_k(x; p, N)$ simplesmente convergem para os zeros de Hermite. Assim, $(\kappa_{n,1}(p, N) - pN - (1-2p)(n-1))/(\sqrt{2p(1-p)N}) \rightarrow h_{n,1}$, quando $N \rightarrow \infty$. Então, concluímos que

$$\frac{\kappa_{n,1}(p,N) - pN - (1-2p)(n-1)}{\sqrt{2p(1-p)N}} \le h_{n,1}, \quad \text{para} \quad 0$$

Ou ainda, $\kappa_{n,1}(p,N) \leq pN + (1-2p)(n-1) + \sqrt{2p(1-p)N}h_{n,1}$, como no Teorema 5.3.1.

A próxima modificação, também para n fixo, $k=0,1,\ldots,n,$ e0

é

$$\hat{K}_k(x; p, N) = \tilde{K}_k\left(x\sqrt{1 - \frac{n-1}{N}}; p, N\right).$$
 (5.27)

Fazendo as devidas modificações nos polinômios da relação (5.22), obtemos uma relação de recorrência de três termos da forma (3.7) para os polinômios $\hat{K}_k(x; p, N)$, definidos acima, com

$$\hat{a}_k(N) = \sqrt{\frac{(k+1)(N-k)}{2(N-n+1)}}$$
 e $\hat{b}_k(N) = \frac{k(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}}$

Esses coeficentes são os elementos da matriz de Jacobi $J_n(N)$, associada a relação de recorrência de três termos.

Agora, os elementos $\hat{a}_k(N)$, $1 \le k \le n-2$, e $\hat{b}_k(N)$, $1 \le k \le n-1$, de $J_n(N)$ são funções decrescentes de N. Então, pelo Teorema de Perron-Frobenius, temos que o maior zero de (5.27) é função decrescente de N.

Pela definição (5.27) e pela relação (5.21), os zeros de $\hat{K}_k(x; p, N)$ convergem para os zeros dos polinômios de Hermite. Logo, para o maior zero temos:

$$\frac{\kappa_{n,1}(p,N) - pN}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}} \to h_{n,1} \quad \text{quando} \quad N \to \infty.$$

Pelo decrescimento em função de N e a convergência para $h_{n,1}$, temos

$$\frac{\kappa_{n,1}(p,N) - pN}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}} \ge h_{n,1}, \quad \text{para} \quad 0$$

ou ainda, $pN + \sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}h_{n,1} \leq \kappa_{n,1}(p,N)$, como aparece no Teorema 5.3.1.

A última modificação para 0 <
 $p \leq 1/2,$ também para n fixo
e $k = 0, 1, \dots, n,$ é

$$\hat{K}_k(x;p,N) = (-1)^k \tilde{K}_k\left(-x\sqrt{1-\frac{n-1}{N}} + \frac{(n-1)(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)N}};p,N\right).$$
(5.28)

Fazendo as devidas modificações nos polinômios da relação (5.22), obtemos uma relação de recorrência de três termos da forma (3.7) para os polinômios $\hat{K}_k(x; p, N)$ definidos acima, com

$$\hat{a}_k(N) = \sqrt{\frac{(k+1)(N-k)}{2(N-n+1)}}$$
 e $\hat{b}_k(N) = \frac{(n-1-k)(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}},$

que são os elementos da matriz de Jacobi $J_n(N)$.

Os elementos $\hat{a}_k(N)$, $1 \leq k \leq n-2$, e $\hat{b}_k(N)$, $1 \leq k \leq n-1$, de $J_n(N)$ são funções decrescentes de N. Então, pelo Teorema de Perron-Frobenius, temos que o maior zero de $\hat{K}_n(x; p, N)$, que é

$$\frac{-\kappa_{n,n}(p,N) + pN - (n-1)(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}},$$

é função decrescente de N. Pela relação (5.21), temos que

$$(-\kappa_{n,n}(p,N)+pN-(n-1)(1-2p))/(\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}) \to -h_{n,n}, \text{ quando } N \to \infty.$$

Pelo decrescimento em função de N e a convergência para $-h_{n,n}=h_{n,1},$ segue que

$$h_{n,1} \le \frac{-\kappa_{n,n}(p,N) + pN + (n-1)(1-2p)}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}}, \text{ para } 0$$

Simplificando, temos, para 0 ,

$$\kappa_{n,n}(p,N) \le pN + (n-1)(1-2p) - \sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}h_{n,1}.$$

Agora, vamos fazer as três modificações que faltam para $1/2 \le p < 1$. Em todos os casos vamos considerar *n* fixo e definir $\hat{K}_k(x; p, N)$ para k = 0, 1, ..., n.

Seja

$$\hat{K}_k(x;p,N) = (-1)^k \tilde{K}_k\left(-x - \frac{(n-1)(2p-1)}{\sqrt{2p(1-p)N}};p,N\right).$$
(5.29)

Dessa forma, esses polinômios satisfazem a relação de recorrência de três termos da forma (3.7) com

$$\hat{a}_k(N) = \sqrt{\frac{k+1}{2}\left(1-\frac{k}{N}\right)} \quad e \quad \hat{b}_k(N) = -\frac{(n-1-k)(2p-1)}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}}.$$

Podemos ver que essas funções, que são os elementos da matriz $J_n(N)$, são crescentes de N. Logo, pelo teorema de Perron–Frobenius, o maior zero de $\hat{K}_k(x; p, N)$, que é

$$\frac{-\kappa_{n,n}(p,N) + pN - (n-1)(2p-1)}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}},$$

é função crescente de N.

Da relação (5.21) e da definição (5.29) seque que o maior zero de $\hat{K}_k(x; p, N)$ converge para $-h_{n,n}$. Então, o comportamento decrescente do maior zero e a convergência para $-h_{n,n} = h_{n,1}$ garantem que

$$\frac{-\kappa_{n,n}(p,N) + pN - (n-1)(2p-1)}{\sqrt{2p(1-p)N}} \le h_{n,1}, \quad 1/2 \le p < 1.$$

Rescrevendo essa última desigualdade, temos

$$\kappa_{n,n}(p,N) \ge pN - (n-1)(2p-1) - \sqrt{2p(1-p)N}h_{n,1}, \quad 1/2 \le p < 1.$$

Consideremos agora

$$\hat{K}_k(x;p,N) = \tilde{K}_k\left(x\sqrt{1-\frac{n-1}{N}} - \frac{(n-1)(2p-1)}{\sqrt{2p(1-p)N}};p,N\right).$$
(5.30)

Tais polinômios satisfazem a relação de recorrência de três termos da forma (3.7) com

$$\hat{a}_k(N) = \sqrt{\frac{(k+1)(N-k)}{2(N-n+1)}}$$
 e $\hat{b}_k(N) = \frac{(n-1-k)(2p-1)}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}}$.

Essas funções, que são os elementos da matriz $J_n(N)$, são decrescentes de N. Portanto, pelo Teorema de Perron–Frobenius, o maior zero de $\hat{K}_k(x; p, N)$, que é

$$\frac{\kappa_{n,1}(p,N) - pN + (n-1)(2p-1)}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}},$$

é função decrescente de N.

A relação (5.21) e a definição (5.30) implicam que o maior zero de $\hat{K}_k(x; p, N)$ converge para $h_{n,1}$. Então, o comportamento decrescente do maior zero e a convergência para $h_{n,1}$ garantem que

$$\frac{\kappa_{n,1}(p,N) - pN + (n-1)(2p-1)}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}} \ge h_{n,1}, \quad 1/2 \le p < 1,$$

ou seja,

$$\kappa_{n,1}(p,N) \le pN - (n-1)(2p-1)\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}h_{n,1}, \quad 1/2 \le p < 1.$$

Finalmente, definimos

$$\hat{K}_k(x;p,N) = (-1)^k \tilde{K}_k\left(-x\sqrt{1-\frac{n-1}{N}};p,N\right).$$
(5.31)

Assim, temos que os coeficientes da relação de recorrência de três termos (3.7) são

$$\hat{a}_k(N) = \sqrt{\frac{(k+1)(N-k)}{2(N-n+1)}}$$
 e $\hat{b}_k(N) = \frac{k(2p-1)}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}}$.

Podemos ver que essas funções, que são os elementos da matriz $J_n(N)$, são decrescentes de N. Logo, pelo Teorema de Perron–Frobenius, o maior zero de $\hat{K}_k(x; p, N)$, que é

$$\frac{-\kappa_{n,n}(p,N) - pN}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}},$$

é função decrescente de N. Como, pela relação (5.21), o maior zero de (5.31) converge para $-h_{n,n}$, segue que

$$\frac{-\kappa_{n,n}(p,N) - pN}{\sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}} \ge -h_{n,n}, \quad 1/2 \le p < 1,$$

ou, equivalentemente,

$$\kappa_{n,n}(p,N) \le pN - \sqrt{2p(1-p)(N-n+1)}h_{n,1}, \quad 1/2 \le p < 1,$$

que completa o Teorema 5.3.1.

Obtemos limitantes explícitos para os zeros dos polinômios de Kravchuk usando limitantes explícitos para os zeros dos polinômios de Hermite. Os limitantes (4.2) de [11, Teorema 2] para os zeros dos polinômios de Hermite implicam no seguinte resultado.

Corolário 5.3.1. Sejam $n, N \in \mathbb{N}$, com $n \leq N$, $e \mid 0 .$

(i) Se
$$0 , então
 $pN - \sqrt{\frac{2p(1-p)N(n^2 - \frac{3}{2}n + 2 + (n-2)\sqrt{n^2 + n + 4})}{n+4}} \le \kappa_{n,n}(p, N),$ (5.32)
 e
 $\kappa_{n,1}(p, N) \le$ (5.33)$$

$$pN + (1-2p)(n-1) + \sqrt{\frac{2p(1-p)N(n^2 - \frac{3}{2}n + 2 + (n-2)\sqrt{n^2 + n + 4})}{n+4}}$$
(5.53)

(ii) Se
$$1/2 \le p < 1$$
, então
 $pN - (2p - 1)(n - 1) - \sqrt{\frac{2p(1 - p)N(n^2 - \frac{3}{2}n + 2 + (n - 2)\sqrt{n^2 + n + 4})}{n + 4}}$
(5.34)

$$\leq \kappa_{n,n}(p,N),$$

e

$$\kappa_{n,1}(p,N) \le pN + \sqrt{\frac{2p(1-p)N(n^2 - \frac{3}{2}n + 2 + (n-2)\sqrt{n^2 + n + 4})}{n+4}}.$$
(5.35)

Os limitantes (4.4), de Szegő's [41, (6.32.6)], implicam

Corolário 5.3.2. Sejam $n, N \in \mathbb{N}$, com $n \leq N$, $e \mid 0 .$

(i) Se 0 , então $<math>pN - \sqrt{2p(1-p)N}((2n+1)^{1/2} - 1.85575(2n+1)^{-1/6}) \le \kappa_{n,n}(p,N),$ $\kappa_{n,1}(p,N) \le pN + (1-2p)(n-1) + \sqrt{2p(1-p)N}((2n+1)^{1/2} - 1.85575(2n+1)^{-1/6}).$ (ii) Se $1/2 \le p < 1$, então

$$pN - (2p - 1)(n - 1) - \sqrt{2p(1 - p)N}((2n + 1)^{1/2} - 1.85575(2n + 1)^{-1/6})$$

$$\leq \kappa_{n,n}(p, N),$$

$$\kappa_{n,1}(p, N) \leq pN + \sqrt{2p(1 - p)N}((2n + 1)^{1/2} - 1.85575(2n + 1)^{-1/6}).$$

As Figuras 5.9, 5.10, 5.11 e 5.12 mostram os cinco zeros de $K_5(x; p, N)$ com os limitantes do Corolário 5.3.1. Nas Figuras 5.9 e 5.10, N é fixo, respectivamente N = 30 e N = 100, e os gráficos são em função de p. Nas Figuras 5.11 e 5.12, p é fixo, respectivamente p = 0.3 e p = 0.7, e os gráficos são em função de N.



Figura 5.9: Gráficos dos zeros de $K_5(x; p, 30)$ em traços contínuos e limitantes do Corolário 5.3.1 para N = 30 em traços pontilhados, com relação ao parâmetro p.



Figura 5.10: Gráficos dos zeros de $K_5(x; p, 100)$ em traços contínuos e limitantes do Corolário 5.3.1 para N = 100 em traços pontilhados, com relação ao parâmetro p.



Figura 5.11: Gráficos dos zeros de $K_5(x; 0.3, N)$ em traços contínuos e limitantes do Corolário 5.3.1 para p = 0.3 em traços pontilhados, com relação ao parâmetro N.



Figura 5.12: Gráficos dos zeros de $K_5(x; 0.7, N)$ em traços contínuos e limitantes do Corolário 5.3.1 para p = 0.7 em traços pontilhados, com relação ao parâmetro N.

Por fim, vamos comparar os nossos resultados com os mais precisos encontrados na literatura, que são dados pelo artigo [28, Teorema 6]. Nesse artigo, Krasikov e Zarkh provaram que, para q = 1 - p,

$$(\sqrt{p(N-n)} + \sqrt{qn})^2 + \frac{3(pq)^{1/6}(\sqrt{p(N-n)} + \sqrt{qn})^{2/3}(N - (\sqrt{p(N-n)} + \sqrt{qn})^2)^{1/3}}{2^{2/3}n^{1/6}(N-n)^{1/6}} < k_{n,n}(p,N),$$
(5.36)

se n < pN, e

$$k_{n,1}(p,N) < (5.37)$$

$$(\sqrt{p(N-n)} - \sqrt{qn})^2 - \frac{3(pq)^{1/6}(\sqrt{p(N-n)} - \sqrt{qn})^{2/3}(N - (\sqrt{p(N-n)} - \sqrt{qn})^2)^{1/3}}{2^{2/3}n^{1/6}(N-n)^{1/6}}$$

se n < (1 - p)N.

Comparamos assintoticamente os resultados obtidos nos Corolários 5.3.1 e 5.3.2 com (5.36) e (5.37), quando esses valem. Para um valor fixo de p, quando N é suficientemente grande, os limitantes do Corolário 5.3.2 são mais precisos que (5.36) e (5.37); observamos que, para $n \leq 15$, os limitantes do Corolário 5.3.1 são os mais precisos quando $N \to \infty$. Quando $p \to 0$ ou $p \to 1$, os limitantes dos Corolários 5.3.1 e 5.3.2 são mais precisos que (5.36) e (5.37). As tabelas numéricas abaixo confirmam estas observações.

Destacamos com um contorno retangular nas tabelas quais são os melhores limitantes, quando não houver marcação é porque os limitantes estão fora do intervalo [0, N], sendo que os zeros estão dentro deste intervalo, de acordo com Teorema 2.2.2.

Tabela 5.4: Valores numéricos do menor zero de $K_5(x; p, 30)$, $\kappa_{5,5}$, e do maior zero, $\kappa_{5,1}$, o limitante inferior (5.36) e os limitantes inferiores do Corolário 5.3.1, (5.32) e (5.34), dependendo do valor de p, o limitante superior (5.37) e os limitantes superiores do Corolário 5.3.1, (5.33) e (5.35), dependendo do valor de p, para n = 5, N = 30 e valores de p iguais a 0.0001, 0.3, 0.5, 0.7, e 0.9999.

| p | (5.36) | (5.32), (5.34) | $\kappa_{5,5}$ | $\kappa_{5,1}$ | (5.33), (5.35) | (5.37) |
|--------|---------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|---------|
| 0.0001 | | -0.1514 | 7.1×10^{-15} | 4.0129 | 4.1592 | 4.3045 |
| 0.3 | 2.5796 | 1.8035 | 3.1147 | 17.0013 | 17.7965 | 17.5276 |
| 0.5 | 6.9333 | 7.1479 | 7.4661 | 22.5339 | 22.8521 | 23.0667 |
| 0.7 | 12.4724 | 12.2035 | 12.9987 | 26.8853 | 28.1965 | 27.4204 |
| 0.9999 | 25.6955 | 25.8408 | 25.9871 | 30.0000 | 30.1540 | |

Tabela 5.5: Valores numéricos do menor zero de $K_5(x; 0.3, N)$, $\kappa_{5,5}$, e do maior zero, $\kappa_{5,1}$, o limitante inferior (5.36), o limitante inferior (5.32) do Corolário 5.3.1 para 0 < $p \leq 1/2$, o limitante superior (5.37), e o limitante superior (5.33) do Corolário 5.3.1 para 0 < $p \leq 1/2$, para n = 5, p = 0.3 e valores de N iguais a 5, 10, 50, 100, e 500.

| N | (5.36) | (5.32) | $\kappa_{5,5}$ | $\kappa_{5,1}$ | (5.33) | (5.37) |
|-----|----------|----------|----------------|----------------|----------|----------|
| 5 | | -1.4380 | 0.0075 | 4.7614 | 6.0380 | |
| 10 | | -1.1549 | 0.2593 | 7.7528 | 8.7549 | 8.2300 |
| 50 | 6.4055 | 5.7093 | 6.9848 | 25.1477 | 25.8907 | 25.7871 |
| 100 | 17.3400 | 16.8610 | 18.1043 | 44.0398 | 44.7390 | 44.8992 |
| 500 | 120.1616 | 120.6203 | 121.8568 | 180.2960 | 180.9797 | 182.1080 |

Tabela 5.6: Valores numéricos do menor zero de $K_5(x; 0.7, N)$, $\kappa_{5,5}$, e do maior zero, $\kappa_{5,1}$, o limitante inferior (5.36) e o limitante inferior (5.34) do Corolário 5.3.1 para $1/2 \le p < 1$, o limitante superior (5.37) e o limitante superior (5.35) do Corolário 5.3.1 para $1/2 \le p < 1$, para n = 5, p = 0.7 e valores de N iguais a 5, 10, 50, 100, e 500.

| N | (5.36) | (5.34) | $\kappa_{5,5}$ | $\kappa_{5,1}$ | (5.35) | (5.37) |
|-----|----------|----------|----------------|----------------|----------|----------|
| 5 | | -1.0380 | 0.2386 | 4.9925 | 6.4380 | |
| 10 | 1.7700 | 1.2451 | 2.2472 | 9.7407 | 11.1549 | |
| 50 | 24.2129 | 24.1093 | 24.8523 | 43.0152 | 44.2907 | 43.5945 |
| 100 | 55.1008 | 55.2610 | 55.9602 | 81.8957 | 83.1390 | 82.6600 |
| 500 | 317.8920 | 319.0203 | 319.7040 | 378.1432 | 379.3797 | 379.8384 |

Tabela 5.7: Valores numéricos do menor zero de $K_5(x; 0.5, N)$, $\kappa_{5,5}$, e do maior zero, $\kappa_{5,1}$, o limitantes inferior (5.36) e o limitante inferior do Corolário 5.3.1, o limitante superior (5.37) e o limitante superior do Corolário 5.3.1, para n = 5, p = 0.5 e valores de N iguais a 5, 10, 50, 100, e 500.

| Ν | (5.36) | (5.34) | $\kappa_{5,5}$ | $\kappa_{5,1}$ | (5.35) | (5.37) |
|-----|----------|----------|----------------|----------------|----------|----------|
| 5 | | -0.7056 | 0.0650 | 4.9350 | 5.7056 | |
| 10 | | 0.4666 | 1.0000 | 9.0000 | 9.5334 | |
| 50 | 14.4814 | 14.8630 | 15.1226 | 34.8774 | 35.1370 | 35.5186 |
| 100 | 34.9994 | 35.6642 | 35.8725 | 64.1275 | 64.3358 | 65.0006 |
| 500 | 216.2194 | 217.9441 | 218.1282 | 281.8718 | 282.0559 | 283.7806 |

5.4 Polinômios de Hahn

Os polinômios de Hahn, $Q_n(x; \alpha, \beta, N), \alpha, \beta > -1, n \leq N$, definidos por

$$Q_n(x;\alpha,\beta,N) = {}_{3}F_2 \left(\begin{array}{c|c} -n,-x,n+\alpha+\beta+1\\ -N,\alpha+1 \end{array} \right),$$

satisfazem a relação de ortogonalidade

$$\sum_{k=0}^{N} \binom{\alpha+k}{k} \binom{\beta+N-k}{N-k} Q_n(k;\alpha,\beta,N) Q_m(k;\alpha,\beta,N) = \frac{(-1)^n (n+\alpha+\beta+1)_{N+1} (\beta+1)_n n!}{(2n+\alpha+\beta+1)(\alpha+1)_n (-N)_n N!} \delta_{n,m}$$

para $n, m \leq N$.

Os polinômios de Hahn $Q_k(x;\alpha,\beta,N)$ satisfazem a relação de recorrência de três termos

$$-x Q_{k}(x; \alpha, \beta, N) = A_{k}Q_{k+1}(x; \alpha, \beta, N) - (A_{k} + C_{k})Q_{k}(x; \alpha, \beta, N) + C_{k}Q_{k-1}(x; \alpha, \beta, N),$$
(5.38)

com

$$A_{k} = \frac{(k+\alpha+\beta+1)(k+\alpha+1)(N-k)}{(2k+\alpha+\beta+1)(2k+\alpha+\beta+2)} \quad e \quad C_{k} = \frac{k(k+\alpha+\beta+N+1)(k+\beta)}{(2k+\alpha+\beta)(2k+\alpha+\beta+1)},$$

e satisfazem a relação de diferença

$$Q_n(x+1;\alpha,\beta,N) = A_n(x) Q_n(x;\alpha,\beta,N) - B_n(x) Q_n(x-1;\alpha,\beta,N)$$

com

$$A_n(x) = -[n(n+\alpha+\beta+1) - (x+\alpha+1) - x(N-x+\beta+1)]/[(x+\alpha+1)(N-x)] = B_n(x) = [x(N-x+\beta+1)][(x+\alpha+1)(N-x)].$$

Observe que, $B_n(x) > 0$, para $\alpha, \beta > -1$ e $x \in (0, N)$ e, portanto, pelo Teorema 2.3.1, os zeros de $Q_n(x; \alpha, \beta, N)$ têm distância maior do que um entre si.

A monotonicidade dos zeros $q_{n,j}(\alpha, \beta, N)$, com relação aos parâmetros α e β , pode ser provada através do Teorema 3.0.2. A função peso $\omega(k; \alpha, \beta, N)$ da relação
de ortogonalidade pode ser escrita como

$$\omega(x;\alpha,\beta,N) = \frac{\Gamma(\alpha+x+1)\Gamma(\beta+N-x+1)}{\Gamma(\alpha+1)\Gamma(x+1)\Gamma(\beta+1)\Gamma(N-x+1)}$$

e as derivadas logarít
micas com respeito a α e β são

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\ln \frac{\Gamma(\alpha + x + 1)\Gamma(\beta + N - x + 1)}{\Gamma(\alpha + 1)\Gamma(x + 1)\Gamma(\beta + 1)\Gamma(N - x + 1)} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\ln(\Gamma(\alpha + x + 1)) + \ln(\Gamma(\beta + N - x + 1)) - \ln(\Gamma(\alpha + 1)) - \ln(\Gamma(x + 1)) \right] \\ &- \ln(\Gamma(\beta + 1)) - \ln(\Gamma(N - x + 1)) \right] \\ &= \Gamma'(\alpha + x + 1)/\Gamma(\alpha + x + 1) - \Gamma'(\alpha + 1)/\Gamma(\alpha + 1) \\ &= \Psi(x + \alpha + 1) - \Psi(\alpha + 1), \end{split}$$

$$\begin{split} &\frac{\partial}{\partial\beta} \left[\ln \frac{\Gamma(\alpha+x+1)\Gamma(\beta+N-x+1)}{\Gamma(\alpha+1)\Gamma(x+1)\Gamma(\beta+1)\Gamma(N-x+1)} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial\beta} \left[\ln(\Gamma(\alpha+x+1)) + \ln(\Gamma(\beta+N-x+1)) - \ln(\Gamma(\alpha+1)) - \ln(\Gamma(x+1)) \right] \\ &\quad - \ln(\Gamma(\beta+1)) - \ln(\Gamma(N-x+1)) \right] \\ &= \Gamma'(\beta+N-x+1)/\Gamma(\beta+N-x+1) - \Gamma'(\beta+1)/\Gamma(\beta+1) \\ &= \Psi(\beta+N-x+1) - \Psi(\beta+1). \end{split}$$

Como já dissemos, é conhecido que a função $\Psi(x)$ é uma função crescente. Então, a primeira derivada acima é função crescente de x, enquanto a segunda é função decrescente de x, para $x \in (0, N)$. Logo, $q_{n,j}(\alpha, \beta, N)$ são funções crescentes de α e funções decrescentes de β . As figuras 5.13 e 5.14 ilustram essas monotonicidades.



Figura 5.13: Gráficos dos zeros $q_{5,1}(\alpha, 10, 30)$, $q_{5,2}(\alpha, 10, 30)$, $q_{5,3}(\alpha, 10, 30)$, $q_{5,4}(\alpha, 10, 30)$ e $q_{5,5}(\alpha, 10, 30)$ como funções de α .



Figura 5.14: Gráficos dos zeros $q_{5,1}(10, \beta, 30)$, $q_{5,2}(10, \beta, 30)$, $q_{5,3}(10, \beta, 30)$, $q_{5,4}(10, \beta, 30)$ e $q_{5,5}(10, \beta, 30)$ como funções de β .

A monotonicidade de $q_{n,j}(\alpha, \beta, N)$ com respeito a N, especificamente, a desigualdade $q_{n,j}(\alpha, \beta, N) < q_{n,j}(\alpha, \beta, N+1)$, é demonstrada no artigo de Levit [30]. Nesse artigo, é provado ainda que

$$q_{n,j}(\alpha,\beta,N) < q_{n,j}(\alpha,\beta,N+1) < q_{n,j}(\alpha,\beta,N) + 1$$

Aqui e no artigo [3], provamos o fato que $q_{n,j}(\alpha, \beta, N) < q_{n,j}(\alpha, \beta, N+1)$, com uma demonstração diferente da feita por Levit e baseada na demonstração feita por Jordaan e Toókos em [25] para os zeros dos polinômios de Kravchuck.

Proposição 5.4.1. Os zeros $q_{n,j}(\alpha, \beta, N)$, j = 1, ..., n, dos polinômios de Hahn $Q_n(x; \alpha, \beta, N)$ são funções crescentes de N, no sentido que,

$$q_{n,j}(\alpha,\beta,N) < q_{n,j}(\alpha,\beta,N+1)$$

para $N \geq n$.

Demonstração. Para esta prova vamos abandonar a notação para os zeros de Hahn $q_{n,j}(\alpha, \beta, N)$ e usar que, para $n \in N$ fixos, $n \leq N$, t_j são os zeros de $Q_n(x; \alpha, \beta, N-1)$ e q_j são os zeros de $Q_{n-1}(x; \alpha, \beta+1, N-1)$, ambos arranjados em ordem decrescente.

O Teorema 5.1 de [25], aplicado a N = N - 1, t = 1, implica que, se t_j são os zeros de $Q_n(x; \alpha, \beta, N - 1)$ e q_j os zeros de $Q_{n-1}(x; \alpha, \beta + 1, N - 1)$, então eles se entrelaçam. Isso significa que

$$t_n < q_{n-1} < \dots < q_2 < t_2 < q_1 < t_1.$$
(5.39)

Vamos usar a relação contígua para as séries $_{3}F_{2}$ dada em [2, p.155–157],

$$b_{3}F_{2} \begin{pmatrix} a, a_{2}, a_{3} \\ b, b_{2} \end{pmatrix} - a_{3}F_{2} \begin{pmatrix} a+1, a_{2}, a_{3} \\ b+1, b_{2} \end{pmatrix} + (a-b)_{3}F_{2} \begin{pmatrix} a, a_{2}, a_{3} \\ b+1, b_{2} \end{bmatrix} z$$

que para a = -n, $a_2 = -x$, $a_3 = n + \alpha + \beta + 1$, b = -N e $b_2 = \alpha + 1$ pode ser escrita em termos dos polinômios de Hahn como

$$-NQ_n(x;\alpha,\beta,N) + nQ_{n-1}(x;\alpha,\beta+1,N-1) + (N-n)Q_n(x;\alpha,\beta,N-1) = 0.$$
(5.40)

Como $t_n < t_{n-1} < \cdots < t_1$ são zeros de $Q_n(x; \alpha, \beta, N-1)$, a última identidade implica que

$$Q_n(t_j; \alpha, \beta, N) = \frac{n}{N} Q_{n-1}(t_j; \alpha, \beta + 1, N - 1).$$
 (5.41)

Por outro lado, como o coeficiente do termo de maior grau de $Q_n(x; \alpha, \beta, N)$ tem sinal $(-1)^n$, então, por (5.39), concluímos que

sinal
$$Q_{n-1}(t_j; \alpha, \beta + 1, N - 1) = (-1)^{n-j}$$
.

Isso e (5.41) implicam

sinal
$$Q_n(t_j; \alpha, \beta, N) = (-1)^{n-j}$$
.

Logo, a função $Q_n(t_j; \alpha, \beta, N)$ troca de sinal em cada um dos intervalos $(t_j, t_{j-1}), j = 2, \ldots, n$. Portanto, tem pelo menos um zero em cada um desses n-1 intervalos. Por outro lado, o coeficiente líder de $Q_n(x; \alpha, \beta, N)$ é $(-1)^n$ e o sinal em t_1 é $(-1)^{n-1}$. Logo, $Q_n(x; \alpha, \beta, N)$ tem um zero em (t_1, ∞) .

Assim, se os zeros de $Q_n(x; \alpha, \beta, N)$ são $u_n < u_{n-1} < \cdots < u_1$, então

$$t_n < u_n < t_{n-1} < \dots < t_2 < u_2 < t_1 < u_1.$$

Relembramos que $t_j = q_{n,j}(\alpha, \beta, N-1)$ e $u_j = q_{n,j}(\alpha, \beta, N)$. Então, obtemos

$$q_{n,j}(\alpha,\beta,N-1) < q_{n,j}(\alpha,\beta,N).$$

A Figura 5.15 ilustra, considerando N variando continuamente, o crescimento dos zeros da equação $Q_n(x; \alpha, \beta, N) = 0.$



Figura 5.15: Gráficos dos zeros $q_{5,1}(10, 2, N)$, $q_{5,2}(10, 2, N)$, $q_{5,3}(10, 2, N)$, $q_{5,4}(10, 2, N)$ e $q_{5,5}(10, 2, N)$ como funções de N.

Vamos usar a relação limite entre os polinômios de Hahn e os polinômios de Jacobi [26, (2.5.1)]

$$\lim_{N \to \infty} Q_n(Nx; \alpha, \beta, N) = \frac{P_n^{(\alpha, \beta)}(1 - 2x)}{P_n^{(\alpha, \beta)}(1)}.$$

Teorema 5.4.2. Sejam $n \in N$ inteiros positivos com $n \leq N \in \alpha \in \beta$ parâmetros reais satisfazendo $\alpha, \beta > -1$. Então as desigualdades para os zeros extremos de Hahn

$$\left(N + \frac{\alpha + \beta + 2}{2}\right) \left(\frac{1 - x_{n,1}(\alpha, \beta)}{2}\right) - \frac{1 + \alpha}{2} \le q_{n,n}(\alpha, \beta, N)$$
(5.42)

e

$$q_{n,1}(\alpha,\beta,N) \le \left(N + \frac{\alpha+\beta+2}{2}\right) \left(\frac{1-x_{n,n}(\alpha,\beta)}{2}\right) - \frac{1+\alpha}{2}$$
(5.43)

são satisfeitas.

Demonstração. Vamos usar a seguinte modificação

$$\tilde{Q}_k(x;\alpha,\beta,N) = (-1)^k Q_k\left(\left(N + \frac{\alpha + \beta + 2}{2}\right)x - \frac{1 + \alpha}{2};\alpha,\beta,N\right).$$
(5.44)

Assim, a relação limite abaixo é imediatamente satisfeita

$$\lim_{N \to \infty} \tilde{Q}_k(x; \alpha, \beta, N) = \frac{(-1)^k P_k^{(\alpha, \beta)} (1 - 2x)}{P_k^{(\alpha, \beta)} (1)}.$$
(5.45)

Transformando (5.38), de acordo com a modificação do argumento feita em (5.44), obtemos a seguinte relação de recorrência de três termos para $\tilde{Q}_k(x; \alpha, \beta, N)$:

$$x \ \tilde{Q}_{k}(x;\alpha,\beta,N) = \frac{A_{k}}{N + (\alpha + \beta + 2)/2} \tilde{Q}_{k+1}(x;\alpha,\beta,N) + \frac{(A_{k} + C_{k} + (1+\alpha)/2)}{N + (\alpha + \beta + 2)/2} \tilde{Q}_{k}(x;\alpha,\beta,N) + \frac{C_{k}}{N + (\alpha + \beta + 2)/2} \tilde{Q}_{k-1}(x;\alpha,\beta,N).$$

A matriz $J_n(N)$, da forma (3.11), obtida da relação de recorrência dos polinômios ortonormais correspondentes a $\tilde{Q}_k(x; \alpha, \beta, N)$, tem elementos

$$a_k(N) = \frac{\sqrt{A_k C_{k+1}}}{N + (\alpha + \beta + 2)/2}$$

= $\sqrt{\frac{4(k+1)(1+k+\alpha)(1+k+\beta)(N-k)(2+k+N+\alpha+\beta)}{(1+2k+\alpha+\beta)(2+2k+\alpha+\beta)^2(3+2k+\alpha+\beta)(2N+2+\alpha+\beta)^2}},$

 $0\leq k\leq n-2,$ e

$$b_k(N) = \frac{(A_k + C_k + (1+\alpha)/2)}{N + (\alpha + \beta + 2)/2} = \frac{2k(k+\beta) + (1+\alpha)(2k+\alpha+\beta)}{(2k+\alpha+\beta)(2+2k+\alpha+\beta)}$$

 $0 \le k \le n-1.$

A derivada de $a_k(N)$ em relação a N é

$$a'_{k}(N) = \sqrt{\frac{4(k+1)(1+k+\alpha)(1+k+\beta)}{(1+2k+\alpha+\beta)(2+2k+\alpha+\beta)^{2}(3+2k+\alpha+\beta)}} \frac{(2k+2+\alpha+\beta)^{2}}{(2\sqrt{(N-k)(N+k+2+\alpha+\beta)}(N+2+\alpha+\beta)^{2}},$$

que é sempre um valor positivo, enquanto $b_k(N)$ não depende de N. Dessa forma a matriz $J'_n(N)$, cujos elementos são as derivadas de $b_k(N)$ na diagonal e as derivadas de $a_k(N)$ na subdiagonal, é uma matriz com elementos da diagonal iguais a zero e elementos da subdiagonal positivos. Logo, $J'_n(N)$ não é definida positiva/negativa. Sendo assim, não vamos usar o Teorema de Hellmann-Feynmam, que nos daria resultados para todos os zeros, mas sim o Teorema de Perron-Frobenius, que nos dá resultados para o maior zero. Como visto, os elementos da matriz $J_n(N)$ são funções não-decrescentes de N. Então, o Teorema de Perron–Frobenius nos garante que o maior zero de $\tilde{Q}_k(x; \alpha, \beta, N)$ é função não–decrescente de N.

Sabemos, pela relação limite (5.45), que o maior zero de $\tilde{Q}_n(x; \alpha, \beta, N)$ converge para o maior zero de $P_k^{(\alpha,\beta)}(1-2x)$. Então, pelo comportamento monotonicamente crescente do maior zero de $\tilde{Q}_k(x; \alpha, \beta, N)$, temos

$$\frac{q_{n,1}(\alpha,\beta,N) + (1+\alpha)/2}{N + (\alpha+\beta+2)/2} \le \frac{1 - x_{n,n}(\alpha,\beta)}{2}.$$

Podemos isolar o maior zero de $Q_n(x; \alpha, \beta, N)$ e obter

$$q_{n,1} \le \left(N + \frac{\alpha + \beta + 2}{2}\right) \left(\frac{1 - x_{n,n}(\alpha, \beta)}{2}\right) - \frac{1 + \alpha}{2},$$

que é exatamente (5.43).

Agora, vamos obter a desigualdade para $q_{n,n}(\alpha, \beta, N)$. Para *n* fixo, vamos trabalhar com a sequência de polinômios $\hat{Q}_k(x; \alpha, \beta, N), k = 0, \ldots, n$, sendo

$$\hat{Q}_k(x;\alpha,\beta,N) = Q_k \left(-\left(N + \frac{\alpha + \beta + 2}{2}\right) \left(x - \frac{n(n+\alpha)}{2n + \alpha + \beta}\right) - \frac{1+\alpha}{2};\alpha,\beta,N \right)$$

Então, a seguinte relação limite é satisfeita para esses polinômios

$$\lim_{N \to \infty} \hat{Q}_k^{(\alpha,\beta)}(x;N) = \frac{P_k^{(\alpha,\beta)}(1+2x-(2n(n+\alpha))/(2n+\alpha+\beta))}{P_k^{(\alpha,\beta)}(1)}.$$
 (5.46)

Fazendo manipulações no argumento na relação de recorrência de três termos (5.38), obtemos

$$x \,\hat{Q}_k(x;\alpha,\beta,N) = \frac{A_k}{N + (\alpha + \beta + 2)/2} \hat{Q}_{k+1}(x;\alpha,\beta,N) + \left[\frac{(A_k + C_k + (1+\alpha)/2)}{N + (\alpha + \beta + 2)/2} + \frac{n(n+\alpha)}{2n + \alpha + \beta}\right] \hat{Q}_k(x;\alpha,\beta,N) + \frac{C_k}{N + (\alpha + \beta + 2)/2} \hat{Q}_{k-1}(x;\alpha,\beta,N).$$

A matriz $J_n(N)$, obtida da relação de recorrência para os polinômios ortonormais associados a $\hat{Q}_k(x; \alpha, \beta, N)$, possui elementos

$$a_k(N) = \sqrt{\frac{4(k+1)(1+k+\alpha)(1+k+\beta)(N-k)(2+k+N+\alpha+\beta)}{(1+2k+\alpha+\beta)(2+2k+\alpha+\beta)^2(3+2k+\alpha+\beta)(2N+2+\alpha+\beta)^2}}$$

$$b_k(N) = \frac{k(k+\alpha)}{(2k+\alpha+\beta)} + \frac{(n-k-1)(k(2n+\alpha+\beta)+(1+\alpha)(n+\alpha+\beta)+n(1+\beta))}{(2n+\alpha+\beta)(2+2k+\alpha+\beta)},$$

para k = 0, ..., n - 1.

Novamente, a derivada em relação a N dos elementos da diagonal é nula, logo $J'_n(N)$ não é definida positiva/negativa. Sendo assim, não podemos aplicar diretamente o teorema de Helmman-Feynman.

Temos que $a_k = a_k(N)$ são positivos para $n \ge 2$. Os elementos $a_k(N)$ são os mesmos do caso anterior e, como vimos, são funções crescentes de N e $b_k(N)$ não depende de N. Então, pelo Teorema de Perron-Frobenius, o maior zero de $\hat{Q}_n^{(\alpha,\beta)}(x;N)$ é função não-decrescente de N.

Pela relação limite (5.46), temos que o maior zero de $\hat{Q}_n(x; \alpha, \beta, N)$ converge para o maior zero de $P_k^{(\alpha,\beta)}(1 + 2x - (2n(n + \alpha))(2n + \alpha + \beta))$. Por causa do comportamento monotonicamente crescente, temos a seguinte relação entre esses dois zeros:

$$\frac{-q_{n,n}(\alpha,\beta,N) - (1+\alpha)/2}{N + (\alpha+\beta+2)/2} + \frac{n(n+\alpha)}{2n+\alpha+\beta} \le \frac{x_{n,1}(\alpha,\beta) - 1}{2} + \frac{n(n+\alpha)}{2n+\alpha+\beta}.$$

Isolando o zero $q_{n,n}(\alpha,\beta,N)$, obtemos

$$\left(N + \frac{\alpha + \beta + 2}{2}\right) \left(\frac{1 - x_{n,1}(\alpha, \beta)}{2}\right) - \frac{1 + \alpha}{2} \le q_{n,n}(\alpha, \beta, N).$$

que é exatamente (5.42).

Usando os limitantes dados na Proposição 4.3.1, obtemos o seguinte corolá-

Corolário 5.4.1. Sejam $n, N \in \mathbb{N}$, com $n \leq N$, $\alpha, \beta > -1$ e sejam A, B e Δ como definidos na Proposição 4.3.1. Então,

$$\left(N + \frac{\alpha + \beta + 2}{2}\right) \left(\frac{A - B - 4(n-1)\sqrt{\Delta}}{2A}\right) - \frac{1 + \alpha}{2} \le q_{n,n}(\alpha, \beta, N), \quad (5.47)$$

e

rio:

$$q_{n,1}(\alpha,\beta,N) \le \left(N + \frac{\alpha+\beta+2}{2}\right) \left(\frac{A-B+4(n-1)\sqrt{\Delta}}{2A}\right) - \frac{1+\alpha}{2}.$$
 (5.48)

Usando os resultados de Krasikov, da Proposição 4.3.2, obtemos:

Corolário 5.4.2. Sejam $n, N \in \mathbb{N}$, com $n \leq N$, $\alpha, \beta > -1$ e C, D e R definidos na Proposição 4.3.2. Então,

$$\left(N + \frac{\alpha + \beta + 2}{2}\right) \left(\frac{2R^{1/3} - 2DR^{1/3} + 3(1 - D^2)^{2/3}}{2(2R)^{1/3}} - \frac{4(\alpha - \beta)(\alpha + \beta + 2)}{2((2n + \alpha + \beta + 1)^2 + 2\alpha + 2\beta + 3)^{3/2}}\right) - \frac{1 + \alpha}{2} \le q_{n,n}(\alpha, \beta, N)$$

e

$$q_{n,1}(\alpha,\beta,N) \le \left(N + \frac{\alpha+\beta+2}{2}\right) \left(\frac{2R^{1/3} - 2CR^{1/3} - 3(1-C^2)^{2/3}}{2(2R)^{1/3}}\right) - \frac{1+\alpha}{2}.$$





Figura 5.16: Gráficos dos zeros de $Q_5(x; \alpha, 10, 30)$ em traços contínuos e limitantes do Corolário 5.4.1 para $\beta = 10$ e N = 30 em traços pontilhados, com relação ao parâmetro α .



Figura 5.17: Gráficos dos zeros de $Q_5(x; 10, \beta, 30)$ em traços contínuos e limitantes do Corolário 5.4.1 para $\alpha = 10$ e N = 30 em traços pontilhados, como função de β .



Figura 5.18: Gráficos dos zeros de $Q_5(x; 10, 2, N)$ em traços contínuos e limitantes do Corolário 5.4.1 para $\alpha = 10$ e $\beta = 2$ em traços pontilhados, como função de N.

Para os zeros dos polinômios de Hahn, Krasikov e Zarkh [28, Teor. 10]

provam que, definindo

$$V_{1} = \sqrt{n(n + \alpha + \beta + 1) + (1 + \alpha)(1 + \beta)},$$

$$V_{2} = \sqrt{n(n + \alpha + \beta + 1)((n + \alpha + \beta + 2)N - n(n + \alpha + \beta + 1))},$$

$$U_{1} = N((n + \alpha + \beta + 2) - N) - 2n(n + \alpha + \beta + 1),$$

$$U_{2} = (n + \alpha + \beta + 2)((n + \alpha + \beta + 2) - N) + 2n(n + \alpha + \beta + 1),$$

são válidas as seguintes desigualdades

$$\frac{S_1 - 2V_1V_2}{S_2} + \frac{3}{2S_2} \left(\frac{((\alpha - \beta)V_2 + U_1V_1)^2((\alpha - \beta)V_2 + U_2V_1)^2}{5V_1V_2S_2} \right) < q_{n,n}(\alpha, \beta, N),$$
(5.49)

quando $n \geq 5$ e $n(n+\alpha+\beta+1) < (1+\alpha)N,$ e

$$q_{n,1}(\alpha,\beta,N) < \frac{S_1 - 2V_1V_2}{S_2} - \frac{3}{2S_2} \left(\frac{((\alpha-\beta)V_2 - U_1V_1)^2((\alpha-\beta)V_2 - U_2V_1)^2}{V_1V_2S_2} \right),$$
(5.50)

quando $n(n + \alpha + \beta + 1) < (1 + \beta)N.$

Observe que esses limitantes somente são válidos para certas regiões. De modo geral, eles são válidos para regiões próximas de $n < \sqrt{(1+\beta)N}$ ou $n < \sqrt{(1+\alpha)N}$.

Experimentos numéricos mostram que, em geral, os Corolários 5.4.1 e 5.4.2 fornecem resultados que são melhores do que (5.49) e (5.50) quando N é suficientemente grande. Mais especificamente, quando $\alpha \to \infty$ o limitante superior (5.50) não é aplicável porque a restrição $n(n + \alpha + \beta + 1) < (1 + \beta)N$ não é satisfeita. Além disso, o limitante inferior (5.47) é melhor do que (5.49) para a maior parte de valores de $n \in \beta$. Similarmente, quando $\beta \to \infty$, a restrição $n(n + \alpha + \beta + 1) < (1 + \alpha)N$ falha, então o limitante inferior (5.49) não pode ser usado, enquanto o limitante superior (5.50) é melhor do que aquele dado em (5.48) em uma grande parte do plano (n, β) . As tabelas abaixo exemplificam isso.

Algumas linhas não são marcadas porque os limitantes estão fora do intervalo [0, N], e os zeros estão dentro deste intervalo, de acordo com Teorema 2.2.2.

Tabela 5.8: Valores numéricos do menor zero de $Q_5(x; \alpha, 10, 30)$, $q_{5,5}$, e do maior zero, $q_{5,1}$, o limitantes inferiores (5.49) e (5.47), e os limitantes superiores (5.50) e (5.48), para n = 5, $\beta = 10$, N = 30 e valores de α iguais a -0.5, 5, 10, 50, e 200.

| α | (5.49) | (5.47) | $q_{5,5}$ | $q_{5,1}$ | (5.48) | (5.50) |
|------|---------|---------|-----------|-----------|---------|---------|
| -0.5 | | 0.0142 | 0.0911 | 19.0850 | 19.8198 | |
| 5 | | 1.7727 | 2.4417 | 23.2988 | 24.1896 | |
| 10 | 2.6382 | 3.8297 | 4.8068 | 25.1932 | 26.1703 | 26.4774 |
| 50 | 11.3974 | 12.6026 | 14.5032 | 29.0000 | 30.4896 | 30.0000 |
| 200 | 18.8195 | 18.4064 | 21.3024 | 29.9415 | 32.1985 | |

Tabela 5.9: Valores numéricos do menor zero de $Q_5(x; 10, \beta, 30)$, $q_{5,5}$, e do maior zero, $q_{5,1}$, o limitantes inferiores (5.49) e (5.47), e os limitantes superiores (5.50) e (5.48), para n = 5, $\alpha = 10$, N = 30 e valores de β iguais a -0.5, 5, 10, 50, e 200.

| β | (5.49) | (5.47) | $q_{5,5}$ | $q_{5,1}$ | (5.48) | (5.50) |
|---------|--------|---------|-----------|-----------|---------|---------|
| -0.5 | 7.1672 | 10.1802 | 10.9150 | 29.9089 | 29.9858 | |
| 5 | 4.0120 | 5.8104 | 6.7012 | 27.5583 | 28.2273 | 28.5616 |
| 10 | 2.6382 | 3.8297 | 4.8068 | 25.1932 | 26.1703 | 26.4774 |
| 50 | | -0.4896 | 1.0000 | 15.4968 | 17.3974 | |
| 200 | | -2.1985 | 0.0585 | 8.6976 | 11.5936 | |

Tabela 5.10: Valores numéricos do menor zero de $Q_5(x; 10, 2, N)$, $q_{5,5}$, e do maior zero, $q_{5,1}$, o limitantes inferiores (5.49) e (5.47), e os limitantes superiores (5.50) e (5.48), para n = 5, $\alpha = 10$, $\beta = 2$ e valores de N iguais a 5, 10, 50, 100, e 500.

| N | (5.49) | (5.47) | $q_{5,5}$ | $q_{5,1}$ | (5.48) | (5.50) |
|-----|----------|----------|-----------|-----------|----------|----------|
| 5 | | -1.2126 | 0.1659 | 4.9975 | 5.8174 | |
| 10 | 0.4624 | 0.5738 | 1.5604 | 9.9130 | 10.5330 | |
| 50 | 10.7916 | 14.8650 | 15.8455 | 47.8746 | 48.2575 | 48.9034 |
| 100 | 24.6288 | 32.7290 | 34.2895 | 94.9150 | 95.4133 | 96.6026 |
| 500 | 136.4521 | 175.6412 | 182.5365 | 470.6930 | 472.6592 | 478.9188 |

5.5 Polinômios de Gram

Seja N um número inteiro positivo. Como já dito na introdução, os polinômios de Gram são ortogonais em relação ao produto interno

$$\langle f,g\rangle = \sum_{k=0}^{N} f(k)g(k).$$
(5.51)

Lembramos que eles são um caso particular dos polinômios de Hahn, com $\alpha = 0$ e $\beta = 0.$

É mais usual considerar a soma em N valores equidistantes

$$x_k(N) = -1 + \frac{2k-1}{N}, \quad k = 1, \dots, N_k$$

no intervalo [-1, 1]. Essa modificação é obtida de uma simples mudança de variável. Assim, trabalharemos com os polinômios de Gram obtidos do produto interno

$$\langle f, g \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f(x_k(N))g(x_k(N)),$$
 (5.52)

cuja correspondente norma é

$$||f||_{N} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} f^{2}(x_{k}(N)), \qquad (5.53)$$

para funções em [-1, 1] que não se anulam simultaneamente em $x_1(N), \ldots, x_N(N)$, sendo $x_k(N) = -1 + (2k - 1)/N$.

Os polinômios ortogonais com relação a esses produtos internos parecem ser os primeiros polinômios ortogonais de variável discreta introduzidos na literatura. Eles aparecem em trabalhos de Chebyshev de 1855 [6, 29] por razões como as descritas anteriormente. Desde então, suas propriedades têm sido estudadas por muitos matemáticos, incluindo Gram. Hoje em dia, eles são mais comumente chamados de polinômios de Gram, terminologia usada em [5] por exemplo, mas também são conhecidos por polinômios de Chebyshev discretos, na terminologia usada em [14, 41]. Despeito a fundamental contribuição de Chebyshev, para evitar ambiguidade com os mais conhecidos e extensivamente usados polinômios de Cheyshev de primeira e segunda espécie, preferimos chamá-los de polinômios de Gram. A principal motivação para encontrarmos as melhores aproximações para as raízes dos polinômios de Gram é que eles estão diretamente envolvidos no problema de aproximação de somas por fórmulas do tipo quadratura de Gauss e o problema dos mínimos quadrados clássico, como visto na introdução.

Na seção anterior obtivemos valores limites apenas para os zeros extremos dos polinômios de Hahn e, em particular, para os zeros extremos dos polinômios de Gram. Aqui estabelecemos limitantes precisos para cada um dos zeros dos polinômios de Gram.

Vamos considerar $G_n(x; N)$ os polinômios de Gram ortogonais com relação ao produto interno (5.52) e mônicos, isto é, com coeficiente de maior grau igual a um. Eles podem ser representados pela série hipergeométrica como

$$G_n(x;N) = \frac{2^n (1-N)_n}{N^n \binom{2n}{n}} {}_3F_2 \left(\begin{array}{c} -n, n+1, (1-N-Nx)/2\\ 1, 1-N \end{array} \right).$$
(5.54)

Estes polinômios também podem ser obtidos pela relação de recorrência de três termos com $G_0(x; N) = 1$ e $G_1(x; N) = x$,

$$G_n(x;N) = xG_{n-1}(x;N) - \gamma_{n-1}(N)G_{n-2}(x;N), \quad 2 \le n \le N-1, \quad (5.55)$$

sendo

$$\gamma_n(N) = \frac{n^2(N^2 - n^2)}{N^2(4n^2 - 1)}, \quad 1 \le n \le N - 1.$$

Denotaremos $g_{n,i}(N)$ os zeros de $G_n(x; N)$ arranjados em ordem decrescente:

$$-1 + \frac{1}{N} < g_{n,n}(N) < g_{n,n-1}(N) < \dots < g_{n,1}(N) < 1 - \frac{1}{N}.$$

O resultado que obtivemos envolve os zeros dos polinômios de Gram e zeros dos polinômios de Legendre, $P_n(x)$, pois eles satisfazem a relação limite (5.45), que pode ser reescrita como

$$\lim_{N \to \infty} G_n(x; N) = \frac{2^n}{\binom{2n}{n}(2n+1)} P_n(x), \quad 0 \le n \le N - 1.$$
(5.56)

Teorema 5.5.1. Sejam, para $n, N \in \mathbb{N}$ $e \ n \le N - 1$, $g_{n,k}(N)$ os zeros do polinômio de Gram de grau $n \ e \ x_{n,k}$ os zeros do polinômio de Legendre de grau n, ambos arranjados em ordem decrescente. Os zeros positivos de $G_n(x; N)$ satisfazem

$$x_{n,k}^2 - \frac{n^2 \bar{\zeta}}{N^2} \le g_{n,k}(N)^2 \le x_{n,k}^2 + \frac{n^2 \bar{\xi}(n)}{N^2}, \qquad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$$

e, se $x_{n,k}^2 > n^2 \bar{\zeta}/N^2$, $\sqrt{x_{n,k}^2 - \frac{n^2 \bar{\zeta}}{N^2}} \le g_{n,k}(N) \le \sqrt{x_{n,k}^2 + \frac{n^2 \bar{\xi}(n)}{N^2}}, \qquad k = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor,$ (5.57)

onde

$$\bar{\zeta} = \frac{12 + 7\sqrt{3}}{24} \approx 1,00518,$$
(5.58)

 $e \ \bar{\xi}(n)$ é dado, dependendo se n é par ou ímpar, por,

$$\bar{\xi}(n) = \begin{cases} \frac{-7945 + \sqrt{74267554}}{41580} \approx 0,0161824, & n \ par,\\ \frac{-489951 + 8\sqrt{4255370889}}{2207205} \approx 0,0144593, & n \ impar. \end{cases}$$
(5.59)

Experimentos numéricos mostram que os valores $\bar{\xi} = 0$ e $\bar{\zeta} = 0, 5$ satisfazem a desigualdade (5.57), isto é,

$$\sqrt{x_{n,k}^2 - \frac{n^2}{4N^2}} \le g_{n,k}(N) \le x_{n,k}$$

Infelizmente, a prova para estes resultados não foi possível com os teoremas de monotonicidade de zeros que temos usado. A despeito disso, os limitantes (5.57) são extremamente precisos, pois usados como aproximação inicial no método de Weiertrass–Dochev, por exemplo, oferecem em poucas iterações valores numéricos extremamente precisos para os zeros de $G_n(x; N)$. Esse fato é exemplificado no final desta seção.

A demonstração do Teorema 5.5.1, semelhantemente às demais demonstrações feitas nesse capítulo, é baseada no fato de que certas funções que envolvem os zeros dos polinômios são monotônicas. Os polinômios de Gram $G_n(x; N)$ são simétricos, de modo que $G_n(x; N) = (-1)^n G_n(-x; N)$. Assim, se $g_{n,k}(N)$ é um zero de $G_n(x; N)$, então $-g_{n,k}(N)$ também é um zero de $G_n(x; N)$. Suponhamos que os zeros positivos de $G_n(x; N)$ sejam funções crescentes do parâmetro N. Então, por causa da simetria, os zeros negativos são funções decrescentes de N. Esse fato dificulta encontrarmos funções envolvendo os zeros de $G_n(x; N)$ que sejam monotônicas em relação ao parâmetro N. Por isso, faremos uma decomposição quadrática, descrita a seguir, de modo que trabalhemos somente com os zeros positivos de $G_n(x; N)$.

5.5.1 Decomposição quadrática dos polinômios de Gram

Os polinômios de Gram $G_n(x; N)$ são simétricos, isto é, $G_n(x; N) = (-1)^n G_n(-x; N)$. Podemos verificar este fato por indução sobre o grau na relação de recorrência (5.55).

Seja N um número inteiro positivo fixo. Vamos introduzir as famílias $R_n(x)$ e $Q_n(x)$ da seguinte forma

$$G_{2m}(x;N) = R_m(x^2), \quad 0 \le m \le \lfloor (N-1)/2 \rfloor,$$
(5.60)

$$G_{2m+1}(x;N) = x Q_m(x^2), \quad 0 \le m \le \lfloor (N-2)/2 \rfloor,$$
 (5.61)

em que o símbolo |x| representa o maior inteiro menor do que x.

Podemos obter imediatamente as relações de recorrência de três termos destas duas novas famílias através do método descrito em [8, Teorema 9.1], que nos fornece:

$$R_{-1}(x) = 0, \quad R_0(x) = 1,$$

$$R_m(x) = (x - c_m)R_{m-1}(x) - \lambda_m R_{m-2}(x), \quad 1 \le m \le \lfloor (N - 1)/2 \rfloor, \quad (5.62)$$

е

$$Q_{-1}(x) = 0, \quad Q_0(x) = 1,$$

$$Q_m(x) = (x - d_m)Q_{m-1}(x) - \nu_m Q_{m-2}(x), \quad 1 \le m \le \lfloor (N-2)/2 \rfloor, \quad (5.63)$$

 sendo

$$c_{1} = \frac{1}{3} \left(1 - \frac{1}{N^{2}} \right),$$

$$c_{m} = \frac{-4m(2m-3)\left(4m^{2} - 6m - N^{2} + 4\right) + 3N^{2} - 7}{(4m-5)(4m-1)N^{2}},$$

$$\lambda_{m} = \frac{4(3-2m)^{2}(m-1)^{2}\left((3-2m)^{2} - N^{2}\right)\left(4(m-1)^{2} - N^{2}\right)}{(5-4m)^{2}(4m-7)(4m-3)N^{4}},$$

$$d_{m} = \frac{4m(2m-1)\left(-4m^{2} + 2m + N^{2}\right) - N^{2} + 1}{(4m-3)(4m+1)N^{2}},$$

$$\nu_{m} = \frac{4(1-2m)^{2}(m-1)^{2}\left((1-2m)^{2} - N^{2}\right)\left(4(m-1)^{2} - N^{2}\right)}{(3-4m)^{2}(4m-5)(4m-1)N^{4}}.$$

Analisaremos separadamente os polinômios $R_m(x)$ e $Q_m(x)$ que correspondem aos polinômios de Gram de graus pares e ímpares, respectivamente. Dessa forma, obteremos limitantes, dependendo do grau ser par ou ímpar, para todos os zeros positivos dos polinômios de Gram $G_n(x; N)$.

5.5.2 Grau par

Sejam inteiros positivos $m, n \in N$ tais que $n = 2m \in 0 \le n \le N - 1$. Consideremos os polinômios $R_m(x)$ definidos em (5.60).

Limitantes superiores para os zeros - grau par

Definimos ainda uma nova família de polinômios

$$\bar{R}_m(x;\xi) = R_m\left(x + \frac{\xi 4m^2}{N^2}\right), \quad 0 \le m \le \lfloor (N-1)/2 \rfloor,$$
(5.64)

sendo $\xi > 0$ um número positivo que será escolhido posteriormente.

A matriz de Jacobi J_m da forma (3.11), associada à sequência de polinômios $\{\bar{R}_m(x;\xi)\}$, tem os elementos obtidos a partir da relação de recorrência de três termos dos polinômios ortonormais, $a_k(N)$, para $0 \le k \le m-2$, e $b_k(N, m, \xi)$, para $0 \le k \le$

m-1, dados por

$$a_k(N) = \frac{2(k+1)(2k+1)}{(4k+3)N^2} \sqrt{\frac{(4(k+1)^2 - N^2)((2k+1)^2 - N^2)}{(4k+1)(4k+5)}},$$
 (5.65)

$$b_k(N,m,\xi) = \frac{4}{N^2} \left[\frac{k(2k+1)\left(N^2 - 2k(2k+1)\right) - N^2 + 1}{(4k-1)(4k+3)} - m^2\xi \right].$$
 (5.66)

Então, se calcularmos as derivadas com respeito a N, obtemos

$$a'_{k}(N) = \frac{2(k+1)(2k+1)\left((4k(2k+3)+5)N^{2}-8(k+1)^{2}(2k+1)^{2}\right)}{N^{3}(4k+3)\sqrt{(4k+1)(4k+5)\left(4(k+1)^{2}-N^{2}\right)\left((2k+1)^{2}-N^{2}\right)}},$$
(5.67)

$$b'_{k}(N,m,\xi) = \frac{8}{N^{3}} \left[\frac{2k^{2}(2k+1)^{2}-1}{(4k-1)(4k+3)} + m^{2}\xi \right].$$
(5.68)

Nosso objetivo é usar o Teorema de Hellmann-Feynman para mostrar que os zeros de $\bar{R}_m(x;\xi)$ são todos crescentes em relação a N para valores pré-fixados de ξ . Para isto, é suficiente provar que J'_m , cujos elementos são $a'_k(N)$ e $b'_k(N,m,\xi)$ definidos anteriormente, é definida positiva. Observe que com $\xi > 0$ temos $b'_k(N,m,\xi)$ positivo.

Definimos, para $0 \le k \le m - 2$,

$$h_k(N,m,\xi) := \frac{(a'_k(N))^2}{b'_k(N,m,\xi)b'_{k+1}(N,m,\xi)}.$$
(5.69)

De acordo com a Proposição 3.0.6 se

$$h_k(N, m, \xi) \le \begin{cases} 1/2 & \text{se } k = 0, \\ 1/4 & \text{se } k = 1, \dots, m - 2, \end{cases}$$
(5.70)

então J'_m é definida positiva. De fato, provaremos que existe um número real $\bar{\xi} > 0$, de modo que, para $\xi \geq \bar{\xi}$, $h_k(N, n, \xi)$ satisfaz (5.70).

Reescrevemos $h_k(N, n, \xi)$ em uma maneira mais conveniente

$$h_k(N, m, \xi) = \frac{\theta_k \phi_k(N)}{\psi_k(m, \xi)}, \quad 0 \le k \le m - 2,$$

sendo

$$\theta_{k} = \frac{(k+1)^{2}(2k+1)^{2}(4k-1)(4k+7)}{(4k+1)(4k+5)},$$

$$\phi_{k}(N) = \frac{((4k(2k+3)+5)N^{2}-8(k+1)^{2}(2k+1)^{2})^{2}}{(N-2k-1)(N-2k-2)(N+2k+1)(N+2k+2)},$$

$$\psi_{k}(m,\xi) = \left(8k(2k+1)\left(2k^{2}+k+4m^{2}\xi\right)-12m^{2}\xi-1\right)$$

$$\times \left(8k(2k+5)\left(2k^{2}+5k+4m^{2}\xi+6\right)+84m^{2}\xi+71\right).$$
(5.71)

Para $k \ge 1$, definimos o simplexo

$$\Lambda^{e} = \{ (N, m, k) \in \mathbb{Z}^{3} : 1 \le k \le m - 2, \ 2m \le N - 1 \}.$$
(5.72)

Deste modo, precisamos provar que $h_k(N, m, \xi) \leq 1/4$ para $(N, m, k) \in \Lambda^e$, que é equivalente a $h_k(N, m, \xi) \leq 1/4$ para $k = 1, \ldots, m - 2$.

Observe que θ_k , $\phi_k(N)$ e $\psi_k(m,\xi)$ são funções positivas em Λ^e , uma vez que $\xi \ge 0$. Então, para k fixado, se encontrarmos o máximo de cada função $\phi_k(N)$ e $1/\psi_k(m,\xi)$ em Λ^e podemos concluir que o produto $\phi_k(N)/\psi_k(m,\xi)$ é menor que o produto dos respectivos máximos em Λ^e .

Calculando a derivada de $\phi_k(N)$ com relação a N, obtemos

$$\frac{\partial [\phi_k(N)]}{\partial N} = \frac{2(3+4k)^2 N^3 \left(32k^4 + 96k^3 + 104k^2 + 48k + 8 - (8k^2 + 12k + 5)N^2\right)}{(2k-N+1)^2 (2k-N+2)^2 (2k+N+1)^2 (2k+N+2)^2 + 8}.$$

Observe que $N \ge 2m + 1$ e $m \ge k + 2$, logo $N \ge 2k + 5$. Usando que $N \ge 2k + 5$ em $(32k^4 + 96k^3 + 104k^2 + 48k + 8 - (8k^2 + 12k + 5)N^2)$, concluímos que este termo é negativo e, portanto, $\partial [\phi_k(N)]/\partial N < 0$ em Λ^e . Então, $\phi_k(N)$ é função decrescente de N. Desta maneira, para k fixado, temos $\phi_k(N) \le \phi_k(2k + 5)$.

Calculando o operador diferença em m sobre $\psi_k(m,\xi)$ obtemos

$$\Delta_m \left[\psi_k(m,\xi) \right] = 8(4k+3)^2 (2m+1) \left(-13 + 24k + 88k^2 + 96k^3 + 32k^4 \xi + 2\xi(1+2m(m+1))(-7+24k+16k^2) \right).$$

Claramente, vê-se que essa diferença é positiva se $\xi > 0$ e $k \ge 1$. Então, $\psi_k(m,\xi)$ é uma função crescente de m em Λ^e . Deste modo, $1/\psi_k(m,\xi)$ é uma função decrescente de m

e seu máximo é atingido para o menor possível valor de $m \in \Lambda^e$, que em termos de k é m = k + 2.

Observamos no início que $\phi_k(N)$ e $\psi_k(m,\xi)$ são funções positivas em Λ^e . Mostramos que $\phi_k(N) \leq \phi_k(2k+5)$ e $1/\psi_k(m,\xi) \leq 1/\psi_k(k+2,\xi)$ para valores de Λ^e . Logo,

$$\frac{\phi_k(N)}{\psi_k(m,\xi)} \le \frac{\phi_k(2k+5)}{\psi_k(k+2,\xi)}, \quad (N,m,k) \in \Lambda^e.$$

Como $\theta_k > 0$, para $k \ge 1$, segue que

$$h_k(N, m, \xi) = \frac{\theta_k \phi_k(N)}{\psi_k(m, \xi)} \le \frac{\theta_k \phi_k(2k+5)}{\psi_k(k+2, \xi)} = h_k(2k+5, k+2, \xi),$$

para $(N, m, k) \in \Lambda^e$ e $\xi > 0$.

Agora, para encontrarmos $\bar{\xi}$ tal que para $\xi > \bar{\xi}$ tenhamos $h_k(N, n, \xi) < 1/4$, é suficiente que

$$h_k(2k+5,k+2,\xi) \le \frac{1}{4}$$

Calculamos o limite quando k tende a infinito e impomos que esse valor limite seja menor do que 1/4,

$$\lim_{k \to \infty} h_k(2k+5, k+2, \xi) = \frac{49}{192(1+2\xi)^2} \le \frac{1}{4}.$$
(5.73)

Então, temos que $\xi \ge (-12 + 7\sqrt{3})/24 \approx 0.0051815$ satisfaz (5.73).

No entanto, para k = 1,

$$h_1(7,3,\xi) = \frac{877969}{50(756\xi + 71)(2772\xi + 799)}$$

е

$$h_1(7,3,(-12+7\sqrt{3})/24) = 0.288166,$$

que é maior que 1/4. Então, este valor de ξ não é suficiente.

Tomando $\bar{\xi}$ como sendo a solução positiva de $h_1(7,3,\xi) = 1/4$, obtemos $\bar{\xi} = (-7945 + \sqrt{74267554})/41580 \approx 0.0161824$. Assim, temos

$$h_k(2k+5, k+2, \bar{\xi}) = \frac{A(k)}{B(k)},$$

 com

$$\begin{split} A(k) &= 36018675(4k-1)\left(2k^2+3k+1\right)^2\left(112k^3+356k^2+352k+117\right)^2,\\ B(k) &= 8(2k+3)(4k+1)(4k+5)\left[16\left(12845+\sqrt{74267554}\right)k^4+72\left(\sqrt{74267554}-3325\right)k^3+\left(93\sqrt{74267554}-655725\right)k^2+20\left(\sqrt{74267554}-7945\right)k\right.\\ &\quad -3325\right)k^3+\left(93\sqrt{74267554}-655725\right)k^2+20\left(\sqrt{74267554}-7945\right)k\\ &\quad -12\sqrt{74267554}+84945\right]\left[16\left(12845+\sqrt{74267554}\right)k^4\right.\\ &\quad +8\left(104615+13\sqrt{74267554}\right)k^3+35\left(32297+7\sqrt{74267554}\right)k^2\right.\\ &\quad +4\left(139055+61\sqrt{74267554}\right)k+84\sqrt{74267554}+70665\right]. \end{split}$$

Como $\sqrt{74267554} > 8617$, podemos concluir que, se $k \ge 1$, então B(k) > 0. Com isto, podemos dizer que $h_k(2k+5, k+2, \bar{\xi}) \le 1/4$ se, e somente se, $0 \le B(k)-4A(k)$.

Calculando B(k) - 4A(k), obtemos

$$B(k) - 4A(k) = 4(k-1)\sum_{j=0}^{10} e_j(k-1)^j,$$

 com

$$\begin{split} e_{0} &= 102060 \left(3211950 \sqrt{74267554} - 26257733473 \right) \approx 1.45171 \ 10^{14}, \\ e_{1} &= 243 \left(7646141300 \sqrt{74267554} - 62114456799611 \right) \approx 9.18282 \ 10^{14}, \\ e_{2} &= 3240 \left(1419763121 \sqrt{74267554} - 11460908718830 \right) \approx 2.5091 \ 10^{15}, \\ e_{3} &= 90 \left(73111760134 \sqrt{74267554} - 586538705912287 \right) \approx 3.91756 \ 10^{15}, \\ e_{4} &= 60 \left(100700365570 \sqrt{74267554} - 803130232699471 \right) \approx 3.8815 \ 10^{15}, \\ e_{5} &= 3730496855680 \sqrt{74267554} - 29594141315855152 \approx 2.55477 \ 10^{15}, \\ e_{6} &= 64 \left(24554860750 \sqrt{74267554} - 193913713638079 \right) \approx 1.13259 \ 10^{15}, \\ e_{7} &= 2240 \left(199419152 \sqrt{74267554} - 1569404460563 \right) \approx 3.34124 \ 10^{14}, \\ e_{8} &= 1280 \left(64140104 \sqrt{74267554} - 503713530041 \right) \approx 6.27674 \ 10^{13}, \\ e_{9} &= 25600 \left(344512 \sqrt{74267554} - 2704350823 \right) \approx 6.77392 \ 10^{12}, \\ e_{10} &= 4096 \left(102760 \sqrt{74267554} - 807868759 \right) \approx 3.18271 \ 10^{11}. \end{split}$$

Para todo j, temos $e_j > 0$. Logo, $B(k) - 4A(k) \ge 0$ para $k \ge 1$, e consequentemente $h_k(2k+5, k+2, \bar{\xi}) \le 1/4$ para $k \ge 1$. Desta maneira, concluímos que

$$h_k(N, m, \bar{\xi}) \le h_k(2k+5, k+2, \bar{\xi}) \le 1/4, \text{ para } (N, m, k) \in \Lambda^e.$$
 (5.74)

Falta provar para k = 0 que $h_0(N, m, \bar{\xi}) \leq 1/2$. Temos que,

$$h_0(N,m,\xi) = \frac{7(5N^2-8)^2}{5(N^2-1)(N^2-4)(3m^2\xi+1)(21m^2\xi+71)}.$$

Para $N \geq 2$, a função $(5N^2 - 8)^2 / ((N^2 - 1)(N^2 - 4))$ é decrescente em relação ao parâmetro N e, consequentemente, $h_0(N, m, \xi)$ é função decrescente de N. Também podemos observar que $h_0(N, m, \xi)$ é função decrescente de m. Para k = 0os possíveis valores de m são m = 2, ..., (N - 1)/2. Desta forma, o menor possível valor para m é 2 e o menor valor possível para N é 5. Então, o máximo de $h_0(N, m, \xi)$ ocorre para $h_0(5, 2, \xi)$. Neste caso, temos $h_0(5, 2, \overline{\xi}) = 0.279986$. E, consequentemente, $h_0(N, m, \overline{\xi}) \leq 1/2$ para $2 \leq m \leq (N - 1)/2$.

Para concluirmos que os resultados são válidos para $\xi \geq \bar{\xi}$, vamos mostrar que $h_k(N, m, \xi)$ é função decrescente de ξ . Se k = 0 é fácil observar que $h_0(N, m, \xi)$ é função decrescente de ξ . Já se $k \geq 1$, $h_k(N, m, \xi)$ depende de ξ somente no denominador $\psi_k(m, \xi)$. Reescrevemos esse termo como

$$\psi_k(m,\xi) = \left(8k^2(2k+1)^2 - 1\right)\left(8k(2k+5)(k(2k+5)+6) + 71\right) \\ + \left(4k+3\right)^2 m^2 \left((8k(k+1)(2k+1)(2k+3) - 13)8\xi + (4k-1)(4k+7)m^2\xi^2\right)\right)$$

Podemos verificar facilmente que os coeficiente de ξ em $\psi_k(m,\xi)$ são positivos se $k \ge 1$. Então, $\psi_k(m,\xi)$ é função crescente de ξ . Portanto, $h_k(N,m,\xi)$ é função decrescente de ξ .

Finalmemente, provamos que se $\xi \geq \bar{\xi} = (-7945 + \sqrt{74267554})/41580$, então $h_0(N, m, \bar{\xi}) \leq 1/2$ para $2 \leq m \leq (N-1)/2$ e que $h_k(N, m, \xi) \leq 1/4$ para $1 \leq k \leq m-2$ e $m \leq (N-1)/2$. Deste modo, pela Proposição 3.0.6, obtemos que todos os zeros de $\bar{R}_m(x;\xi)$, introduzido em (5.64), são funções monotonicamente crescentes do parâmetro N.

Os zeros de $\overline{R}_m(x;\xi)$ são $g_{2m,k}^2 - 4m^2\xi/N^2$, $1 \le k \le m$, sendo $g_{2m,k}(N)$ os zeros de $G_{2m}(x;N)$.

A relação limite (5.56) implica que

$$\lim_{N \to \infty} G_{2m}(x; N) = \frac{2^{2m}}{\binom{4m}{2m}(4m+1)} P_{2m}(x), \quad 0 \le 2m \le N-1.$$
 (5.75)

e, portanto,

$$g_{2m,k}(N) \to x_{2m,k}, \quad N \to \infty,$$

sendo $x_{2m,k}$ os zeros do polinômio de Legendre de grau 2m.

Provamos que $g_{2m,k}^2 - 4m^2\xi/N^2$ são funções crescentes do parâmetro N. Então, podemos concluir que

$$g_{2m,k}^2 - \frac{4m^2\xi}{N^2} \nearrow x_{2m,k}^2, \quad N \to \infty,$$

o que implica

$$g_{2m,k}^2(N) - \frac{4m^2\xi}{N^2} \le x_{2m,k}^2$$

ou, equivalentemente,

$$g_{2m,k}^2(N) \le x_{2m,k}^2 + \frac{4m^2\xi}{N^2}.$$
 (5.76)

Limitantes inferiores para os zeros - grau par

Para obter os limitantes inferiores para os zeros positivos dos polinômios de Gram, vamos introduzir uma nova família de polinômios

$$\bar{R}_m(x; -\zeta) = R_m\left(x - \frac{\zeta 4m^2}{N^2}\right), \quad 0 \le m \le (N-1)/2,$$

sendo ζ um número real positivo que será fixado depois.

A matriz de Jacobi (3.11) obtida do sistema ortonormal associado aos polinômios $\bar{R}_m(x; -\zeta)$ tem elementos na subdiagonal $a_k(N)$, $0 \le k \le m - 2$, definidos em (5.65), e os seus elementos da diagonal são $b_k(N, m, -\zeta)$, $0 \le k \le m - 1$, definidos em (5.66). As derivadas de cada um desses elementos com respeito a N são $a'_k(N)$ e $b'_k(N, m, -\zeta)$, como em (5.67) e (5.68). Nosso objetivo é provar que a matriz J'_m , cujos elementos são $a'_k(N)$ e $b'_k(N, m, -\zeta)$, é definida negativa. Observe que os elementos da diagonal, $b'_k(N, m, -\zeta)$, são negativos. Desse modo, pela Proposição 3.0.6, se as quantidades $h_k(N, m, -\zeta)$ dadas por

$$h_k(N, m, -\zeta) = \frac{(a'_k(N))^2}{b'_k(N, m, -\zeta)b'_{k+1}(N, m, -\zeta)} \quad \text{para} \quad 0 \le k \le m - 2.$$

satisfazem

$$h_k(N, m, -\zeta) \le \begin{cases} 1/2 & \text{se } k = 0, \\ 1/4 & \text{se } k = 1, \dots, m-2, \end{cases}$$

então, teremos que a matriz J_m^\prime é definida negativa.

Ainda, reescrevemos

$$h_k(N, m, -\zeta) = \frac{\theta_k \phi_k(N)}{\psi_k(m, -\zeta)} \quad \text{para} \quad 0 \le k \le m - 2,$$

com $\theta_k, \phi_k(N) \in \psi_k(m, \xi)$ definidos em (5.71). Para $k \ge 1$ precisamos mostrar que $h_k(N, m, -\zeta) \le 1/4$ em Λ^e , definido por (5.72). Vimos, na seção anterior, que as funções $\theta_k \in \phi_k(N)$ são positivas e que $\phi_k(N)$ é função decresente de $N \in \Lambda^e$.

O operador de diferença anterior sobre $\psi_k(m, -\zeta)$ na variável m é

$$\Delta_m \left[\psi_k(m, -\zeta) \right] = 8(4k+3)^2 (2m+1)\zeta$$

$$\left(13 - 24k - 88k^2 - 96k^3 - 32k^4 + (-7 + 24k + 16k^2)(1 + 2m(m+1))2\zeta \right).$$
(5.77)

Considere os valores extremos m = k+2 e N = 2m+1 = 2k+5. Calculando o valor limite de $h_k(2k+5, k+2, -\zeta)$, quando k tende a infinito, obtemos

$$\lim_{k \to \infty} h_k(2k+5, k+2, -\zeta) = \frac{49}{192(1-2\zeta)^2}.$$

A condição de que esse valor limite deve ser menor que 1/4 para ζ positivo é válida se $\zeta \ge (12 + 7\sqrt{3})/24$. Denotamos

$$\bar{\zeta} := \frac{12 + 7\sqrt{3}}{24} \approx 1.00518.$$

Vamos considerar que $\zeta > 1$ para provar que (5.91) é menor do que 1/4. Reescrevemos (5.91) como

$$\Delta_m \left[\psi_k(m, -\zeta) \right] = 8(4k+3)^2 (2m+1)\zeta \left(13 + (96km^2\zeta - 96k^3) + (96km\zeta - 88k^2) + (64k^2m^2\zeta - 28m^2\zeta - 32k^4) + (64k^2m\zeta - 28m\zeta) + (32k^2\zeta + 48k\zeta - 24k - 14\zeta) \right).$$

Dessa forma, vemos que todos os termos entre parêntesis são positivos para $k \ge 1$, $m \ge k + 2$ e $\zeta > 1$. Então, temos que $\psi_k(m, -\zeta)$ é função crescente de m em Λ^e se $\zeta > 1$. O menor valor possível de m dependendo de k é m = k + 2. Para esse valor temos

$$\psi_k(k+2,-\zeta) = \left(\left(64k^4 + 288k^3 + 372k^2 + 80k - 48 \right) \zeta - 32k^4 - 32k^3 - 8k^2 + 1 \right) \\ \left(\left(64k^4 + 416k^3 + 980k^2 + 976k + 336 \right) \zeta - 32k^4 - 160k^3 - 296k^2 - 240k - 71 \right).$$

Podemos verificar que $\psi_k(k+2,-\zeta) > 0$ e, portanto, $\psi_k(m,-\zeta)$ também é positiva em Λ^e se $\zeta > 1$.

Temos que, $1/\psi_k(m, -\zeta) \in \phi_k(N)$ são positivas para valores de Λ^e , e são funções decrescentes de $m \in N$, respectivamente. Então, o produto $\phi_k(N)/\psi_k(m, -\zeta)$ atinge seu máximo para N = 2k + 5 e m = k + 2. Logo, temos que

$$h_k(N, m, -\zeta) \le h_k(2k+5, k+2, -\zeta)$$

para $\zeta > 1, 1 \le k \le m - 2$ e $2 \le m \le (N - 1)/2$.

Reescrevemos $h_k(2k+5, k+2, -\bar{\zeta}) = A(k)/B(k)$, a desigualdade $A(k)/B(k) \le 1/4$ é equivalente a $B(k) - 4A(k) \ge 0$.

$$B(k) - 4A(k) = \sum_{j=0}^{10} e_j (k-1)^j,$$

com

$$\begin{split} e_0 &= 81(21493141 + 12588100\sqrt{3})), \ e_1 = 6(1624252237 + 951848520\sqrt{3}), \\ e_2 &= 23811114984 + 13961517612\sqrt{3}, \ e_3 = 56(599943635 + 351937781\sqrt{3}), \\ e_4 &= 30422843585 + 17852454424\sqrt{3}, \ e_5 = 18524052130 + 10871513520\sqrt{3}, \\ e_6 &= 160(48108183 + 28230076\sqrt{3}), \ e_7 = 32(67472975 + 39574192\sqrt{3}), \\ e_8 &= 2688(145779 + 85424\sqrt{3}), \ e_9 = 6144(6771 + 3962\sqrt{3}), \\ e_{10} &= 14336(137 + 80\sqrt{3}). \end{split}$$

Todos os coeficientes acima são positivos. Então, B(k) - 4A(k) > 0 para $k \ge 1$ e portanto $h_k(2k+5, k+2, -\bar{\zeta}) \le 1/4$, para $k \ge 1$. Então,

$$h_k(N, m, -\bar{\zeta}) \le h_k(2k+5, k+2, -\bar{\zeta}) \le \frac{1}{4}, \text{ para } k \ge 1.$$

Para concluir que $h_k(N, m, -\zeta) \leq 1/4$ para $\zeta \geq \overline{\zeta}$ sobre o domínio Λ^e , apenas precisamos mostrar que $h_k(N, m, -\zeta)$ decresce com ζ .

A derivada em relação
a ζ de $\psi_k(m,-\zeta)$ é

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \zeta} [\psi_k(m, -\zeta)] &= \\ & 8(4k+3)^2 m^2 \left(13 - 24k - 88k^2 - 96k^3 - 32k^4 + (-28 + 96k + 64k^2)m^2\zeta\right) \\ &\geq 8(4k+3)^2 m^2 \left(13 - 24k - 88k^2 - 96k^3 - 32k^4 + (-28 + 96k + 64k^2)(k+2)^2\right) \\ &= 8(4k+3)^2 m^2 (-99 + 248k + 524k^2 + 256k^3 + 32k^4) \\ &\geq 0. \end{aligned}$$

Então, $h_k(N, m, -\zeta)$ é uma função crescente de $\zeta > 1$ em Λ^e . Portanto, $h_k(N, m, -\zeta) = \theta_k \phi_k(N)/\psi_k(m, -\zeta)$ decresce com $\zeta > 1$. Desse modo, provamos que se $\zeta \ge \overline{\zeta}$ então

$$h_k(N, m, -\zeta) \le 1/4$$
, para $(N, m, k) \in \Lambda^e$.

Ainda resta verificar que $h_0(N, m, -\zeta) \leq 1/2$. Temos,

$$h_0(N,m,-\zeta) = \frac{7(8-5N^2)^2}{5(N^2-4)(N^2-1)(12m^2\zeta+1)(84m^2\zeta+71)},$$

para $2 \le m \le (N-1)/2$. Como $N \ge 5$ então $h_0(N, m, -\zeta)$ é uma função decrescente de $N, m \in \zeta$. Assim, para cada valor fixo de ζ , o máximo ocorre para $m = 2 \in N = 5$. Temos que

$$h_0(5,2,-\bar{\zeta}) = 0.0030171.$$

Logo, $h_0(N, m, -\bar{\zeta}) \le 1/4$ para $N \ge 5$ e $2 \le m \le (N-1)/2$.

Portanto, mostramos que se $\zeta \geq \bar{\zeta} = (12+7\sqrt{3})/24 \approx 1.00518$ então

$$h_k(N, m, -\zeta) \le 1/4,$$

para $k = 0, 1, \dots, m - 2$ e $k + 2 \le m \le (N - 1)/2$.

Pela Proposição 3.0.6 obtemos que os zeros de $\bar{R}_m(x, -\zeta)$ são funções decrescentes de N.

Pela relação limite (5.75) temos que $g_{2m,k}(N) \to x_{2m,k}$ quando $N \to \infty$, sendo $x_{2m,k}$ os zeros dos polinômios de Legendre de grau 2m. Como os zeros de $\bar{R}_m(x,-\zeta)$ são $g_{2m,k}^2 + 4m^2\zeta/N^2$ e são funções decrescentes de N, temos

$$g_{2m,k}^2 + \frac{4m^2\zeta}{N^2} \searrow x_{2m,k}^2, \quad N \to \infty.$$

Logo,

$$g_{2m,k}^2 + \frac{4m^2\zeta}{N^2} \ge x_{2m,k}^2,$$

ou ainda,

$$x_{2m,k}^2 - \frac{4m^2\zeta}{N^2} \le g_{2m,k}^2(N).$$
(5.78)

Se
$$x_{2m,k}^2 - 4m^2 \zeta/N^2 > 0$$
, então
 $\sqrt{x_{2m,k}^2 - \frac{4m^2 \zeta}{N^2}} \le g_{2m,k}(N), \quad k = 1, \dots, m.$

Portanto, para o caso em que n é par, escrevendo os limitantes inferiores (5.78) e superiores (5.76), para os zeros positivos de $G_n(x; N)$, temos a seguinte desigualdade

$$\sqrt{x_{n,k}^2 - \frac{n^2 \zeta}{N^2}} \le g_{n,k}(N) \le \sqrt{x_{n,k}^2 + \frac{n^2 \xi}{N^2}},$$

para $\xi \geq \bar{\xi} \in \zeta \geq \bar{\zeta} \mod \bar{\xi} \in \bar{\zeta}$ dados por (5.59) e (5.58), respectivamente.

5.5.3 Grau ímpar

Para estabelecermos os limitantes dos zeros dos polinômios $G_n(x; N)$, no caso n = 2m + 1, introduzimos

$$\bar{Q}_m(x;\xi) = Q_m\left(x + \frac{(2m+1)^2\xi}{N^2}\right), \quad 0 \le m \le (N-2)/2,$$
 (5.79)

sendo $Q_m(x)$ definido em (5.61) e ξ positivo.

Limitantes superiores para os zeros - grau ímpar

A matriz de Jacobi J_m da forma (3.11) associada a sequência de polinômios $\{\bar{Q}_m(x;\xi)\}$ tem elementos $a_k(N)$, para $0 \le k \le m - 2$, e $b_k(N, m, \xi)$, para $0 \le k \le m - 1$, dados por

$$a_k(N) = \frac{2(k+1)(2k+3)}{(4k+5)N^2} \sqrt{\frac{(4(k+1)^2 - N^2)((2k+3)^2 - N^2)}{(4k+3)(4k+7)}},$$
(5.80)

$$b_k(N,m,\xi) = \frac{1}{N^2} \left[\frac{(4(k+1)(2k+1)-1)N^2 - (8(k+1)^2(2k+1)^2 - 1)}{(4k+1)(4k+5)} - (2m+1)^2 \xi \right]$$
(5.81)

Calculando as derivadas com respeito a N, obtemos

$$a_k'(N) = \frac{2(k+1)(2k+3)\left((23+4k(5+2k))N^2 - 8(k+1)^2(2k+3)^2\right)}{N^3(4k+5)\sqrt{(4k+3)(4k+7)\left(4(k+1)^2 - N^2\right)\left((2k+3)^2 - N^2\right)}},$$
(5.82)

$$b'_{k}(N,m,\xi) = \frac{2}{N^{3}} \left[\frac{8(k+1)^{2}(2k+1)^{2}-1}{(4k+1)(4k+5)} + (2m+1)^{2}\xi \right].$$
(5.83)

Novamente usaremos o teorema de Hellmann-Feynman para mostrar que os zeros de $\bar{Q}_m(x;\xi)$ são todos crescentes em relação a N para valores pré-fixados de ξ . Para isto, vamos mostrar que J'_m , cujos elementos são $a'_k(N)$ e $b'_k(N,m,\xi)$ definidos anteriormente, é definida positiva. Observe que com $\xi > 0$ temos $b'_k(N,m,\xi)$ positivo. Para mostrarmos a positividade da matriz faremos uso da Proposição 3.0.6.

Definimos, para $0 \le k \le m - 2$,

$$h_k(N, m, \xi) := \frac{(a'_k(N))^2}{b'_k(N, m, \xi)b'_{k+1}(N, m, \xi)}.$$
(5.84)

Reescrevemos $h_k(N, n, \xi)$ em uma maneira mais conveniente

$$h_k(N, m, \xi) = \frac{\theta_k \phi_k(N)}{\psi_k(m, \xi)}, \quad 0 \le k \le m - 2,$$

sendo

$$\theta_{k} = \frac{(4k+1)(4k+9)}{4(4k+3)(4k+7)},$$

$$\phi_{k}(N) = \frac{4(k+1)^{2}(2k+3)^{2}\left((13+20k+8k^{2})N^{2}-8(k+1)^{2}(2k+3)^{2}\right)^{2}}{(N-2(k+1))(N+2(k+1))(N-2k-3)(N+2k+3)},$$

$$\psi_{k}(m,\xi) = \left(8k(2k+3)\left(k(2k+3)+\xi(2m+1)^{2}+2\right)+5\xi(2m+1)^{2}+7\right)$$

$$\times \left(8(k+1)(2k+5)\left((k+1)(2k+5)+\xi(2m+1)^{2}+2\right)+5\xi(2m+1)^{2}+7\right)$$

Para $k \ge 1$, definimos o simplexo

$$\Lambda^{o} = \{ (N, m, k) \in \mathbb{Z}^{3} : 1 \le k \le m - 2, \ 2m + 1 \le N - 1 \}.$$
(5.86)

Deste modo, precisamos provar que $h_k(N, m, \xi) \leq 1/4$ para $(N, m, k) \in \Lambda^e$, que é equivalente a $h_k(N, m, \xi) \leq 1/4$ para $k = 1, \ldots, m - 2$ e que $h_0(N, m, \xi) \leq 1/2$.

É fácil ver que θ_k e $\psi_k(m,\xi)$ são funções positivas em Λ^o . Como em Λ^o têm-se $N \ge 2m + 2 \ge 3k + 6$, então (N - 2(k + 1)) e (N - 2k - 3) são positivos e, portanto $\phi_k(N)$ é positivo em Λ^o . Assim, para k fixado, se encontrarmos o máximo de cada função $\phi_k(N)$ e $1/\psi_k(m,\xi)$ em Λ^o podemos concluir que o produto $\phi_k(N)/\psi_k(m,\xi)$ é menor que o produto dos respectivos máximos em Λ^o .

Aplicando o operador de diferença sobre $\phi_k(N)$ com relação a N, obtemos

$$\Delta_N[\phi_k(N)] = -4(k+1)^2(2k+3)^2(4k+5)^2(2N+1)$$

$$\times \frac{(8k^2N^2 + 8k^2N + 4k^2 + 20kN^2 + 20kN + 10k + 13N^2 + 13N + 6)}{(N-2k-1)(N^2 - 4(k+1)^2)(N^2 - (2k-3)^2)(N+2k+4)}$$

No nosso caso, $N \ge 2m + 2$ e $m \ge k + 2$, logo $N \ge 2k + 6$. Logo, o denominador de $\Delta_N[\phi_k(N)]$ é positivo e portanto $\Delta_N[\phi_k(N)]$ é negativo. Então, $\phi_k(N)$ é função decrescente de N. Desta maneira, para k fixado, temos $\phi_k(N) \le \phi_k(2k + 6)$.

O operador diferença na variável m de $\psi_k(m,\xi)$ pode ser escrito por

$$\Delta_m \left[\psi_k(m,\xi) \right] = 16(4k+5)^2(m+1)\xi$$

$$\times \left(35 + 200k + 280k^2 + 160k^3 + 32k^4 + \xi(5+8m+4m^2)(9+40k+16k^2) \right).$$

Claramente, essa diferença é positiva se $\xi > 0$. Então, $\psi_k(m, \xi)$ é uma função crescente de m. Logo, $1/\psi_k(m, \xi)$ é uma função decrescente de m e seu máximo é atingido para o menor possível valor de m em Λ^o , que dependendo de k é m = k + 2.

Mostramos que $\phi_k(N) \leq \phi_k(2k+6)$ e $1/\psi_k(m,\xi) \leq 1/\psi_k(k+2,\xi)$ para valores de Λ^o . Como essas são funções positivas em Λ^o então,

$$\frac{\phi_k(N)}{\psi_k(m,\xi)} \le \frac{\phi_k(2k+6)}{\psi_k(k+2,\xi)}, \quad (N,m,k) \in \Lambda^o.$$

Sendo $\theta_k > 0$, para $k \ge 1$, segue que

$$h_k(N, m, \xi) = \frac{\theta_k \phi_k(N)}{\psi_k(m, \xi)} \le \frac{\theta_k \phi_k(2k+6)}{\psi_k(k+2, \xi)} = h_k(2k+6, k+2, \xi),$$

para $(N, m, k) \in \Lambda^o$ e $\xi > 0$.

Agora, para encontrarmos $\bar{\xi}$ tal que para $\xi \ge \bar{\xi}$ tenhamos $h_k(N, n, \xi) \le 1/4$, é suficiente que

$$h_k(2k+6,k+2,\xi) \le \frac{1}{4}.$$

A primeira condição sobre ξ vem do valor limite quando k tende a infinito ao impormos que esse valor limite seja menor do que 1/4,

$$\lim_{k \to \infty} h_k(2k+6, k+2, \xi) = \frac{49}{192(1+2\xi)^2} \le \frac{1}{4}.$$
(5.87)

Então, temos que $\xi \ge (-12 + 7\sqrt{3})/24 \approx 0.0051815$ satisfaz (5.87). Mas esse valor de ξ não serve para k = 1, pois

$$h_1(8, 3, (-12 + 7\sqrt{3})/24) = 0.274908,$$

que é maior que 1/4. Então, este valor de ξ não é suficiente.

Tomando $\bar{\xi}$ como sendo a solução positiva de $h_1(7,3,\xi) = 1/4$, temos $\bar{\xi} = (-489951 + 8\sqrt{4255370889})/2207205 \approx 0.0144593$. Assim, temos

$$h_k(2k+5, k+2, \bar{\xi}) = \frac{A(k)}{B(k)},$$

com

$$A(k) = 1623917970675(1+k)^2(3+2k)^2(1+4k)(99+198k+131k^2+28k^3)^2,$$

$$\begin{split} B(k) &= 16(k+2)(4k+3)(4k+7) \left[8 \left(16\sqrt{4255370889} + 1227303 \right) k^4 \\ &+ 416 \left(2\sqrt{4255370889} + 4851 \right) k^3 + 45 \left(40\sqrt{4255370889} - 1174481 \right) k^2 \\ &+ 35 \left(40\sqrt{4255370889} - 1692999 \right) k + 250\sqrt{4255370889} - 11448360 \right] \\ &\times \left[8 \left(1227303 + 16\sqrt{4255370889} \right) k^4 + 32 \left(1780317 + 34\sqrt{4255370889} \right) k^3 \\ &+ 5 \left(22804551 + 680\sqrt{4255370889} \right) k^2 + 5 \left(17817723 + 920\sqrt{4255370889} \right) k \\ &+ 2250\sqrt{4255370889} + 20568240 \right] . \end{split}$$

A positividade de A(k) e B(k) é imediata, pois $40\sqrt{4255370889} - 1174481 > 0$, $40\sqrt{4255370889} - 1692999 > 0$ e $250\sqrt{4255370889} - 11448360 > 0$. Logo, podemos dizer que $h_k(2k + 6, k + 2, \bar{\xi}) \le 1/4$ se, e somente se, $B(k) - 4A(k) \ge 0$. Calculando B(k) - 4A(k), obtemos

$$B(k) - 4A(k) = 958402368(k-1)\sum_{j=0}^{10} e_j(k-1)^j$$

 com

$$\begin{split} e_{0} &= -375692880502 + 6110181\sqrt{4255370889} \approx 2.28938\ 10^{10}, \\ e_{1} &= 186356016\left(-8159470043327 + 133135056\sqrt{4255370889}\right) \approx 9.79033\ 10^{19}, \\ e_{2} &= 905520\left(-3146124015323299 + 51496379172\sqrt{4255370889}\right) \approx 1.93011\ 10^{20}, \\ e_{3} &= 258720\left(-12069362018255629 + 198142176792\sqrt{4255370889}\right) \approx 2.21487\ 10^{20}, \\ e_{4} &= 7392\left(-300311405709018307 + 4943486628696\sqrt{4255370889}\right) \approx 1.63866\ 10^{20}, \\ e_{5} &= 924\left(-1158668165273187521 + 19116948953088\sqrt{4255370889}\right) \approx 8.16739\ 10^{19}, \\ e_{6} &= 59136\left(-6003713991367537 + 99232707336\sqrt{4255370889}\right) \approx 2.77675\ 10^{19}, \\ e_{7} &= 18480\left(-4329027135170221 + 71634597888\sqrt{4255370889}\right) \approx 6.35577\ 10^{18}, \\ e_{8} &= 369600\left(-31738321999487 + 525385728\sqrt{4255370889}\right) \approx 9.36667\ 10^{17}, \\ e_{9} &= 59136\left(-17102126228119 + 282949632\sqrt{4255370889}\right) \approx 8.01639\ 10^{16}, \\ e_{10} &= 236544\left(-164682333077 + 2720256\sqrt{4255370889}\right) \approx 3.02035\ 10^{15}. \end{split}$$

Para todo j temos $e_j > 0$. Logo, $B(k) - 4A(k) \ge 0$ para $k \ge 1$ e, consequentemente, $h_k(2k+6, k+2, \bar{\xi}) \le 1/4$ para $k \ge 1$. Desta maneira, concluímos que

$$h_k(N, m, \bar{\xi}) \le h_k(2k+6, k+2, \bar{\xi}) \le 1/4, \text{ para } (N, m, k) \in \Lambda^o.$$
 (5.88)

Falta provar para k = 0 que $h_0(N, m, \bar{\xi}) \leq 1/2$. Temos que,

$$h_0(N,m,\xi) = \frac{27\left(72 - 13N^2\right)^2}{7\left(N^2 - 9\right)\left(N^2 - 4\right)\left(5\xi(2m+1)^2 + 7\right)\left(45\xi(2m+1)^2 + 287\right)}.$$

Como $N \ge 6$, a função $(5N^2 - 8)^2 / ((N^2 - 1)(N^2 - 4))$ é decrescente em relação ao parâmetro N e, consequentemente, $h_0(N, m, \xi)$ é função decrescente de N. Logo, $h_0(N, m, \xi)$ é função decrescente de m. Para k = 0 os possíveis valores de m são $m = 2, \ldots, (N-2)/2$, assim o menor valor possível para m é 2 e o menor valor possível para N é 6. Então, o máximo de $h_0(N, m, \xi)$ ocorre para $h_0(6, 2, \xi)$. Neste caso, temos

$$h_0(6, 2, \xi) = 0.262101$$

consequentemente, $h_0(N, m, \bar{\xi}) \le 1/2$ para $2 \le m \le (N-1)/2$.

Para concluirmos que os resultados são válidos para $\xi \geq \bar{\xi}$, vamos mostrar que $h_k(N, m, \xi)$ é função decrescente de ξ . Se k = 0 é fácil observar que $h_0(N, m, \xi)$ é função decrescente de ξ . Já se $k \geq 1$, $h_k(N, m, \xi)$ depende de ξ somente no denominador $\psi_k(m, \xi)$. Também é facil ver em (5.85) que $\psi_k(m, \xi)$ é função crescente de ξ e, portanto, $h_k(N, m, \xi)$ é função decrescente de ξ .

Finalmemente provamos que se $\xi \geq \bar{\xi} = (-489951 + 8\sqrt{4255370889})/2207205$, então $h_0(N, m, \bar{\xi}) \leq 1/2$ para $2 \leq m \leq (N-2)/2$ e que $h_k(N, m, \xi) \leq 1/4$ para $1 \leq k \leq m-2$ e $m \leq (N-2)/2$. Deste modo, pela Proposição 3.0.6, obtemos que todos os zeros de $\bar{Q}_m(x;\xi)$, introduzido em (5.79), são funções monotonicamente crescentes do parâmetro N.

Os zeros de $\overline{Q}_m(x;\xi)$ são $g_{2m+1,k}(N)^2 - (2m+1)^2\xi/N^2$, $1 \le k \le m$, sendo $g_{2m+1,k}(N)$ os zeros positivos de $G_{2m+1}(x;N)$.

A relação limite (5.56) implica que

$$\lim_{N \to \infty} G_{2m+1}(x;N) = \frac{2^{2m+1}}{\binom{4m+2}{2m+1}(4m+5)} P_{2m+1}(x), \quad 0 \le 2m+1 \le N-1, \tag{5.89}$$

ou seja,

$$g_{2m+1,k}(N) \to x_{2m+1,k}, \quad N \to \infty,$$

sendo $x_{2m+1,k}$ os zeros do polinômio de Legendre de grau 2m + 1.

Provamos que $g_{2m+1,k}^2 - (2m+1)^2 \xi/N^2$ são funções crescentes do parâmetro N. Então, podemos concluir que

$$g_{2m+1,k}^2 - \frac{(2m+1)^2\xi}{N^2} \nearrow x_{2m+1,k}^2, \quad N \to \infty,$$

o que implica

$$g_{2m+1,k}^2(N) - \frac{(2m+1)^2\xi}{N^2} \le x_{2m+1,k}^2$$

ou equivalentemente,

$$g_{2m+1,k}^2(N) \le x_{2m+1,k}^2 + \frac{(2m+1)^2\xi}{N^2}, \quad \xi \ge \bar{\xi}.$$
 (5.90)

Limitantes inferiores para os zeros - grau ímpar

Para obter os limitantes inferiores para os zeros positivos dos polinômios de Gram de grau ímpar, vamos introduzir uma nova família de polinômios

$$\bar{Q}_m(x;-\zeta) = Q_m\left(x - \frac{\zeta(2m+1)^2}{N^2}\right), \quad 0 \le m \le (N-2)/2,$$

sendo ζ um número real positivo que será fixado depois.

Como antes, usaremos a Proposição 3.0.6 para provar que a matriz J'_m é definida negativa. A matriz de Jacobi J'_m , obtida do sistema ortonormal associado aos polinômios $\bar{Q}_m(x; -\zeta)$, tem elementos na subdiagonal $a_k(N)$, $0 \le k \le m - 2$, definidos em (5.80), e os seus elementos da diagonal são $b_k(N, m, -\zeta)$, $0 \le k \le m - 1$, definidos em (5.81). As derivadas de cada um desses elementos com respeito a N são $a'_k(N)$ e $b'_k(N, m, -\zeta)$ como em (5.82) e (5.83).

Sendo J'_m com elementos $a'_k(N)$ e $b'_k(N, m, -\zeta)$ definida negativa então os zeros de $\bar{Q}_m(x; -\zeta)$ decrescem com o aumento do parâmetro N. Observe que as entradas da diagonal, $b'_k(N, m, -\zeta)$, são negativas. Nesta subseção vamos mostrar que

 $h_k(N, m, -\zeta) \le 1/2$ para $k = 0, 1, \dots, m - 2$, sendo

$$h_k(N, m, -\zeta) = \frac{(a'_k(N))^2}{b'_k(N, m, -\zeta)b'_{k+1}(N, m, -\zeta)}$$
 para $0 \le k \le m - 2.$

Reescrevemos $h_k(N, m, -\zeta) = \theta_k \phi_k(N) / \psi_k(m, -\zeta)$, para $0 \le k \le m - 2$, com $\theta_k, \phi_k(N) \in \psi_k(m, \xi)$ definidos em (5.85).

Vimos na subseção anterior que as funções $\theta_k \in \phi_k(N)$ são positivas e que $\phi_k(N)$ é função decrescente de N para $N \ge 2k + 6$.

O operador de diferença na variável m sobre $\psi_k(m, -\zeta)$ nos dá

$$\Delta_m \left[\psi_k(m, -\zeta) \right] = 16(4k+5)^2(m+1)\zeta \left(-35 - 200k - 280k^2 - 160k^3 - 32k^4 \right) + (9 + 40k + 16k^2)(5 + 8m + 4m^2)\zeta \right).$$
(5.91)

Considere $\zeta > 1$, como veremos a seguir essa é uma condição necessária. Assim, para $m \ge k+2$, temos

$$\Delta_m \left[\psi_k(m, -\zeta) \right] \ge 16(4k+5)^2(m+1)\zeta \left(-35 - 200k - 280k^2 - 160k^3 - 32k^4 + (9 + 40k + 16k^2)(5 + 8(k+2) + 4(k+2)^2) \right)$$
$$= 32(4k+5)^2(m+1)\zeta \left(149 + 748k + 654k^2 + 192k^3 + 16k^4 \right)$$
$$\ge 0$$

Logo, $\psi_k(m, -\zeta)$ é crescente em relação a m.

Considere os valores extremos do domínio: m = k+2 e N = 2m+2 = 2k+6. Calculando o valor limite de $h_k(2k+6, k+2, -\zeta)$ quando k tende a infinito obtemos

$$\lim_{k \to \infty} h_k(2k+6, k+2, -\zeta) = \frac{49}{192(1-2\zeta)^2}$$

A condição de que esse valor limite deve ser menor que 1/4 para ζ positivo é válida se $\zeta \ge (12 + 7\sqrt{3})/24 \approx 1.00518$. Chamamos $\overline{\zeta} := (12 + 7\sqrt{3})/24$. Daqui temos que $\zeta > 1$ é uma condição necessária para o que queremos mostrar.

Assim, temos que $1/\psi_k(m, -\zeta)$ e $\phi_k(N)$ são funções positivas para valores de Λ^o e são funções decrescentes de m e N, respectivamente. Logo, o produto $\phi_k(N)/\psi_k(m,-\zeta)$ atinge seu máximo paraN=2k+6em=k+2.Logo,

$$h_k(N, m, -\zeta) \le h_k(2k+6, k+2, -\zeta)$$

para $\zeta>1,\,1\leq k\leq m-2$ e
 $2\leq m\leq (N-2)/2.$

Podemos reescrever $h_k(2k+6, k+2, -\bar{\zeta}) = A(k)/B(k)$, com

$$A(k) = 192(1+k)^2(3+2k)^2(1+4k)(99+198k+131k^2+28k^3)^2$$

е

$$B(k) = (2+k)(3+4k)(7+4k) \left[448\sqrt{3}k^4 + 224\left(12+13\sqrt{3}\right)k^3 + 12\left(692+525\sqrt{3}\right)k^2 + \left(7248+4900\sqrt{3}\right)k + 1332+875\sqrt{3} \right] \left[448\sqrt{3}k^4 + 32\left(36+119\sqrt{3}\right)k^3 + 28\left(228+425\sqrt{3}\right)k^2 + 4\left(2868+4025\sqrt{3}\right)k + 6612+7875\sqrt{3} \right].$$

Com
oB(k)é positivo, a desigualdade $A(k)/B(k) \leq 1/4$ é equivalente
a $B(k)-4A(k) \geq 0.$ Temos que

$$B(k) - 4A(k) = \sum_{j=0}^{10} e_j k^j,$$

com

$$\begin{aligned} e_0 &= 18 \left(65020887 + 37975000 \sqrt{3} \right), \ e_1 = 11501251983 + 6724095000 \sqrt{3}, \\ e_2 &= 240 \left(185442589 + 108530100 \sqrt{3} \right), \ e_3 = 93795297912 + 54950246400 \sqrt{3}, \\ e_4 &= 384 \left(318025503 + 186489380 \sqrt{3} \right), \ e_5 = 48 \left(2168373869 + 1272434520 \sqrt{3} \right), \\ e_6 &= 384 \left(154517557 + 90706056 \sqrt{3} \right), \ e_7 = 768 \left(29270879 + 17180464 \sqrt{3} \right), \\ e_8 &= 9216 \left(590481 + 346304 \sqrt{3} \right), \ e_9 = 98304 \left(7759 + 4543 \sqrt{3} \right), \\ e_{10} &= 344064 \left(137 + 80 \sqrt{3} \right) k. \end{aligned}$$

Todos os coeficientes acima são positivos, então, B(k) - 4A(k) > 0 para $k \ge 0$. Logo, $h_k(2k+5,k+2,-\bar{\zeta}) \le 1/4$, para $k \ge 0$. Então,

$$h_k(N, m, -\bar{\zeta}) \le h_k(2k+5, k+2, -\bar{\zeta}) \le \frac{1}{4}, \text{ para } k = 0, \dots, m-2.$$
Para concluir que $h_k(N, m, -\zeta) \leq 1/4$ para $\zeta \geq \overline{\zeta}$ precisamos mostrar que $h_k(N, m, -\zeta)$ decresce com ζ .

A seguir temos a derivada de $\psi_k(m, -\zeta)$ em relação a ζ , e usando que $m \ge k + 2$ e $\zeta > 1$ mostramos que $\partial \psi_k(m, -\zeta) / \partial \zeta$ é positiva.

$$\frac{\partial}{\partial \zeta} [\psi_k(m, -\zeta)] = 2(4k+5)^2 (2m+1)^2 (-35-200k-280k^2-160k^3-32k^4) + (9+40k+16k^2) (1+2m)^2 \zeta) \geq 2(4k+5)^2 (2m+1)^2 (-35-200k-280k^2-160k^3-32k^4) + (9+40k+16k^2) (1+2(k+2))^2) = 2(4k+5)^2 (2m+1)^2 (190+980k+956k^2+320k^3+32k^4) > 0.$$

Portanto, $h_k(N, m, -\zeta)$ é uma função crescente de $\zeta > 1$. Consequentemente $h_k(N, m, -\zeta) = \theta_k \phi_k(N)/\psi_k(m, -\zeta)$ decresce com $\zeta > 1$. Desse modo, concluimos a prova de que se $\zeta \ge \overline{\zeta} > 1$ então

$$h_k(N, m, -\zeta) \le 1/4$$
, para $k = 0, 1, \dots, m-2, m \le (N-2)2$.

Portanto, concluímos que J'_m é definida negativa e pela Proposição 3.0.6 obtemos a monotonicidade decrescente de todos os zeros de $\bar{Q}_m(x, -\zeta)$. Os zeros de $\bar{Q}_m(x, -\zeta)$ são $g^2_{2m+1,k}(N) + (2m+1)^2 \zeta/N^2$. Como os zeros são monotonicamente decrescentes então da relação limite (5.89)

$$g_{2m+1,k}^2(N) + \frac{(2m+1)^2\zeta}{N^2} \searrow x_{2m+1,k}^2, \quad N \to \infty.$$

Logo,

$$x_{2m+1,k}^2 - \frac{(2m+1)^2 \zeta}{N^2} \le g_{2m+1,k}^2(N).$$
(5.92)

Se
$$x_{2m+1,k}^2 - (2m+1)^2 \zeta/N^2 > 0$$
, então
 $\sqrt{x_{2m+1,k}^2 - \frac{(2m+1)^2 \zeta}{N^2}} \le g_{2m+1,k}(N), \quad k = 0, \dots, m.$

Portanto, para o caso em que n é ímpar, os limitantes inferiores (5.92) e superiores (5.90) para os zeros positivos de $G_n(x; N)$ implicam que

$$\sqrt{x_{n,k}^2 - \frac{n^2 \zeta}{N^2}} \le g_{n,k}(N) \le \sqrt{x_{n,k}^2 + \frac{n^2 \xi}{N^2}},$$

para $\xi \geq \overline{\xi} \in \zeta \geq \overline{\zeta} \mod \overline{\xi} \in \overline{\zeta}$ dados por (5.59) e (5.58), respectivamente.

Observação: Para os zeros extremos dos polinômios de Gram são válidos os limitantes de Hahn, dados no Teorema 5.4.2. Temos que, $q_{n,1}(0,0,N)$ é zero do polinômios de Hahn $Q_n(x;0,0,N)$ que satisfaz a seguinte relação de ortogonalidade

$$\sum_{k=0}^{N} Q_n(k;0,0,N) Q_m(k;0,0,N) = \rho_n(N) \,\delta_{n,m},$$

enquanto, $g_{n,1}(N)$ é zero do polinômios de Gram $\{G_n(x;N)\}$ que satisfaz

$$\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}G_n(x_j(N);N)G_m(x_j(N);N) = \varphi_n(N)\,\delta_{n,m},$$

onde $x_j(N)=-1+(2j-1)/N.$ Daí, temos que

$$\sum_{k=0}^{N-1} Q_n(k;0,0,N-1)Q_m(k;0,0,N-1) = \rho_n(N-1)\,\delta_{n,m}$$

Fazendo a mudança de variável k = j - 1, temos

$$\sum_{j=1}^{N} Q_n(j-1;0,0,N-1)Q_m(j-1;0,0,N-1) = \rho_n(N-1)\,\delta_{n,m}$$

Então, $Q_n(j-1;0,0,N-1)$ e $G_n(x_j(N);N)$ são ortogonais com relação ao mesmo produto interno e, portanto, pelo Teorema 2.5 existe uma constante c_n tal que $Q_n(j-1;0,0,N-1) = c_n G_n(x_j(N);N)$. Como $q_{n,1}(0,0,N-1) + 1$ é zero dessa equação, temos que

$$g_{n,1}(N) = -1 + \frac{2(q_{n,1}(0,0,N-1)+1)-1}{N}$$

ou, de outra forma,

$$q_{n,1}(0,0,N-1) = -1 + \frac{N(g_{n,1}(N)+1)+1}{2}.$$

Substituindo em (5.43) para N = N - 1 obtemos

$$g_{n,1}(N) \le x_{n,1}.$$

Essa expressão é equivalente a $-g_{n,1}(N) \ge -x_{n,1}$ e, portanto, pela simetria

$$g_{n,n}(N) \ge x_{n,n}.$$

5.5.4 Resultados Numéricos

No Teorema 5.5.1 os limitantes dos zeros de Gram são dados em termos dos zeros $x_{n,k}$ do polinômio de Legendre. Usamos para os zeros de Legendre duas aproximações de $x_{n,k}$. Uma delas é o calculo dos zeros de Legendre através do comando NSolve do programa Mathematica. O outro, um valor numérico que é dado pelos limitantes de Markov e Stieltjes [40] para os zeros de Legendre,

$$\cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) < x_{n,k} < \cos\left(\frac{(k-1/2)\pi}{n}\right), \quad 1 \le k \le n.$$

Corolário 5.5.1. Para $n, N \in \mathbb{N}$, n < N, os zeros positivos de $G_n(x; N)$ são limitados por

$$\sqrt{\cos^2\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) - \frac{n^2\bar{\zeta}}{N^2}} < g_{n,k}(N) < \sqrt{\cos^2\left(\frac{(k-1/2)\pi}{n}\right) + \frac{n^2\bar{\xi}(n)}{N^2}}, \quad 1 \le k \le \lfloor n/2 \rfloor,$$

onde $\bar{\zeta} e \bar{\xi}(N)$ são definidos por (5.58) e (5.59).

Definimos, com o valor numérico obtido pelo NSolvedo Mathematica para $x_{n,k},$

$$\lambda_{n,k}(N) := \begin{cases} \sqrt{x_{n,k}^2 - \frac{n^2 \bar{\zeta}}{N^2}} & \text{se } x_{n,k}^2 > \frac{n^2 \bar{\zeta}}{N^2}, \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

$$\tau_{n,k}(N) := \sqrt{x_{n,k}^2 + \frac{n^2 \bar{\xi}(n)}{N^2}}.$$

Com valores explícitos, definimos

$$\hat{\lambda}_{n,k}(N) := \begin{cases} \sqrt{\cos^2\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) - \frac{n^2\bar{\zeta}}{N^2}} & \text{se } \cos^2\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) > \frac{n^2\bar{\zeta}}{N^2}, \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases}$$
$$\hat{\tau}_{n,k}(N) := \sqrt{\cos^2\left(\frac{(k-1/2)\pi}{n}\right) + \frac{n^2\bar{\xi}(n)}{N^2}}.$$

Desse modo,

$$\hat{\lambda}_{n,k}(N) < \lambda_{n,k}(N) \le g_{n,k}(N) \le \tau_{n,k}(N) < \hat{\tau}_{n,k}(N), \quad k = 1, \dots, \lfloor n/2 \rfloor.$$

Naturalmente, aproximações para os zeros $g_{n,k}(N)$, $k = 1, \ldots, \lfloor n/2 \rfloor$, são dadas por

$$\bar{g}_{n,k}(N) := \frac{\lambda_{n,k}(N) + \tau_{n,k}(N)}{2},$$
(5.93)

$$\hat{g}_{n,k}(N) := \frac{\hat{\lambda}_{n,k}(N) + \hat{\tau}_{n,k}(N)}{2}.$$
(5.94)

Os polinômios de Legendre $P_n(x)$ são os polinômios de Jacobi para $\alpha = \beta = 0$. Assim, para o zero extremo $g_{n,1}(N)$ podemos usar limitantes para $x_{n,1}$ dados no Capítulo 4, para os zeros dos polinômios de Jacobi com $\alpha = \beta = 0$. Para $\alpha = \beta = 0$, os limitantes da Proposição 4.3.1 são melhores do que os da Proposição 4.3.2. Além disso, os limitantes da Proposição 4.3.1 [11, Teor. 1] são melhores para o zero extremo que os limitantes de Markov e Stieltjes [40] dados no início desta subseção. Portanto, é recomendável usar o limitante da Proposição 4.3.1 com $\alpha = \beta = 0$ para $x_{n,1}$. Assim obtemos o melhor limitante para $g_{n,1}(N)$.

Corolário 5.5.2. Para $n, N \in \mathbb{N}$, n < N, o maior zero de $G_n(x; N)$ é limitado por

$$g_{n,1}(N) \le \frac{(n-1)\sqrt{n+2}}{\sqrt{n(n^2+2)}}.$$

As tabelas a seguir mostram os valores das aproximações $\bar{g}_{n,k}(N)$ e $\hat{g}_{n,k}(N)$ em comparação com $g_{n,k}(N)$ calculado pelo comando NSolve do Mathematica, para $k = 1, \ldots, \lfloor n/2 \rfloor$. A primeira tabela, Tabela 5.11, é para n = 6 e a segunda, Tabela 5.12, para n = 7, exemplificando um caso de grau par e um caso de grau ímpar.

Tabela 5.11: Valores numéricos para n = 6 e valores de N iguais a 10^2 , 10^3 e 10^4 para $g_{6,1}(N)$, $g_{6,2}(N)$ e $g_{6,3}(N)$ obtidos pelo NSolve do Mathematica, $\bar{g}_{6,1}(N)$, $\bar{g}_{6,2}(N)$ e $\bar{g}_{6,3}(N)$ definidos em (5.93), e $\hat{g}_{6,1}(N)$, $\hat{g}_{6,2}(N)$ e $\hat{g}_{6,3}(N)$ definidos em (5.94).

| n = 6 | $g_{6,1}(N)$ | $\bar{g}_{6,1}(N)$ | $\hat{g}_{6,1}(N)$ | $g_{6,2}(N)$ | $\bar{g}_{6,2}(N)$ | $\hat{g}_{6,2}(N)$ |
|--------------|--------------|--------------------|--------------------|--------------|--------------------|--------------------|
| $N = 10^{2}$ | 0.932055 | 0.933423 | 0.934367 | 0.660785 | 0.662553 | 0.666552 |
| $N = 10^{3}$ | 0.932465 | 0.932479 | 0.933457 | 0.661205 | 0.661223 | 0.665311 |
| $N = 10^{4}$ | 0.932469 | 0.93247 | 0.933447 | 0.661209 | 0.661209 | 0.665298 |

| n = 6 | $g_{6,3}(N)$ | $\bar{g}_{6,3}(N)$ | $\hat{g}_{6,3}(N)$ |
|--------------|--------------|--------------------|--------------------|
| $N = 10^{2}$ | 0.23846 | 0.244054 | 0.242291 |
| $N = 10^{3}$ | 0.238618 | 0.240704 | 0.238656 |
| $N = 10^{4}$ | 0.238619 | 0.24067 | 0.23862 |

Tabela 5.12: Valores numéricos para n = 7 e valores de N iguais a 10^2 , 10^3 e 10^4 para $g_{7,1}(N)$, $g_{7,2}(N)$ e $g_{7,3}(N)$ obtidos pelo NSolve do Mathematica, $\bar{g}_{7,1}(N)$, $\bar{g}_{7,2}(N)$ e $\bar{g}_{7,3}(N)$ definidos em (5.93), e $\hat{g}_{7,1}(N)$, $\hat{g}_{7,2}(N)$ e $\hat{g}_{7,3}(N)$ definidos em (5.94).

| n = 7 | $g_{7,1}(N)$ | $\bar{g}_{7,1}(N)$ | $\hat{g}_{7,1}(N)$ | $g_{7,2}(N)$ | $\bar{g}_{7,2}(N)$ | $\hat{g}_{7,2}(N)$ |
|--------------|--------------|--------------------|--------------------|--------------|--------------------|--------------------|
| $N = 10^{2}$ | 0.948542 | 0.950383 | 0.950644 | 0.740893 | 0.743161 | 0.746013 |
| $N = 10^{3}$ | 0.949102 | 0.949121 | 0.949416 | 0.741525 | 0.741548 | 0.744485 |
| $N = 10^{4}$ | 0.949108 | 0.949108 | 0.949404 | 0.741531 | 0.741531 | 0.744469 |

| n = 7 | $g_{7,3}(N)$ | $\bar{g}_{7,3}(N)$ | $\hat{g}_{7,3}(N)$ |
|--------------|--------------|--------------------|--------------------|
| $N = 10^{2}$ | 0.405482 | 0.408808 | 0.411051 |
| $N = 10^{3}$ | 0.405842 | 0.405875 | 0.408311 |
| $N = 10^4$ | 0.405845 | 0.405845 | 0.408284 |

Aproximação com Weiertrass–Dochev

O método de Weiertrass-Dochev [20] é uma generalização do clássico método de Newton que encontra sucessivas aproximações para a solução numérica de uma equação. No método de Weiertrass-Dochev são obtidas aproximações simultâneas para todos as raízes da equação polinomial p(x) = 0. Sejam p(x) um polinômio de grau exatamente n com somente zeros reais e simples, e $x_1^{[0]}, x_2^{[0]}, \ldots, x_n^{[0]}$ aproximações iniciais para os zeros de p(x). As iterações do método de Weiertrass-Dochev são

$$x_i^{[k+1]} = x_i^{[k]} - \frac{p(x_i^{[k]})}{\prod_{j \neq i; \ j=1}^n (x_i^{[k]} - x_j^{[k]})}, \quad 1 \le i \le n.$$

Assim como o método de Newton, esse método é surpreendemente rápido e tem convergência quadrática quando as aproximações iniciais $x_1^{[0]}, x_2^{[0]}, \ldots, x_n^{[0]}$ são escolhidas suficientemente próximas dos zeros do polinômio.

Vamos aplicar o método Weiertrass–Dochev para calcular aproximadamente os zeros de Gram, começando com aproximações iniciais $x_i^{[0]} = \hat{g}_{n,i}(N)$, $i = 1, \ldots, n$, dadas por (5.94). A seguir os exemplos mostram a convergência extremamente rápida do método com as aproximações iniciais dadas por (5.94). As Tabelas 4.13, 4.14 e 4.15 são para n = 6, e para valores de N iguais a 100, 1000 e 10000, respectivamente. As Tabelas 4.16 a 4.18 são para n = 7, e para valores de N iguais a 100, 1000 e 10000, respectivamente. As iterações $x_i^{[k]}$ são denotadas por $g_{n,i}^{[k]}$, a iteração k = 0é aproximação inicial (5.94) e a última linha é o resultado fornecido pelo comando NSolve do Mathematica. Para n = 6:

Tabela 5.13: Valores obtidos das iterações do método de Weiertrass-Dochev com aproximações iniciais dadas por (5.94) para n = 6 e N = 100.

| N = 100 | $g_{6,1}^{[k]}$ | $g_{6,2}^{\left[k ight]}$ | $g_{6,3}^{[k]}$ |
|---------|-------------------|---------------------------|-------------------|
| k = 0 | 0.932457202660298 | 0.663864527910045 | 0.236583605571505 |
| k = 1 | 0.932051842875678 | 0.660804855389201 | 0.238446163838231 |
| k = 2 | 0.932055135836924 | 0.660785236118164 | 0.238460413516291 |
| k = 3 | 0.932055135661062 | 0.660785235754572 | 0.238460413955620 |
| NSolve | 0.932055135661062 | 0.660785235754572 | 0.238460413955620 |

Tabela 5.14: Valores obtidos das iterações do método de Weiertrass-Dochev com aproximações iniciais dadas por (5.94) para n = 6 e $N = 10^3$.

| $N = 10^{3}$ | $g_{6,1}^{\left[k ight]}$ | $g_{6,2}^{[k]}$ | $g_{6,3}^{[k]}$ |
|--------------|---------------------------|-------------------|-------------------|
| k = 0 | 0.933437456757200 | 0.665283987479344 | 0.240629889610843 |
| k = 1 | 0.932452446359221 | 0.661224707115645 | 0.238658602778397 |
| k = 2 | 0.932465369883510 | 0.661205147763754 | 0.238617605168569 |
| k = 3 | 0.932465368709498 | 0.661205149571438 | 0.238617600073727 |
| NSolve | 0.932465368709498 | 0.661205149571437 | 0.238617600073726 |

| $N = 10^{4}$ | $g_{6,1}^{\left[k ight]}$ | $g_{6,2}^{\left[k ight]}$ | $g_{6,3}^{\left[k\right]}$ |
|--------------|---------------------------|---------------------------|----------------------------|
| k = 0 | 0.933447248193466 | 0.665298148485551 | 0.240669588603807 |
| k = 1 | 0.932456425110886 | 0.661228887349223 | 0.238661204960178 |
| k = 2 | 0.932469473941657 | 0.661209342255324 | 0.238619175523009 |
| k = 3 | 0.932469472748045 | 0.661209344097777 | 0.238619170223273 |
| NSolve | 0.932469472748044 | 0.661209344097777 | 0.238619170223273 |

Tabela 5.15: Valores obtidos das iterações do método de Weiertrass-Dochev com aproximações iniciais dadas por (5.94) para n = 6 e $N = 10^4$.

Para n = 7:

Tabela 5.16: Valores obtidos das iterações do método de Weiertrass-Dochev com aproximações iniciais dadas por (5.94) para n = 7 e N = 100.

| N = 100 | $g_{7,1}^{\left[k ight]}$ | $g_{7,2}^{\left[k ight]}$ | $g_{7,3}^{[k]}$ |
|---------|---------------------------|---------------------------|--------------------|
| k = 0 | 0.948087161141271 | 0.742746088644889 | 0.405079220337495 |
| k = 1 | 0.948545084521868 | 0.740892283577320 | 0.405479819844630 |
| k = 2 | 0.948541579993011 | 0.740893003285957 | 0.405482008840218 |
| k = 3 | 0.948541579967423 | 0.740893003302570 | 0.405482008848030 |
| NSolve | 0.948541579967422 | 0.740893003302570 | 0.4054820088480296 |

| $N = 10^{3}$ | $g_{7,1}^{[k]}$ | $g_{7,2}^{\left[k ight]}$ | $g_{7,3}^{[k]}$ |
|--------------|-------------------|---------------------------|-------------------|
| k = 0 | 0.949390575828411 | 0.744451944070698 | 0.408251814613577 |
| k = 1 | 0.949097895305717 | 0.741520406749959 | 0.405877383619233 |
| k = 2 | 0.949102243553455 | 0.741524814113572 | 0.405841525965735 |
| k = 3 | 0.949102243452530 | 0.741524813663749 | 0.405841525392336 |
| NSolve | 0.949102243452529 | 0.741524813663749 | 0.405841525392336 |

Tabela 5.17: Valores obtidos das iterações do método de Weiertrass-Dochev com aproximações iniciais dadas por (5.94) para n = 7 e $N = 10^3$.

Tabela 5.18: Valores obtidos das iterações do método de Weiertrass-Dochev com aproximações iniciais dadas por (5.94) para n = 7 e $N = 10^4$.

| $N = 10^{4}$ | $g_{7,1}^{[k]}$ | $g_{7,2}^{[k]}$ | $g_{7,3}^{[k]}$ |
|--------------|-------------------|-------------------|-------------------|
| k = 0 | 0.949403590883278 | 0.744468959953969 | 0.408283268056839 |
| k = 1 | 0.949103374103854 | 0.741526667278371 | 0.405881615715883 |
| k = 2 | 0.949107855759907 | 0.741531122345104 | 0.405845115711374 |
| k = 3 | 0.949107855653300 | 0.741531121881026 | 0.405845115118089 |
| NSolve | 0.949107855653300 | 0.741531121881026 | 0.405845115118089 |

Aplicação para quadratura de somas

De acordo com o Teorema 2.2.4, dada uma soma

$$S_N(f) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f(x_k(N)),$$

onde $x_k(N) = -1 + (2k - 1)/2$, pode-se aproximá-la pela fórmula de quadratura de Gauss de n pontos

$$Q_n(f;N) = \sum_{i=1}^n A_i f(g_{n,i}(N)), \qquad (5.95)$$

em que $g_{n,i}(N)$ são os zeros de $G_n(x; N)$, mônicos, definido em (5.54) e A_i dado pelo Corolário 2.2.1,

$$A_{i} = \frac{\rho_{n-1}}{G'_{n}(g_{n,i}(N); N) G_{n-1}(g_{n,i}(N); N)}, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

em que

$$\rho_{n-1} = \frac{4^{n-1}(N+1)_n(N-n+1)_{n-1}}{(2n-1)\binom{2n-2}{n-1}^2 N^{2n-2}}$$

Ao aplicarmos a fórmula podemos usar diferentes aproximações para os zeros $g_{n,j}(N)$. Temos as seguintes possibilidades:

$$Q_{n}(f;N) = \sum_{i=1}^{n} A_{i} f(g_{n,i}(N)),$$

$$\bar{Q}_{n}(f;N) = \sum_{i=1}^{n} \bar{A}_{i} f(\bar{g}_{n,i}(N)),$$

$$\hat{Q}_{n}(f;N) = \sum_{i=1}^{n} \hat{A}_{i} f(\hat{g}_{n,i}(N)),$$

(5.96)

onde $g_{n,i}(N)$ é calculado pelo comando NSolve do Mathematica, ou equivalentemente, pelo método de Weiertrass–Dochev, e A_i com esse $g_{n,i}(N)$, \bar{A}_i e \hat{A}_i são calculados respectivamente com as aproximações $\bar{g}_{n,i}(N)$ e $\hat{g}_{n,i}(N)$ definidos em (5.93) e (5.94).

Exemplo 1: Em [35, Capítulo 4], fórmulas de quadratura de Gauss são usadas para o cálculo de somas da forma

$$S_N = \sum_{k=1}^N \sqrt{k+\ell},\tag{5.97}$$

para $\ell > 0$ e diferentes valores de N. Tais somas, obviamente não são convergentes.

Escolhemos $\ell = 10$ e N = 1000 para o nosso exemplo. Calculando a somas com N = 1000 termos obtemos $S_N \approx 21392.083$

Para aplicarmos a fórmula de quadratura de Gauss, observamos que

$$\sum_{k=1}^{N} \sqrt{k+\ell} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} f(x_k(N)),$$

para $f(x) = N\sqrt{((x+1)N+1)/2 + \ell}$ e $x_k(N) = -1 + (2k-1)/2$. As aproximações (5.96), para N = 1000 e $\ell = 10$ são mostradas na tabela abaixo.

| | $Q_n(N)$ | $\bar{Q}_n(N)$ | $\hat{Q}_n(N)$ |
|--------|-----------|----------------|----------------|
| n = 1 | 22594.247 | 22594.247 | 22594.247 |
| n = 5 | 21401.465 | 21401.466 | 21400.770 |
| n = 10 | 21392.439 | 21392.443 | 21392.530 |
| n = 12 | 21392.199 | 21392.199 | 21392.246 |

Tabela 5.19: Resultados das fórmulas de quadratura (5.96) para a soma $S_N(f)$, com N = 1000 e $\ell = 10$.

Exemplo 2: Considere a série dada em [1] e que é analisada em [34],

$$S(a) := \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{1}{a^2 + k^2} = \frac{\pi}{a} \coth(\pi a), \quad a > 0.$$
 (5.98)

Para a fixo e $N \in \mathbb{N}$, as somas parcias são

$$\sum_{k=-N}^{N} \frac{1}{a^2 + k^2} = \frac{1}{a^2} + 2\sum_{k=1}^{N} \frac{1}{a^2 + k^2}$$

Temos que,

$$S_N(f) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f(x_k(N)) = \sum_{k=1}^N \frac{1}{a^2 + k^2}$$

para $f(x) = N/(a^2 + ((x+1)N+1)^2/4)$ e $x_k(N) = -1 + (2k-1)/2$, de modo que as somas parciais podem ser escritas como $1/a^2 + 2S_N(f)$.

Para $a = 1000, S(a) = \pi 10^{-3} \approx 3.14159 \, 10^{-3}$. A soma de $N = 10^4$ termos nos fornece $1/a^2 + 2S_N = 2.9422765 \, 10^{-3}$ e a soma de $N = 10^5$ termos fornece $1/a^2 + 2S_N = 3.12159 \, 10^{-3}$. Podemos observar que essa soma tem convergência lenta. A tabela abaixo mostra os resultados com as fórmulas de quadratura $Q_n(f, N), \bar{Q}_n(f; N)$ e $\hat{Q}_n(f; N)$.

| $N = 10^{4}$ | $1/a^2 + 2Q_n(f;N)$ | $1/a^2 + 2\bar{Q}_n(f;N)$ | $1/a^2 + 2\hat{Q}_n(f;N)$ |
|--------------|-----------------------|---------------------------|---------------------------|
| n = 1 | $0.7700829 \ 10^{-3}$ | $0.7700829 \ 10^{-3}$ | $0.7700829 \ 10^{-3}$ |
| n = 5 | $3.0226964 \ 10^{-3}$ | $3.0227008 \ 10^{-3}$ | $2.8748821 \ 10^{-3}$ |
| n = 10 | $2.9420742 \ 10^{-3}$ | $2.9421266 \ 10^{-3}$ | $2.9406507 \ 10^{-3}$ |
| n = 12 | $2.9424099 \ 10^{-3}$ | $2.9425075 \ 10^{-3}$ | $2.9652484 \ 10^{-3}$ |

| Tabela 5.20: Resultados das fórr | ulas de quadratura pai | ara $S_N(f), N = 10^4$ | a = 1000 |
|----------------------------------|------------------------|------------------------|----------|
|----------------------------------|------------------------|------------------------|----------|

Estes exemplos nos mostram a importância dos limitantes fornecidos no Corolário 5.5.1, pois usados como aproximação inicial no método de Weiertrass–Dochev eles nos fornecem valores numéricos extremamente precisos para os zeros de Gram. O uso das fórmulas de quadratura de Gauss com os nós sendo esses valores aproximados dos zeros dos polinômios de Gram, nos permitem o cálculo aproximado de somas com muitos termos, com apenas poucos termos e com uma boa precisão. A grande vantagem desses métodos é o baixo custo computacional, em oposição aos métodos diretos de obtenção de zeros de polinômios e de cálculo de somas de muitos termos.

Capítulo 6

Conclusão e projetos

Os resultados para os zeros dos polinômios de Charlier, Meixner, Kravchuck, Hahn e mais especificamente de Gram, fornecidos nessa tese, contribuem na teoria de polinômios ortogonais de variável discreta, em uma área até então pouco explorada e, além disso, os resultados fornecem limitantes muito precisos que podem ser usados em aplicações da física, engenharia etc.

Os zeros dos polinômios de Gram, como dito na introdução e na última seção, tem participação importante em fórmulas de quadratura para somas. Vimos que o nosso resultado fornece uma aproximação inicial que usada no método de Weiertrass–Dochev, por exemplo, calcula os zeros de Gram com uma precisão extremamente grande, com diferença menor do que 10^{-8} entre a segunda iteração e o valor obtido pelo cálculo direto dos zeros do polinômio (NSolve), e entre a terceira iteração e o valor obtido pelo cálculo direto dos zeros do polinômio (NSolve) diferença menor do que 10^{-14} .

Tendo calculado os zeros de Gram com essa precisão, pretendemos explorar mais as fórmulas de quadratura para somas, com o objetivo de fornecer o cálculo aproximado de somas com uma grande quantidade de termos de modo mais rápido. Como parte desse projeto, também aplicaremos a quadratura de Gauss para somas na resolução do método dos mínimos quadrados, esperando obter um método que seja ainda mais rápido. Além disso, queremos estudar teoricamente a convergência e estimar numericamente os erros cometidos em tais processos.

De modo mais sistemático, nossos objetivos são:

- Provar rigorosamente a convergência do método de Weiertrasss-Dochev com a aproximação inicial que fornecemos, dada por (5.94), que é a média dos limitantes inferiores e superiores explícitos de cada zero dos polinômios de Gram;
- 2. Estimar o erro dos valores obtidos pelas iteracões de Weiertrasss–Dochev com a aproximação inicial que fornecemos, para os zeros dos polinômios de Gram;
- 3. Construir as fórmulas de quadratura de Gauss para o cálculo aproximado de somas, com os nós obtidos pelo método de Weiertrass–Dochev;
- Aplicar as fórmulas construídas para o problema de ajuste de curvas pelo método de mínimos quadrados;
- 5. Comparar o método proposto com os métodos mais utilizados computacionalmente para a obtenção da solução do problema de mínimos quadrados.

Ainda, depois de realizado esse projeto em relação aos zeros dos polinômios de Gram, queremos executar o mesmo para as outras famílias de polinômios ortogonais clássicas de variável discreta. Deste modo, forneceremos fórmulas de aproximação de séries com os pesos relativos às famílias dos polinômios de Charlier e Meixner, e fórmulas de aproximação de somas com os pesos relativos às famílias dos polinômios de Kravchuck e Hahn.

Referências Bibliográficas

- ABRAMOWITZ, M., AND STEGUN, I. A. Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables. Washington: U.S. Department of Commerce. XIV, 1046 p. (1964); Table Errata Math. Comput. 21, 747, 1964.
- [2] ANDREWS, G. E., ASKEY, R., AND ROY, R. Special functions, vol. 71 of Encyclopedia of Mathematics and its Applications. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [3] AREA, I., DIMITROV, D. K., GODOY, E., AND PASCHOA, V. G. Zeros of classical orthogonal polynomials of a discrete variable. *Math. Comp.*. (aceito).
- [4] AREA, I., DIMITROV, D. K., GODOY, E., AND RONVEAUX, A. Zeros of Gegenbauer and Hermite polynomials and connection coefficients. *Math. Comp.* 73, 248 (2004), 1937–1951.
- [5] BJÖRCK, Å., AND DAHLQUIST, G. Numerical methods. Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1974. Translated from the Swedish by Ned Anderson, Prentice-Hall Series in Automatic Computation.
- [6] CHEBYSHEV, P. L. Sur l'interpolation des valeurs équidistantes. Proc. Acad. Sci. St. Pétersbourg, reprinted in Oeuvres de P.L. Tchebychef, 2, 219-242. 25, 5 (1875), 219-242.
- [7] CHIHARA, L., AND STANTON, D. Zeros of generalized krawtchouk polynomials.
 J. Approx. Theory 60, 1 (1990), 43 57.

- [8] CHIHARA, T. S. An introduction to orthogonal polynomials. Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1978. Mathematics and its Applications, Vol. 13.
- [9] DIMITROV, D. K. On a conjecture concerning monotonicity of zeros of ultraspherical polynomials. J. Approx. Theory 85, 1 (1996), 88–97.
- [10] DIMITROV, D. K. Electrostatic interpretation and bounds for the extreme zeros of classical orthogonal polynomials. *Bull. Greek Math. Soc.* 40 (1998), 43–48.
- [11] DIMITROV, D. K., AND NIKOLOV, G. P. Sharp bounds for the extreme zeros of classical orthogonal polynomials. J. Approx. Theory 162, 10 (2010), 1793–1804.
- [12] DIMITROV, D. K., AND RAFAELI, F. R. Monotonicity of zeros of Laguerre polynomials. J. Comput. Appl. Math. 233, 3 (2009), 699–702.
- [13] DIMITROV, D. K., AND VAN ASSCHE, W. Lamé differential equations and electrostatics. Proc. Amer. Math. Soc. 128, 12 (2000), 3621–3628.
- [14] ERDÉLYI, A., MAGNUS, W., OBERHETTINGER, F., AND TRICOMI, F. G. Higher transcendental functions. Vol. II. Robert E. Krieger Publishing Co. Inc., Melbourne, Fla., 1981. Based on notes left by Harry Bateman, Reprint of the 1953 original.
- [15] FAVARD, J. Sur les polynomes de Tchebicheff. C. R. 200 (1935), 2052–2053.
- [16] FEYNMAN, R. P. Forces in molecules. *Physical Review* 56, 4 (08 1939), 340–343.
- [17] GAUSS, C. F. Methodus nova integralium valores per approximationem inveniendi. Comment. Soc. Reg. Scient. Gotting. Recent. (1814).
- [18] HELLMANN, H. Quantenchemie. Leipzig, 1937.
- [19] HORN, R. A., AND JOHNSON, C. R. Matrix analysis. Cambridge University Press, Cambridge, 1985.

- [20] ILIEV, A., AND KYURKCHIEV, N. Generalization of Weierstrass-Dochev method for simultaneous extraction of only a part of all roots of algebraic polynomials. I. C. R. Acad. Bulgare Sci. 55, 2 (2002), 23–26.
- [21] ISMAIL, M. E. H. Monotonicity of zeros of orthogonal polynomials. In q-series and partitions (Minneapolis, MN, 1988), vol. 18 of IMA Vol. Math. Appl. Springer, New York, 1989, pp. 177–190.
- [22] ISMAIL, M. E. H. Classical and quantum orthogonal polynomials in one variable, vol. 98 of Encyclopedia of Mathematics and its Applications. Cambridge University Press, Cambridge, 2005. With two chapters by Walter Van Assche, With a foreword by Richard A. Askey.
- [23] ISMAIL, M. E. H., AND LI, X. Bound on the extreme zeros of orthogonal polynomials. Proc. Amer. Math. Soc. 115, 1 (1992), 131–140.
- [24] ISMAIL, M. E. H., AND MULDOON, M. E. A discrete approach to monotonicity of zeros of orthogonal polynomials. *Trans. Amer. Math. Soc.* 323, 1 (1991), 65–78.
- [25] JORDAAN, K., AND TOÓKOS, F. Interlacing theorems for the zeros of some orthogonal polynomials from different sequences. *Appl. Numer. Math.* 59, 8 (2009), 2015–2022.
- [26] KOEKOEK, R., AND SWARTTOUW, R. F. The askey-scheme of hypergeometric orthogonal polynomials and its q-analogue. , Report 98-17 of the Faculty of Technical Mathematics and Informatics, Delft University of Technology (1998).
- [27] KRASIKOV, I. On extreme zeros of classical orthogonal polynomials. J. Comput. Appl. Math. 193, 1 (2006), 168–182.
- [28] KRASIKOV, I., AND ZARKH, A. On zeros of discrete orthogonal polynomials. J. Approx. Theory 156, 2 (2009), 121–141.

- [29] KUIJLAARS, A. B. J., AND RAKHMANOV, E. A. Zero distributions for discrete orthogonal polynomials. In *Proceedings of the VIIIth Symposium on Orthogonal Polynomials and Their Applications (Seville, 1997)* (1998), vol. 99, pp. 255–274.
- [30] LEVIT, R. J. The zeros of the Hahn polynomials. SIAM Rev. 9 (1967), 191–203.
- [31] LIMA, E. L. Curso de Análise, 11 ed., vol. 1. Projeto Euclides IMPA, 2006.
- [32] LIMA, E. L. Curso de Análise, vol. 2. Projeto Euclides IMPA, 2006.
- [33] MARKOV, A. Sur les racines de certaines équations. Mathematische Annalen 27 (1886), 177–182.
- [34] MONIEN, H. Gaussian quadrature for sums: a rapidly convergent summation scheme. Math. Comp. 79, 270 (2010), 857–869.
- [35] NIKIFOROV, A. F., SUSLOV, S. K., AND UVAROV, V. B. Classical orthogonal polynomials of a discrete variable. Springer Series in Computational Physics. Springer-Verlag, Berlin, 1991. Translated from the Russian.
- [36] RONVEAUX, A., ZARZO, A., AREA, I., AND GODOY, E. Classical orthogonal polynomials: dependence of parameters. J. Comput. Appl. Math. 121, 1-2 (2000), 95–112. Numerical analysis in the 20th century, Vol. I, Approximation theory.
- [37] STIELTJES, T. J. Sur les polynômes de Jacobi. C. R. Acad. Sci. Paris 100 (1885), 620–622.
- [38] STIELTJES, T. J. Sur les quelques théorèmes d'algèbre. C. R. Acad. Sci. Paris 100 (1885), 439–440.
- [39] STIELTJES, T. J. Sur les racines de l'équation $x_n = 0$. Acta Math. 9 (1886), 385-400.
- [40] SZEGÖ, G. Inequalities for the zeros of Legendre polynomials and related functions. Trans. Amer. Math. Soc. 39, 1 (1936), 1–17.

- [41] SZEGŐ, G. Orthogonal polynomials, fourth ed. American Mathematical Society, Providence, R.I., 1975. American Mathematical Society, Colloquium Publications, Vol. XXIII.
- [42] WALL, H. S., AND WETZEL, M. Quadratic forms and convergence regions for continued fractions. *Duke Math. J.* 11 (1944), 89–102.