

José Manuel Andrade de Matos

**Algoritmos de cálculo dos aproximantes de
Frobenius-Padé e generalizações**



**Departamento de Matemática Aplicada
Faculdade de Ciências da Universidade do Porto
2003**

José Manuel Andrade de Matos

Algoritmos de cálculo dos aproximantes de Frobenius-Padé e generalizações



*Tese submetida à Faculdade de Ciências da
Universidade do Porto para obtenção do grau de Doutor
em Matemática Aplicada*

Departamento de Matemática Aplicada
Faculdade de Ciências da Universidade do Porto
2003

*Aos meus pais,
À Piedade,
Aos meus filhos:
João,
Inês
e Joana*

Agradecimentos

À Professora Doutora Ana C. Matos e à Professora Doutora Zélia Rocha, minhas orientadoras, o meu profundo agradecimento pelo apoio científico, a disponibilidade, o incentivo e a amizade que me dedicaram. Agradeço-lhes ainda terem-me apresentado "Frobenius-Padé" e a cuidada revisão desta tese.

À Professora Doutora Jeannette Van Iseghem da Universidade de Lille, um agradecimento muito especial por ter lido uma versão prévia do último capítulo desta tese. As suas sugestões constituem o contributo essencial para a forma final do trabalho. O meu reconhecimento estende-se ao Professor Doutor François Van Iseghem, pela amizade e pelo magnífico humor com que fui recebido.

Ao Professor Doutor Bernhard Beckermann da Universidade de Lille, o meu agradecimento pela amizade e pela magnífica hospitalidade com que me recebeu em Lille. As suas sugestões de trabalho foram fundamentais em parte substancial desta tese. Não posso esquecer a sua família e a forma como me receberam.

Ao Professor Doutor Claude Brezinski, da Universidade de Lille, agradeço toda a disponibilidade pessoal que demonstrou, todo o apoio que recebi no Laboratório ANO e a magnífica inspiração que o seu trabalho representa. Não tenho dúvidas que a visita guiada ao souk de Marrakesh influenciou positivamente este trabalho.

Ao Professor Doutor Pascal Maroni, da Universidade Pierre et Marie Curie, agradeço a atenção que prestou ao meu trabalho e o interesse que demonstrou no meu percurso.

À Professora Doutora Michela Redivo-Zaglia da Universidade de Padova, o meu agradecimento pelo seu contributo e sugestões para a elaboração desta tese.

Ao Professor Doutor Manuel Rogério, o meu profundo agradecimento. As suas lições de Análise Numérica e a sua cuidada orientação da dissertação de Mestrado, representam a ferramenta principal desta tese.

À Professora Doutora Leonor Madureira Pinto, Presidente do Conselho Científico, à Dra. Helena Vieira da Silva, Presidente do Departamento de Matemática e à Dra. Júlia Valério, Orientadora do Grupo de Disciplinas de Matemática Aplicada, do Instituto Superior de Engenharia do Porto, agradeço todo o apoio institucional e todo o interesse pessoal que demonstraram no meu trabalho.

Ao Departamento de Matemática Aplicada da Universidade do Porto, ao Centro de Matemática Aplicada da Universidade do Porto, ao Centro de Matemática da Universidade do Porto e ao Laboratoire d'Analyse Numérique et d'Optimisation da Universidade de Lille, agradeço todas as facilidades concedidas. A todas as pessoas que encontrei nestas instituições, agradeço todo o apoio e a forma excepcional como fui acolhido.

À Maria João Rodrigues, agradeço profundamente por me ter apoiado e incentivado, mais a mim do que a ela, em todas as minhas Análises Numéricas. O seu apoio constitui todo o esforço empregue neste trabalho. Esta tese pertence-lhe.

À Professora Doutora Filomena Dias d'Almeida, agradeço por todo o apoio que me concedeu, nesta e em todas as outras situações em que tive o privilégio de merecer a sua atenção.

À Carmo Coimbra, ao Paulo Beleza e à Isabel Vieira, o meu reconhecimento por constituírem os

elos da cadeia que me prende à Análise Numérica.

Aos meus colegas de gabinete no Departamento de Matemática Aplicada, o meu reconhecimento por terem partilhado das agruras do percurso.

Aos meus colegas do ISEP, agradeço reconhecidamente todo o apoio, a ajuda o incentivo e as facilidades que me concederam. Sem eles, este trabalho que começou no século passado, só terminaria no próximo.

Agradeço a toda a minha família e aos meus amigos que são, reconheço, co-autores desta tese.

Este trabalho de tese foi parcialmente financiado pela acção 2/5.3/PRODEP/00 do programa PRODEP, com o código de financiamento n. 186.002. A todas as pessoas envolvidas no processo de preparação da candidatura a este programa de financiamento, os meus sinceros agradecimentos.

Resumo

O nome Frobenius-Padé é atribuído à classe de aproximantes racionais que, no sentido da definição de Frobenius, generalizam a definição de aproximação de Padé à aproximação de séries de Fourier. Isto é, se da função $f(z)$ se conhece um desenvolvimento formal em série de polinómios ortogonais, para cada par de valores inteiros não negativos p, q , designa-se por aproximante de Frobenius-Padé a função racional $N^{[p/q]}(z)/D^{[p/q]}(z)$, onde $N^{[p/q]}(z)$ e $D^{[p/q]}(z)$ são polinómios de graus, respectivamente p e q , tal que se anulam os primeiros coeficientes da série $D^{[p/q]}(z)f(z) - N^{[p/q]}(z)$ até à ordem tão longe quanto possível.

Apesar da semelhança nas definições, os problemas envolvidos no cálculo dos coeficientes dos aproximantes de Frobenius-Padé, são significativamente distintos dos surgidos no caso da aproximação de Padé. Residindo, tais diferenças, no facto de o produto $P_i(z)P_j(z)$, de dois polinómios ortogonais ter uma representação, na base $\{P_i\}$, significativamente distinta do caso do produto de potências $z^i z^j = z^{i+j}$, o trabalho desenvolve-se recorrendo exaustivamente das propriedades dos polinómios ortogonais.

O trabalho desenvolve-se na resolução de três problemas: resolver, de forma eficiente, o sistema de equações lineares associado ao cálculo dos aproximantes, designado por sistema de Frobenius-Padé; calcular as entradas $h_{i,j}$ da matriz deste sistema; evitar a resolução do sistema, calculando os aproximantes por recorrência.

Para as entradas da matriz do sistema de Frobenius-Padé, são apresentados novos resultados, permitindo desenvolver um algoritmo de cálculo destas quantidades, baseado nos coeficientes de linearização do produto de polinómios ortogonais.

Relativamente à resolução dos sistemas de Frobenius-Padé, demonstra-se que as respectivas matrizes satisfazem uma equação de desvio de característica. Este facto é explorado no desenvolvimento de um algoritmo rápido de resolução dos sistemas.

Demonstrado um resultado que relaciona formalmente os coeficientes da série de Fourier $f(z)$, com os coeficientes da série $zf(z)$, apresentam-se resultados novos, estabelecendo relações entre as componentes, i.e. numerador, denominador e erro, de aproximantes adjacentes na tabela de Frobenius-Padé. Estas relações, generalizando resultados análogos na tabela de Padé, permitem percorrer a tabela em vários sentidos. São apresentados e programados diversos algoritmos de cálculo recursivo dos aproximantes, baseados nestas relações. Os programas foram testados com sucesso, tendo os resultados revelado, para além de uma grande estabilidade numérica dos algoritmos, que os aproximantes calculados reproduzem com grande precisão, os valores exactos das funções testadas.

No último capítulo da tese, define-se uma nova classe de aproximantes, generalizando a definição

de aproximação de Frobenius-Padé a séries de polinómios d -ortogonais. Novos resultados, permitindo interpretar uma série de polinómios d -ortogonais como uma generalização das séries de Fourier, são introduzidos. Os resultados dos capítulos anteriores são generalizados para esta nova classe de aproximantes, e são apresentados algoritmos de cálculo dos respectivos coeficientes. Alguns resultados numéricos, obtidos com estes algoritmos, são apresentados.

Abstract

The name of Frobenius-Padé approximants is the name given to the class of rational approximants that, in the sense of Frobenius definition, generalizes the definition of Padé approximant to Fourier's series approximation. More precisely, if one knows the formal series of orthogonal polynomials of a function $f(x)$, then, for each pair (p, q) of nonnegative integers, the Frobenius-Padé approximant of order $[p/q]$ is the rational function $N^{[p/q]}(z)/D^{[p/q]}(z)$, where $N^{[p/q]}(z)$ and $D^{[p/q]}(z)$ are polynomials of degree p and q respectively, such that, in the series $D^{[p/q]}(z)f(z) - N^{[p/q]}(z)$, as many, of the first, terms as possible are equal to zero.

Despite of the resemblance between the definitions of Padé and Frobenius-Padé approximants, the problems involved in the computation of their coefficients are significantly different. This difference has origins in the fact that the product $P_i(z)P_j(z)$ of two orthogonal polynomials, has a more complex representation in the basis $\{P_i\}$ than in the powers case where one has trivially $z^i z^j = z^{i+j}$. Therefore this work uses in an exhaustive way the properties of orthogonal polynomials.

This work is based on the resolution of three problems: solving efficiently the system of linear equations associated to the calculation of the approximants - the Frobenius-Padé system; compute the matrix $H = (h_{i,j})_{i,j}$ of such systems; avoid the resolution of the system by computing the approximants recursively.

For the computation of the entries $h_{i,j}$ of the Frobenius-Padé systems, new results are presented that allow the development of an algorithm of computation of $h_{i,j}$ based on linearization coefficients of the product of orthogonal polynomials.

As far as the resolution of the Frobenius-Padé systems is concerned, we show that their matrices satisfy a displacement rank equation. This fact is further explored in the development of a fast algorithm for the resolution of the systems.

Once a result is proved relating formally the coefficients of the Fourier series of $f(z)$, with the coefficients of the Fourier series of $zf(z)$, we exhibits new results establishing relations between the components: numerator, denominator and error, of adjacent approximants in the Frobenius-Padé table. Such relations, which generalize analogous results in the Padé table, will allow us to use different paths to compute the table's entries. Based on these relations, we will present several algorithms and programs for the recursive computation of the approximants. The programs were tested successfully, and the results revealed, apart from its good numerical stability, that the computed approximants reproduce with great precision, the exact values of the tested functions.

In the last chapter of this thesis, we define a new class of approximants which generalize the definition of Frobenius-Padé approximation to series of d -orthogonal polynomials. New results,

which allow us to interpret a series of d -orthogonal polynomials as a generalization of Fourier series, are proved. The results of the previous chapters are then generalized for this new class of approximants, and algorithms for the computation of the respective coefficients are presented. Some numerical results, obtained with such algorithms are also exhibited.

Résumé

Le nom de Frobenius-Padé est attribué à la classe des approximants rationnels qui, dans le sens de la définition de Frobenius, généralise la définition de l'approximation de Padé pour les séries de Fourier. C'est-à-dire, si un développement formel en série de polynômes orthogonaux est donné pour la fonction $f(z)$, pour chaque paire de valeurs entières non négatives p, q , on désigne pour l'approximant de Frobenius-Padé, la fonction rationnelle $N^{[p/q]}(z)/D^{[p/q]}(z)$, où $N^{[p/q]}(z)$ et $D^{[p/q]}(z)$ sont des polynômes des degrés, respectivement p et q , tels que sont nuls les premiers coefficients de la série $D^{[p/q]}(z)f(z) - N^{[p/q]}(z)$, jusqu'à l'ordre aussi grand qui possible.

En dépit de l'analogie dans les définitions, les problèmes dans le calcul des coefficients des approximants de Frobenius-Padé, sont sensiblement distincts dans le cas de l'approximation de Padé. Telles différences étant une conséquence du fait du produit $P_i(z)P_j(z)$, de deux polynômes orthogonaux pouvoir avoir une représentation, dans la base $\{P_i\}$, sensiblement distincte du cas du produit des puissances $z^i z^j = z^{i+j}$, ce travail fait appel exhaustivement à des propriétés des polynômes orthogonaux.

Le travail est développé dans la résolution de trois problèmes: résoudre, de façon efficace, le système des équations linéaires associé au calcul des approximants, désigné par le système de Frobenius-Padé; calculer les entrées $h_{i,j}$ de la matrice de ce système; éviter la résolution du système, calculant les approximations par récurrence.

En ce qui concerne les entrées de la matrice du système de Frobenius-Padé, de nouveaux résultats sont présentés, permettent le développement d'un algorithme de calcul, basé sur les coefficients de linéarisation du produit des polynômes orthogonaux.

Relativement à la résolution des systèmes de Frobenius-Padé, on démontre que les matrices respectives satisfont une équation de 'déplacement rank'. Ce fait est exploré dans le développement d'un algorithme rapide de résolution des systèmes.

Démontré un résultat qui relie formellement les coefficients de la série de Fourier $f(z)$, avec les coefficients de la série $zf(z)$, de nouveaux résultats sont présentés, mettant en évidence des relations entre les composants, c'est-à-dire numérateur, dénominateur et erreur, des approximants adjacents dans le tableau de Frobenius-Padé. Ces relations, généralisant des résultats analogues dans le tableau de Padé, permettent parcourir le tableau dans quelques directions. Basés sur ces relations, des algorithmes pour le calcul récursif des approximants, sont présentées et programmés. Les programmes ont été examinés avec succès, et les résultats mettent en évidence une grande stabilité numérique des algorithmes, car les approximants calculés reproduisent avec grande précision, les valeurs exactes des fonctions examinées.

Dans le dernier chapitre de la thèse, une nouvelle classe des approximants est définie, généralisant la définition de l'approximation de Frobenius-Padé, pour des séries de polynômes d -orthogonaux. De nouveaux résultats, permettant interpréter une série de polynômes d -orthogonaux comme une généralisation de une série de Fourier, sont présentés. Les résultats des chapitres précédents sont généralisés pour cette nouvelle classe des approximations, et des algorithmes du calcul des coefficients respectifs sont présentés. Quelques résultats numériques, obtenus avec ces algorithmes, sont donnés.

Conteúdo

Resumo	v
Abstract	vii
Résumé	ix
1 Introdução e motivação	1
2 Aproximação de Frobenius-Padé	9
2.1 Notações e definições	9
2.2 Cálculo dos aproximantes	12
2.2.1 Cálculo recursivo dos coeficientes $h_{i,j}$	12
2.2.2 Coeficientes de linearização	17
2.3 Cálculo recursivo por decomposição LU	23
3 Estrutura de Desvio de Característica	35
3.1 Introdução	35
3.2 Estrutura das matrizes de Frobenius-Padé	37
3.3 Operadores não invertíveis	42
3.3.1 Diagonalização das matrizes	43
3.3.2 Inversão parcial do operador	46
3.4 Algoritmo e resultados	48
3.5 Conclusões	58
4 Relações de Recorrência na tabela FP	63

4.1	Identities de tipo Frobenius generalizadas	63
4.2	Relações de recorrência a três termos	65
4.2.1	Caso geral das relações a três termos	65
4.2.2	Relações $\begin{matrix} * \\ * \end{matrix}$	69
4.3	Relações de recorrência a quatro termos	72
4.3.1	Progressão da esquerda para a direita na tabela	72
4.3.2	Relações de descida na Tabela Frobenius-Padé	89
4.3.3	Relações de progressão nas diagonais da tabela	94
4.4	Conclusões	102
5	Generalização	105
5.1	Notações e Definições	106
5.1.1	Polinómios d -ortogonais	106
5.1.2	Série de polinómios d -ortogonais	107
5.1.3	Aproximação de Frobenius-Padé d -ortogonal	110
5.2	Cálculo dos coeficientes dos aproximantes	111
5.3	Desvio de característica	113
5.4	Cálculo recursivo	116
5.4.1	Generalização das relações tipo Frobenius	116
5.4.2	Exemplos	125
5.5	Algoritmos de tipo Kronecker	134
5.6	Conclusões	139
	Referências	141

Capítulo 1

Introdução e motivação

Dada uma função $f(z)$ de que se conhecem, pelo menos os primeiros coeficientes do seu desenvolvimento formal em série de potências

$$f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i z^i \quad (1.1)$$

define-se o aproximante de Padé (AP) de $f(z)$, como sendo a função racional

$$[p/q]_f(z) = N(z)/D(z) \quad (1.2)$$

onde $N(z)$ e $D(z)$ são polinómios de graus p e q respectivamente, determinados pela condição de o desenvolvimento em série de McLaurin de $[p/q]_f(z)$ coincidir com o de $f(z)$ tão longe quanto possível [7].

Assim, o cálculo do aproximante de Padé $[p/q]_f(z)$ consiste na determinação dos $p + 1$ coeficientes de

$$N(z) = \sum_{i=0}^p a_i z^i \quad (1.3)$$

e dos $q + 1$ coeficientes de

$$D(z) = \sum_{i=0}^q b_i z^i \quad (1.4)$$

Uma vez que em (1.2) existe um factor multiplicativo não nulo arbitrário entre $N(z)$ e $D(z)$, temos $p + q + 1$ coeficientes a determinar, o que sugere que, normalmente, podemos esperar do aproximante que a sua expansão em série de potências coincida com a da função até à ordem z^{p+q} , isto é, utilizando notação de séries formais, temos a seguinte definição [7]

Definição 1.1 *O aproximante de Padé $[p/q]_f(z)$ é uma função racional $N(z)/D(z)$ tal que*

$$D(z)f(z) - N(z) = O(z^{p+q+1}) \quad (1.5)$$
$$\partial N \leq p, \partial D \leq q$$

O símbolo ∂P utiliza-se para designar o grau do polinómio P e o símbolo $O(z^n)$ para designar uma série cujos coeficientes até ao termo de grau $n - 1$ são nulos.

Substituindo (1.1), (1.3) e (1.4) em (1.5) encontramos as equações

$$\sum_{i+j=k} b_i f_j = a_k, \quad k = 0, \dots, p \quad (1.6)$$

$$\sum_{i+j=k} b_i f_j = 0, \quad k = p+1, \dots, p+q \quad (1.7)$$

As equações (1.7) constituem um sistema homogéneo de q equações nas $q+1$ incógnitas b_0, \dots, b_q . Logo, existe uma solução não trivial. Calculados os $b_i, i = 0, \dots, q$, com (1.6) calcula-se directamente os valores de $a_i, i = 0, \dots, p$

O trabalho desenvolvido nesta tese, envolve uma classe de aproximantes racionais que constituem uma generalização da aproximação de Padé, no sentido em que se aproxima uma série fazendo coincidir os coeficientes tão longe quanto possível. A generalização consiste em aplicar a mesma definição de aproximação a outro tipo de séries, que não as séries de potências.

Seja $f(z)$ uma função definida por um desenvolvimento em série de Fourier

$$f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i P_i(z) \quad (1.8)$$

onde $\{P_i\}_{i \geq 0}$ constitui uma família de polinómios ortogonais, definida pelas condições de ortogonalidade

$$\langle P_i, P_j \rangle \equiv \int_a^b P_i(x) P_j(x) w(x) dx = \mu_i \delta_{ij}, \quad i, j \geq 0 \quad (1.9)$$

com $\mu_i = \langle P_i, P_i \rangle = \|P_i\|_2^2$, e

$$f_i = \frac{1}{\mu_i} \langle f, P_i \rangle, \quad i \geq 0. \quad (1.10)$$

De facto, os desenvolvimentos em série de polinómios ortogonais a considerar podem ser mais gerais do que os introduzidos em (1.8)-(1.10), seguindo o formalismo de [32], podemos considerar outras formas lineares, generalizando a forma integral (1.9), actuando no espaço dos polinómios. Sendo \mathcal{P} um espaço vectorial de polinómios e \mathcal{P}' o espaço dual de \mathcal{P} , isto é o conjunto das formas lineares actuando em \mathcal{P} , a sucessão $\{P_i\}_{i \geq 0} \subset \mathcal{P}$ é dita ortogonal se existe uma forma $u \in \mathcal{P}'$ tal que

$$\begin{cases} \langle u, P_i P_j \rangle = \mu_i \delta_{ij}, & i, j \geq 0 \\ \mu_i = \langle u, P_i^2 \rangle \neq 0 \end{cases} .$$

Multiplicando em (1.8) ambos os membros por $P_j(z)$ e aplicando a forma u obtemos, em analogia com (1.10),

$$f_i = \frac{1}{\mu_i} \langle u, f P_i \rangle, \quad i \geq 0.$$

Generalizando o formalismo da definição de aproximação de Padé (1.5), podemos procurar funções racionais

$$\Phi_{p,q}(z) = N(z)/D(z)$$

com

$$N(z) = \sum_{i=0}^p a_i P_i(z), \quad D(z) = \sum_{i=0}^q b_i P_i(z)$$

que, partindo do conhecimento de apenas um número finito de coeficientes da série, aproximem $f(z)$ no sentido da aproximação de Padé, i.e., cujo desenvolvimento em série coincida com o de $f(z)$ tão longe quanto possível.

Na construção destes aproximantes de Padé generalizados, encontramos uma diferença fundamental em relação aos aproximantes de Padé. Enquanto que, quando tratamos de séries de potências, a lei de multiplicação

$$z^i z^j = z^{i+j}$$

conduz a que sejam formalmente, i.e., termo a termo, equivalentes as expressões

$$f(z) - N(z)/D(z) = O(z^{p+q+1}) \quad (1.11)$$

e

$$f(z)D(z) - N(z) = O(z^{p+q+1}) \quad (1.12)$$

no caso generalizado, encontramos leis de multiplicação que podem assumir um carácter menos elementar,

$$P_i(z)P_j(z) = \sum_{k=0}^{i+j} d_{ijk}P_k(z)$$

com coeficientes d_{ijk} , ditos coeficientes de linearização do produto de dois polinómios ortogonais. Com estas leis de multiplicação, deixam de ser equivalentes as condições (1.11) e (1.12) e somos conduzidos a duas generalizações distintas de aproximação de Padé.

À função racional $\phi_{p,q}(z)$ cujo desenvolvimento em série relativo ao sistema $\{P_i(z)\}_{i \geq 0}$ coincide com o de $f(z)$ até à ordem $p+q$, chama-se aproximante de Padé não linear. Logo, temos

$$f(z) - \phi_{pq}(z) = O(P_{p+q+1}(z))$$

Esta definição conduz a um sistema de equações não lineares. Os problemas da existência e unicidade de solução, bem como o estudo de algoritmos de cálculo destes aproximantes, são distintos e não se enquadram no trabalho desenvolvido nesta tese.

Com o objectivo de obter aproximantes racionais, com melhores propriedades de aproximação do que a aproximação de Padé, no sentido da norma uniforme ou no sentido de uma norma de mínimos quadrados, em [10] generaliza-se o formalismo da aproximação de Padé, considerando a expressão (1.12), para funções da forma

$$f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i \phi_i(z),$$

e definindo um aproximante de ordem $[p/q]$, como a função $N_p(z)/D_q(z)$, com $N_p(z) = \sum_{i=0}^p a_i \phi_i(z)$ e $D_q(z) = \sum_{i=0}^q b_i \phi_i(z)$ tal que

$$\left(\sum_{i \geq 0} f_i \phi_i(z) \right) \left(\sum_{i=0}^q b_i \phi_i(z) \right) - \sum_{i=0}^p a_i \phi_i(z) = \sum_{i > v} e_i \phi_i(z) \quad (1.13)$$

com v tão grande quanto possível. A expressão para o erro de aproximação $\sum_{i > v} e_i \phi_i(z)/D_q(z)$ justifica a motivação da definição: Se $\phi_i(z) = T_i(z)$ é o polinómio de Chebyshev de grau i , então a norma uniforme do erro é suposto ser menor do que a obtida com a aproximação de Padé; Se $\phi_i(z) = P_i(z)$ é o polinómio ortogonal com respeito ao produto interno (1.9), então a aproximação de Padé generalizada é suposto constituir uma boa aproximação de $f(z)$ na norma $\langle P_i, P_i \rangle^{\frac{1}{2}}$ [10].

A mesma definição de aproximação de Padé generalizada pode incluir funções $\phi_i(z)$ não polinomiais. No entanto, as propriedades destas funções apresentam-se como fundamentais, desde logo, no problema do cálculo dos coeficientes a_i e b_i das componentes, i.e. numerador e denominador, dos aproximantes. Sendo $f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i \phi_i(z)$, onde $\phi_i(z)$ são funções satisfazendo a lei de multiplicação

$$\phi_i(z)\phi_j(z) = \sum_k d_{ijk} \phi_k(z), \quad i, j \geq 0 \quad (1.14)$$

então os coeficientes $\{a_i\}_{i=0}^p$ e $\{b_i\}_{i=0}^q$, do aproximante de Padé generalizado

$$N_p(z)/D_q(z) = \frac{\sum_{i=0}^p a_i \phi_i(z)}{\sum_{i=0}^q b_i \phi_i(z)},$$

são determinados pelo sistema de equação lineares

$$\sum_{i \geq 0} \sum_{j=0}^q d_{ijk} f_i b_j = a_k, \quad k = 0, \dots, v$$

com $a_k = 0$ para $k > p$ [10].

Este resultado, i.e. o facto de o cálculo dos coeficientes destes aproximantes conduzir a um sistema de equações lineares, justifica a designação de aproximantes de Padé lineares, e constitui uma vantagem relativamente aos aproximantes de Padé não lineares.

Com o mesmo formalismo, no caso de $\{\phi_i\}_{i \geq 0}$ constituir uma base de funções ortogonais,

$$\phi_i(z) = \phi_0(z) P_i(z), \quad i \geq 0$$

sendo $\{P_i\}_{i \geq 0}$ uma família de polinómios ortogonais, em [25] define-se um aproximante de Padé generalizado, de ordem $[p/q]$, como a função

$$\phi_0(z) \frac{\sum_{i=0}^p a_i P_i(z)}{\sum_{i=0}^q b_i Q_i(z)}$$

satisfazendo a condição

$$f(z) \sum_{i=0}^q b_i Q_i(z) - \sum_{i=0}^p a_i P_i(z) = \sum_{i \geq p+q+1} e_i P_i(z)$$

onde $\{Q_i\}_{i \geq 0}$ constitui uma família de polinómios ortogonais ditos complementares.

Este trabalho é devotado ao cálculo dos coeficientes de aproximantes de Padé generalizados, no sentido desta definição, para séries de polinómios ortogonais

$$f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i P_i(z),$$

i.e. $\phi_i(z) = P_i(z)$, $i \geq 0$ e para o caso de a família $\{Q_i\}_{i \geq 0}$ de polinómios complementares considerada para o desenvolvimento do denominador, coincidir com a família $\{P_i\}_{i \geq 0}$ dos polinómios dados no desenvolvimento da série e considerados para o desenvolvimento do numerador. Logo, os aproximantes a considerar, designados por aproximantes de Frobenius-Padé (AFP) de $f(z)$, constituem a função racional

$$[p/q]_f^P(z) = \frac{N(z)}{D(z)} \equiv \frac{\sum_{i=0}^p a_i P_i(z)}{\sum_{i=0}^q b_i P_i(z)}$$

tal que

$$D(z)f(z) - N(z) = O(P_{p+q+1}(z)). \quad (1.15)$$

O caso particular em que $P_i(z) = T_i(z)$ são os polinómios de Chebyshev, é tratado em [2] e [12]. O cálculo dos coeficientes dos aproximantes neste caso, é particularmente simples devido a algumas propriedades particulares destes polinómios, que não são partilhadas por outras famílias de polinómios ortogonais. A lei de multiplicação $T_i(z)T_j(z) = (T_{|i-j|}(z) + T_{i+j}(z))/2$ envolvendo apenas dois polinómios no segundo membro; a relação de recorrência $zT_i(z) = (T_{i+1}(z) + T_{i-1}(z))/2$ com coeficientes constantes; e a expressão exacta para os zeros dos polinómios de Chebyshev, são propriedades destes polinómios, que permitem obter algoritmos particulares, mais eficientes do que para o caso geral. Em [5], apresenta-se uma fórmula, atribuída a Paszkowski, de cálculo dos coeficientes a_i e b_i , para este caso particular dos polinómios de Chebyshev. Apesar da inegável importância destes polinómios, o sentido dado a esta tese, procurando explorar o caso geral de uma família de polinómios ortogonais, conduz a que este caso não seja tratado neste trabalho.

Em [25], apesar de a definição de aproximante ser apresentada com carácter geral, apenas se considera, nos exemplos ilustrativos dos resultados, o caso de séries em polinómios de Legendre. Em [34], onde se demonstram alguns resultados de convergência destes aproximantes para o caso dos polinómios de Legendre, os resultados apresentados respeitam também ao caso particular dos polinómios de Legendre. Apesar disso, o trabalho apresentado nestes dois artigos, tem generalização imediata e óbvia, para outras famílias de polinómios ortogonais, e serviu de inspiração fundamental para esta tese.

O objectivo da tese é a implementação de novos algoritmos de cálculo dos AFP. O trabalho desenvolve-se na resolução de três problemas: resolver, de forma eficiente, o sistema de equações lineares associado ao cálculo dos aproximantes; calcular as entradas da matriz deste sistema; evitar a resolução do sistema, calculando os aproximantes por recorrência.

Introduzida uma normalização, na definição de AFP, no capítulo 2 mostra-se que um aproximante da forma

$$[p/q]_f^p(z) = \frac{\sum_{i=0}^p a_i P_i(z)}{P_q(z) + \sum_{i=0}^{q-1} b_i P_i(z)}$$

existe e é único se

$$H^{[p/q]} = \begin{bmatrix} h_{p+1,0} & \dots & h_{p+1,q-1} \\ \vdots & & \vdots \\ h_{p+q,0} & \dots & h_{p+q,q-1} \end{bmatrix}$$

é uma matriz regular, onde $h_{i,j}$ representa o coeficiente de $P_i(z)$ no desenvolvimento em série formal

$$P_j(z)f(z) = \sum_{i \geq 0} h_{i,j} P_i(z).$$

Além disso, definindo

$$G^{[p/q]} = \begin{bmatrix} h_{00} & \dots & h_{0,q-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{p,0} & \dots & h_{p,q-1} \end{bmatrix}, \quad g^{[p/q]} = \begin{bmatrix} h_{0q} \\ \vdots \\ h_{pq} \end{bmatrix} \text{ e } h^{[p/q]} = \begin{bmatrix} h_{p+1,q} \\ \vdots \\ h_{p+q,q} \end{bmatrix}$$

então os vectores $b = (b_0, \dots, b_q)^T$ e $a = (a_0, \dots, a_p)^T$, dos coeficientes dos aproximantes, podem calcular-se por

$$\begin{cases} H^{[p/q]} \cdot b = -h^{[p/q]} \\ a = G^{[p/q]} \cdot b + g^{[p/q]} \end{cases}$$

O problema do cálculo dos coeficientes $h_{i,j}$ está resolvido em [34] e [25], utilizando um algoritmo recursivo que permite calcular cada uma das colunas da matriz, à custa dos elementos das duas colunas anteriores. Na secção 2.2.2, é apresentado um algoritmo novo, baseado nos *coeficientes de linearização* dos polinómios ortogonais, i.e os coeficientes d_{ijk} da representação

$$P_i(z)P_j(z) = \sum_{k=|i-j|}^{i+j} d_{ijk}P_k(z).$$

Estes coeficientes de linearização podem calcular-se por recorrência [28]. A utilização dos coeficientes de linearização, permite evitar o cálculo de toda a matriz, reduzindo o volume de aritmética envolvido nos algoritmos. Este facto é particularmente útil, juntamente com os algoritmos do capítulo 3, para os quais da matriz $H^{[p/q]}$ apenas temos de calcular duas linhas e uma coluna.

Na última secção deste capítulo, desenvolve-se um algoritmo que, explorando a relação entre os sistemas de Frobenius-Padé associados a dois aproximantes consecutivos da mesma linha, permite calcular recursivamente a factorização LU das matrizes. Este processo permite calcular uma sucessão de aproximantes, à custa da resolução de uma sucessão de sistemas triangulares. Testado com diversas funções, e calculado um grande número de aproximantes em cada linha da tabela, os resultados apontam para grande estabilidade do algoritmo, não se tendo observado em caso algum, um aumento significativo do erro com o número de iterações do algoritmo.

Como quantidades auxiliares de cálculo, neste algoritmo, são produzidas estimativas para o erro na aproximação racional. Em alguns dos casos testados, esta estimativa mostrou-se capaz de acompanhar de perto o erro calculado com a expressão exacta da função.

No capítulo 3 a estrutura da matriz $H^{[p/q]}$ é explorada, utilizando o conceito de *desvio de característica* [20], [26]. Na secção 3.2, demonstra-se que a matriz satisfaz uma equação de desvio de característica. Na secção seguinte, esta estrutura é identificada como correspondendo a matrizes tipo Hankel polinomiais. Para esta classe de matrizes, existe um algoritmo rápido de factorização LU , i.e um algoritmo que permite calcular a factorização triangular de uma matriz $n \times n$ em $O(n^2)$ operações aritméticas elementares [21]. Este algoritmo, envolvendo os zeros dos polinómios ortogonais, mostra-se promissor para os casos que envolvam famílias de polinómios ortogonais de que se conhecem os respectivos zeros. Sendo a família dos polinómios de Chebyshev um desses casos, fica em aberto o estudo da aplicação generalizada, i.e. para qualquer família de polinómios ortogonais, deste algoritmo. O trabalho desenvolvido no âmbito desta tese, procurou seguir outro caminho, que se mostrou mais adequado ao caso geral, de uma família de polinómios ortogonais em que o conhecimento sobre os valores dos respectivos zeros é limitado.

Um algoritmo rápido alternativo, evitando o cálculo dos zeros dos polinómios ortogonais, é apresentado e é testado com sucesso na secção 3.4. Com o objectivo de comparar resultados, resolveram-se os sistemas $H^{[p/q]} \cdot b = -h^{[p/q]}$, utilizando o algoritmo rápido proposto, e compararam-se os aproximantes calculados, com os obtidos com uma rotina padrão (resolvendo um sistema de equações lineares com uma matriz genérica de coeficientes reais utilizando factorização LU baseada na eliminação de Gauss com pivotagem parcial). Os resultados mostram-se significativamente favoráveis para o algoritmo rápido novo, fornecendo nalguns casos, aproximantes capazes de reproduzir os valores das funções testadas, com erros absolutos máximos, várias ordens de grandeza menores.

Os resultados obtidos mostram-se precisos, mesmo com matrizes mal condicionadas. Na secção 3.4 apresenta-se uma explicação para este facto, relacionando os resíduos resultantes da resolução

dos sistemas com aritmética de precisão finita, com a perturbação introduzida na condição (1.15).

O algoritmo foi igualmente comparado com dois algoritmos recursivos apresentados em [34]. Nos testes realizados, o algoritmo rápido proposto neste trabalho, mostrou-se mais estável do que os algoritmos recursivos, no sentido de que os aproximantes de ordem superior calculados, aparentam menor perturbação face à acumulação de erros.

Resolvido o problema da implementação de um algoritmo eficiente para o cálculo de um aproximante, o capítulo 4 trata do problema do cálculo recursivo de sucessões de aproximantes. Neste capítulo, apresentam-se resultados novos, estabelecendo relações entre as componentes, i.e. numerador, denominador e erro, de aproximantes adjacentes na tabela de Padé generalizada. Estas relações, generalizando resultados análogos na tabela de Padé [2], [7], permitindo percorrer a tabela em vários sentidos, mostram-se apropriadas para a implementação em algoritmos de cálculo recursivo dos aproximantes.

Diversas relações de progressão na tabela de Frobenius-Padé foram apresentadas. Para ilustrar a sua utilização no cálculo dos aproximantes, nas secções 4.3.1 e 4.3.3 apresentam-se algoritmos de cálculo de sucessões de aproximantes, respectivamente, de uma linha da tabela e de duas diagonais adjacentes. Ambos os algoritmos foram avaliados e comparados com outros algoritmos, em termos do volume de aritmética envolvida.

Programados os algoritmos, os testes realizados revelaram que os algoritmos são suficientemente robustos para calcular as aproximações racionais com grande precisão. As sucessões de aproximantes calculadas, produzem valores convergentes para os valores exactos.

Para testar o comportamento dos aproximantes para uma função descontínua, tomou-se como exemplo uma função "salto" de que se conhece um desenvolvimento em série de polinómios de Legendre. Para além de reproduzirem com grande precisão, na generalidade dos pontos no intervalo de aproximação, os valores exactos da função, os aproximantes calculados destacam-se pelo seu comportamento na vizinhança da singularidade. O designado fenómeno de Gibbs, traduzido pelo aumento da amplitude das oscilações do erro perto da descontinuidade da função [9], é significativamente amortecido com as aproximações calculadas neste trabalho.

Calculadas diversas sucessões de aproximantes para uma série divergente, os testes revelam a capacidade destes aproximantes de reproduzir, com grande precisão, os valores da função. No exemplo apresentado, referido na literatura como constituindo uma série divergente em todos os pontos, obtêm-se resultados que não são significativamente piores, em termos do erro relativo máximo observado num intervalo de valores, relativamente a outro exemplo utilizado com uma série de Fourier convergente.

Os algoritmos propostos revelaram ainda, a capacidade de produzir estimativas para os erros na aproximação da função que se mostraram próximas dos erros calculados. Estas estimativas dos erros, são calculadas utilizando quantidades auxiliares, intervenientes nos algoritmos, não representando por isso, qualquer esforço adicional de cálculo.

No último capítulo, estuda-se a possibilidade de generalização dos resultados dos capítulos anteriores. A noção de biortogonalidade [6], [15], é considerada como uma generalização da noção de ortogonalidade para polinómios. No mesmo sentido, uma série de polinómios biortogonais, constitui uma generalização das séries de Fourier [6], consideradas nos capítulos anteriores. Do caso geral dos polinómios biortogonais, destacam-se os polinómios d -ortogonais, pelo facto de

satisfazerem uma relação de recorrência de ordem $d + 1$.

Neste capítulo, apresenta-se a generalização dos resultados dos capítulos anteriores, a séries de polinómios d -ortogonais. Na primeira secção, introduzem-se novos resultados relativos aos coeficientes do desenvolvimento em série de polinómios d -ortogonais de uma função. Além disso, demonstram-se propriedades de projecção das somas parciais destas séries, permitindo interpretar uma série d -ortogonal, como uma generalização das séries de Fourier [14].

Na secção 5.1.3, a noção de aproximação de Frobenius-Padé é generalizada a estas séries, e introduzem-se novas definições relacionadas com esta generalização.

Na secção 5.3, demonstra-se que a matriz associada ao cálculo dos coeficientes destes aproximantes generalizados, satisfaz uma equação de desvio de característica. Este facto permite obter um algoritmo rápido de decomposição LU , com $O(dq^2)$.

Generalizado o resultado que relaciona os coeficientes de uma série de Fourier $f(z)$, com os coeficientes da série $zf(z)$, ao caso d -ortogonal, na secção seguinte, apresentam-se resultados permitindo generalizar ao caso da aproximação de Frobenius-Padé em séries de polinómios d -ortogonais, as relações tipo Frobenius encontradas no capítulo 4. Um algoritmo, calculando uma sucessão de aproximantes de Frobenius-Padé generalizados pertencentes a duas diagonais adjacentes da tabela, foi programado e testado com diversos exemplos. Os resultados obtidos revelam que o algoritmo possui as mesmas qualidades de estabilidade dos seus congéneres do capítulo anterior.

Por último, generaliza-se para o cálculo de sucessões de aproximantes de Frobenius-Padé d -ortogonais, pertencentes a uma anti-diagonal da tabela, o algoritmo de tipo Kronecker, apresentado em [34] para o caso da aproximação de Frobenius-Padé em séries de polinómios de Legendre.

Os aproximantes generalizados, calculados com os algoritmos deste último capítulo, revelaram propriedades semelhantes às dos aproximantes de Frobenius-Padé. Nomeadamente, as sucessões de aproximantes calculadas, quando fixada uma abcissa, com a progressão nas linhas e nas colunas da tabela, produzem valores convergentes para os valores exactos da função. Diversas sucessões de aproximantes para série de polinómios d -ortogonais, foram calculadas e os resultados comparados com AFP, obtidos para as mesmas funções.

Os diversos algoritmos apresentados na tese, foram programados em Fortran 90. Utilizou-se o compilador e as rotinas básicas fornecidas com o pacote Microsoft Fortran PowerStation 4.0. Algumas operações incluídas nos algoritmos, recorrem às rotinas IMSL incluídas neste pacote. Todos os programas foram implementados com aritmética de dupla precisão.

Os gráficos e as tabelas de resultados apresentados, são gerados pela função Plot do programa Mathematica. Os coeficientes dos aproximantes, bem como o primeiro termo da série do erro neste algoritmo, são calculados pelo programa implementado em Fortran e escrito, com 16 algarismos significativos, num ficheiro ASCII. Em Mathematica implementou-se uma rotina que lê estes coeficientes e, utilizando as suas próprias rotinas de cálculo dos polinómios ortogonais, constroi os aproximantes de Frobenius-Padé.

Capítulo 2

Aproximação de Frobenius-Padé

Este capítulo trata da aproximação Frobenius-Padé, das suas propriedades e dos problemas associados ao cálculo dos coeficientes do numerador e do denominador. Na primeira secção introduzem-se as notações e definições utilizadas no restante desenvolvimento da tese. Em particular, definem-se os sistemas lineares e as matrizes associadas ao cálculo dos coeficientes dos aproximantes de Frobenius-Padé. Na segunda secção apresentam-se as fórmulas de cálculo dos elementos destas matrizes, e na secção 2.3 deduzem-se algoritmos de cálculo dos coeficientes dos denominadores dos aproximantes, baseados no cálculo recursivo da decomposição LU das matrizes, e apresentam-se alguns resultados numéricos. Na secção ?? comparam-se os aproximantes de Frobenius-Padé com os aproximantes de Padé em termos das propriedades algébricas de uns e de outros. Na última secção apresentam-se novos resultados referentes a condições suficientes para o aparecimento de singularidades na tabela de Frobenius-Padé.

2.1 Notações e definições

Seja $\{P_i(z)\}_{i \geq 0}$ uma família de polinómios ortogonais relativamente a uma funcional linear ou forma u , i.e.

$$\langle u, P_i P_j \rangle = \mu_i \delta_{ij}, \quad i, j = 0, 1, \dots$$

onde $\mu_i = \langle u, P_i P_i \rangle = \|P_i(z)\|_2^2 \neq 0$ e δ_{ij} é o símbolo de Kronecker e seja $f(z)$ uma função de variável complexa, dada pelo desenvolvimento de Fourier

$$f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i P_i(z)$$

então

$$f_i = \frac{1}{\mu_i} \langle u, f P_i \rangle$$

Para estas funções, definem-se os aproximantes racionais:

Definição 2.1 [25], [34] *Para cada par de valores $p, q \in \mathbb{N}$, define-se o aproximante de Frobenius-Padé (AFP) de ordem (p, q) de $f(z)$, como a função racional*

$$[p/q]_f^p(z) = \frac{N^{[p/q]}(z)}{D^{[p/q]}(z)} \equiv \frac{\sum_{i=0}^p a_i P_i(z)}{\sum_{i=0}^q b_i P_i(z)}$$

tal que

$$D^{[p/q]}(z)f(z) - N^{[p/q]}(z) = O(P_{p+q+1}(z))$$

Desta definição resulta que os coeficientes a_0, \dots, a_p e b_0, \dots, b_q satisfazem a equação

$$\sum_{i=0}^q b_i P_i(z) f(z) - \sum_{i=0}^p a_i P_i(z) = \sum_{i \geq p+q+1} e_i P_i(z) \quad (2.1)$$

Definindo [34]

$$P_i(z)f(z) = \sum_{j \geq 0} h_{j,i} P_j(z)$$

com

$$h_{j,i} = \frac{1}{\mu_j} \langle u, P_i(z) P_j(z) f(z) \rangle \quad (2.2)$$

e substituindo, obtemos

$$\sum_{j \geq 0} \left(\sum_{i=0}^q h_{j,i} b_i \right) P_j(z) - \sum_{i=0}^p a_i P_i(z) = \sum_{i \geq p+q+1} e_i P_i(z) \quad (2.3)$$

Agrupando os coeficientes, concluímos que (2.1) é equivalente a

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^q h_{j,i} b_i = a_j, & j = 0, \dots, p \\ \sum_{i=0}^q h_{j,i} b_i = 0, & j = p+1, \dots, p+q. \end{cases} \quad (2.4)$$

As últimas q equações constituem um sistema linear homogéneo nas $q+1$ incógnitas b_j . Calculados os b_j , os valores a_0, \dots, a_p podem calcular-se directamente a partir das primeiras $p+1$ equações.

Podemos concluir que, para calcular o AFP $[p/q]_f^P(z)$ temos dois problemas a resolver: o cálculo dos coeficientes $h_{j,i}$, $j = 0, \dots, p+q$, $i = 0, \dots, q$, problema que será tratado na secção 2.2.1; e a resolução do sistema de q equações lineares homogéneas

$$H \cdot b \equiv \begin{bmatrix} h_{p+1,0} & \dots & h_{p+1,q} \\ \vdots & & \vdots \\ h_{p+q,0} & \dots & h_{p+q,q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0 \\ \vdots \\ b_q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

nas $q+1$ incógnitas b_0, \dots, b_q .

Logo, definindo

$$G^{[p/q]} = \begin{bmatrix} h_{00} & \dots & h_{0,q-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{p,0} & \dots & h_{p,q-1} \end{bmatrix}, \quad g^{[p/q]} = \begin{bmatrix} h_{0q} \\ \vdots \\ h_{pq} \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

$$H^{[p/q]} = \begin{bmatrix} h_{p+1,0} & \dots & h_{p+1,q-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{p+q,0} & \dots & h_{p+q,q-1} \end{bmatrix}, \quad h^{[p/q]} = \begin{bmatrix} h_{p+1,q} \\ \vdots \\ h_{p+q,q} \end{bmatrix}$$

obtemos a seguinte proposição:

Proposição 2.1 Se $\det(H^{[p/q]}) \neq 0$, então o sistema (2.5) admite uma solução única tal que $b_q = 1$. Além disso, obtemos o AFP

$$[p/q]_f^P(z) = \frac{\sum_{k=0}^p a_k P_k(z)}{P_q(z) + \sum_{j=0}^{q-1} b_j P_j(z)}$$

resolvendo para $b = (b_0, \dots, b_{q-1})^T$, o sistema $q \times q$

$$H^{[p/q]} \cdot b = -h^{[p/q]} \quad (2.7)$$

e calculando $a = (a_0, \dots, a_p)^T$ a partir de

$$a = G^{[p/q]} \cdot b + g^{[p/q]}$$

Desta proposição, resulta que o cálculo dos coeficientes de $[p/q]_f^P(z)$ necessita dos elementos $h_{i,j}$, $i = 0, \dots, p+q$, $j = 0, \dots, q$

A matriz $H^{[p/q]}$ designa-se por *matriz de Frobenius-Padé*, e (2.5) constitui um *sistema de Frobenius-Padé*. Tal como na aproximação de Padé, os AFP podem representar-se numa tabela bidimensional, onde $[p/q]_f^P(z)$ ocupa a posição definida pela linha p e a coluna q . Esta tabela designa-se por *tabela de Frobenius-Padé* (TFP).

Definição 2.2 A tabela de Frobenius-Padé é normal se e só se

$$\det(H^{[p/q]}) \neq 0, \quad p, q \geq 0$$

Esta definição implica que [34]:

1. Para cada par (p, q) , temos que $\partial N^{[p/q]} = p$ e $\partial D^{[p/q]} = q$. Isto implica que todos os aproximantes de uma TFP são distintos;
2. O coeficiente do primeiro termo da expansão em série do erro (2.1) é não nulo.

Em todo este trabalho, considera-se um AFP $[p/q]_f^P(z)$ normalizado se $b_q = 1$. Com esta normalização, o resultado da proposição anterior é suficiente para garantir a unicidade do aproximante de Frobenius-Padé $[p/q]_f^P(z)$, como se expressa no corolário seguinte.

Corolário 2.1 Se $\det(H^{[p/q]}) \neq 0$, então o aproximante de Frobenius-Padé $[p/q]_f^P(z) = N^{[p/q]}(z)/D^{[p/q]}(z)$ tal que

$$\begin{cases} a_p \neq 0 \\ b_q = 1 \\ e_{p+q+1} \neq 0 \end{cases}$$

existe e é único.

No resto deste capítulo, as definições aqui introduzidas são utilizadas para enunciar os principais problemas relacionados com o cálculo dos coeficientes dos AFP. No capítulo 3, as propriedades dos coeficientes $h_{i,j}$ são utilizadas para introduzir novos resultados que permitem obter algoritmos rápidos de resolução do sistema de Frobenius-Padé.

2.2 Cálculo dos aproximantes

Como ficou exposto em 2.1, o cálculo dos coeficientes $\{a_i\}_{i=0}^p$ e $\{b_i\}_{i=0}^{q-1}$ do aproximante normalizado

$$[p/q]_f^P(z) = \frac{\sum_{i=0}^p a_i P_i(z)}{\sum_{i=0}^{q-1} b_i P_i(z) + P_q(z)}$$

envolve em geral três fases: o cálculo das entradas h_{ij} da matriz de Frobenius-Padé; a resolução do sistema Frobenius-Padé $H^{[p/q]} \cdot b = -h^{[p/q]}$ em ordem a b ; o cálculo dos coeficientes a_i directamente por $a = G^{[p/q]} \cdot b + g^{[p/q]}$.

A definição dos elementos h_{ij} permite deduzir duas fórmulas de cálculo distintas, apresentadas nas secções seguintes, cujas vantagens relativas são distintas, como veremos, conforme o algoritmo de cálculo dos coeficientes do aproximante que se pretende utilizar.

A normalização introduzida na AFP, e a matriz de Frobenius-Padé a ela associada, permite obter, na última parte desta secção, um algoritmo de cálculo recursivo dos coeficientes dos denominadores dos aproximantes por decomposição LU da matriz.

2.2.1 Cálculo recursivo dos coeficientes $h_{i,j}$

Da definição (2.2), dependendo da funcional u , não resulta em geral, uma forma prática de efectuar o cálculo dos valores $h_{i,j}$. No entanto, desta expressão, resultam imediatamente duas propriedades: a primeira permitindo calcular a primeira coluna da matriz

$$h_{i,0} = \frac{1}{\mu_i} \langle u, f(z) P_i(z) \rangle = f_i, \quad i \geq 0;$$

e a segunda, estabelecendo alguma "simetria" entre os elementos da matriz

$$h_{j,i} = \frac{\mu_i}{\mu_j} h_{i,j}, \quad i, j \geq 0 \quad (2.8)$$

que nos permite reduzir o esforço de cálculo à parte triangular inferior da matriz.

Sendo $\{P_i(z)\}_{i \geq 0}$ uma família de polinómios ortogonais, de entre outras propriedades características conhecidas, é sabido que satisfazem uma relação de recorrência de ordem 2

$$\begin{aligned} zP_i(z) &= \alpha_i P_{i+1}(z) + \beta_i P_i(z) + \gamma_i P_{i-1}(z), \quad \gamma_i \neq 0, \quad i \geq 0 \\ P_0(z) &= 1, \quad P_1(z) = (z - \beta_0)/\alpha_0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

Esta relação de recorrência é a chave para a demonstração da proposição seguinte, estabelecendo uma relação entre os coeficientes de Fourier das séries $f(z)$ e $g(z) = zf(z)$.

Proposição 2.2 *Se $f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i P_i(z)$ e $g(z) = zf(z) = \sum_{i \geq 0} g_i P_i(z)$ são duas séries de Fourier formais e $\{P_i\}_{i \geq 0}$ é a família de polinómios ortogonais satisfazendo a relação de recorrência (2.9), então*

$$\begin{cases} g_i = \alpha_{i-1} f_{i-1} + \beta_i f_i + \gamma_{i+1} f_{i+1}, & i \geq 1 \\ g_0 = \beta_0 f_0 + \gamma_1 f_1 \end{cases}$$

Demonstração. Multiplicando por z ambos os membros de $f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i P_i(z)$, obtemos

$$g(z) = \sum_{i \geq 0} f_i z P_i(z)$$

Substituindo $zP_i(z)$ pela expressão dada por (2.9), temos que

$$\begin{aligned} \sum_{i \geq 0} g_i P_i(z) &= \sum_{i \geq 0} f_i (\alpha_i P_{i+1}(z) + \beta_i P_i(z) + \gamma_i P_{i-1}(z)) \\ &= (\beta_0 f_0 + \gamma_1 f_1) P_0(z) + \sum_{i \geq 1} (\alpha_{i-1} f_{i-1} + \beta_i f_i + \gamma_{i+1} f_{i+1}) P_i(z) \end{aligned}$$

e o resultado fica demonstrado pela unicidade da representação em série de Fourier no sistema de polinômios ortogonais $\{P_i\}_{i \geq 0}$. ■

Em [34] mostra-se que os coeficientes $h_{i,j}$ satisfazem a relação de recorrência

$$h_{i,j+1} = \frac{1}{\alpha_j} \left(\frac{\mu_{i+1}}{\mu_i} \alpha_i h_{i+1,j} + (\beta_i - \beta_j) h_{i,j} + \frac{\mu_{i-1}}{\mu_i} \gamma_i h_{i-1,j} - \gamma_j h_{i,j-1} \right), \quad i, j \geq 1 \quad (2.10)$$

Com o resultado da proposição anterior, podemos obter, de forma independente da utilizada em [34], uma relação de recorrência envolvendo os mesmos cinco coeficientes de Fourier $h_{i,j}$.

Proposição 2.3 *Definindo $h_{i,j}$ como sendo os coeficientes de Fourier do desenvolvimento em série $P_j(z)f(z) = \sum_{i \geq 0} h_{i,j} P_i(z)$, $j \geq 0$, pelo menos formalmente, e fazendo $h_{-1,j} = h_{j,-1} = 0$, $j \geq 0$, temos que*

$$h_{i,j+1} = \frac{1}{\alpha_j} (\alpha_{i-1} h_{i-1,j} + (\beta_i - \beta_j) h_{i,j} + \gamma_{i+1} h_{i+1,j} - \gamma_j h_{i,j-1}), \quad i, j \geq 0 \quad (2.11)$$

Demonstração. A partir da relação de recorrência (2.9), podemos escrever

$$P_{j+1}(z)f(z) = \frac{1}{\alpha_j} ((z - \beta_j)P_j(z) - \gamma_j P_{j-1}(z))f(z), \quad j \geq 1$$

e

$$P_1(z)f(z) = \frac{1}{\alpha_0} (z - \beta_0)f(z)$$

logo, aplicando a proposição anterior à função $zP_j(z)f(z)$ e a definição de $h_{i,j}$, obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{i \geq 0} h_{i,j+1} P_i(z) &= \frac{1}{\alpha_j} ((\beta_0 h_{0,j} + \gamma_1 h_{1,j}) P_0(z) + \sum_{i \geq 1} (\alpha_{i-1} h_{i-1,j} + \beta_i h_{i,j} + \gamma_{i+1} h_{i+1,j}) P_i(z) \\ &\quad - \beta_j \sum_{i \geq 0} h_{i,j} P_i(z) - \gamma_j \sum_{i \geq 0} h_{i,j-1} P_i(z)), \quad j \geq 1 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \sum_{i \geq 0} h_{i,1} P_i(z) &= \frac{1}{\alpha_0} ((\beta_0 h_{0,0} + \gamma_1 h_{1,0}) P_0(z) + \sum_{i \geq 1} (\alpha_{i-1} h_{i-1,0} + \beta_i h_{i,0} + \gamma_{i+1} h_{i+1,0}) P_i(z) \\ &\quad - \beta_0 \sum_{i \geq 0} h_{i,0} P_i(z)) \end{aligned}$$

e o resultado fica demonstrado igualando os coeficientes de ambos os membros nestas duas igualdades ■

Da teoria dos polinómios ortogonais, concretamente das propriedades dos coeficientes da relação de recorrência (2.9), podemos concluir que as duas relações (2.10) e (2.11) são equivalentes. De facto, das definições apresentadas em [24], podemos deduzir que

$$\alpha_i = \frac{k_i}{k_{i+1}}, \quad \beta_i = \frac{\tilde{k}_i}{k_i} - \frac{\tilde{k}_{i+1}}{k_{i+1}}, \quad \gamma_i = \frac{k_{i-1}\mu_i}{k_i\mu_{i-1}},$$

onde k_i e \tilde{k}_i são os coeficientes da representação

$$P_i(z) = k_i z^i + \tilde{k}_i z^{i-1} + \dots$$

Com estas fórmulas é imediato concluir que

$$\alpha_i \mu_{i+1} = \gamma_{i+1} \mu_i, \quad i \geq 0$$

e este resultado aplicado a (2.10) é suficiente para mostrar que esta equação é equivalente a (2.11).

A vantagem da relação (2.11) relativamente a (2.10) reside no facto de não envolver as quantidades μ_i . Se, para o caso dos polinómios ortogonais clássicos estas quantidades são bem conhecidas, ver [24], não apresentando a sua utilização qualquer problema, para a aplicação dos resultados a séries de polinómios mais gerais, este facto pode ter importância na implementação dos algoritmos. Esta vantagem é particularmente notória no último capítulo desta tese, onde se trata de generalizar os resultados obtidos para a aproximação de Frobenius-Padé, a séries de polinómios consideradas como generalizando as séries de Fourier.

Para construir um algoritmo de cálculo dos elementos $h_{i,j}$, baseado na relação de recorrência (2.11), é necessário notar que, devido à estrutura da relação, envolvendo os elementos

$$h_{i,j-1} \quad \begin{matrix} h_{i-1,j} \\ h_{i,j} \end{matrix} \quad h_{i,j+1} \quad , \quad \begin{matrix} h_{i+1,j} \end{matrix}$$

para calcular toda a coluna j até à linha $p+q$ (como requer o cálculo de $[p/q]_f^P(z)$), são necessários os valores dos elementos da coluna $j-1$ até à linha $p+q+1$. Assim, para alcançar os valores da coluna q temos de calcular todos os elementos $h_{i,j}$, $i = 0, \dots, p+2q-j$, $j = 0, \dots, q$

$$\begin{bmatrix} h_{0,0} & h_{0,1} & \cdots & h_{0,q-1} & h_{0,q} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ h_{p+q,0} & h_{p+q,1} & \cdots & h_{p+q,q-1} & h_{p+q,q} \\ h_{p+q+1,0} & h_{p+q+1,1} & \cdots & h_{p+q+1,q-1} & \\ \vdots & \vdots & & & \\ h_{p+2q-1,0} & h_{p+2q-1,1} & & & \\ h_{p+2q,0} & & & & \end{bmatrix}$$

Este facto revela outra diferença da aproximação de Frobenius-Padé, relativamente à aproximação de Padé: enquanto que na situação clássica, da aproximação de Padé para séries de potências, a construção do aproximante $[p/q]_f(z)$ de ordem $p+q+1$ envolve os coeficientes da série até à ordem $p+q$, o cálculo do aproximante de Frobenius-Padé da mesma ordem, envolve os coeficientes da série $f_i = h_{i,0}$, até à ordem $p+2q$.

Estas fórmulas podem ilustrar-se com exemplos, concretizando a família dos polinómios ortogonais envolvida. É comum na literatura, aparecerem referidas pela mesma designação, diversas famílias de polinómios ortogonais. Geralmente, tais polinómios, diferem apenas por uma constante de normalização. Os dados apresentados a seguir, nomeadamente os coeficientes da relação de recorrência associada a cada família de polinómios ortogonais, correspondem às designações e à normalização utilizada em [24]. Os dados seguintes, que se apresentam sem qualquer outra referência, são recolhidos de [24], excepto o caso dos polinómios de Bessel. Estes exemplos, com a normalização aqui apresentada, servem de referência para os exemplos de aplicação apresentados até ao final deste trabalho.

Exemplo 2.1 Os polinómios de Legendre $P_i(z)$, normalizados por $P_i(1) = 1$, $i \geq 0$, satisfazem a relação de recorrência (2.9), com

$$\begin{cases} \alpha_i = \frac{i+1}{2i+1}, & \beta_i = 0, & \gamma_i = \frac{i}{2i+1}, & i \geq 1 \\ \alpha_0 = 1, & \beta_0 = 0 & & \end{cases}$$

Logo, para (2.11) obtemos neste caso,

$$\begin{aligned} h_{i0} &= f_i, & i &= 0, \dots, p+2q \\ h_{i1} &= \frac{i+1}{2i+3}f_{i+1} + \frac{i}{2i-1}f_{i-1}, & i &= 1, \dots, p+2q-1 \\ h_{i,j+1} &= \frac{2j+1}{j+1} \left(\frac{i+1}{2i+3}h_{i+1,j} + \frac{i}{2i-1}h_{i-1,j} \right) - \frac{j}{j+1}h_{i,j-1}, & j &= 1, \dots, q-1 \\ & & i &= j+1, \dots, p+2q-j-1 \end{aligned}$$

Com a mesma normalização, os valores $\mu_i = \frac{2}{2i+1}$, $i \geq 0$ permitem reduzir o esforço de cálculo dos elementos da parte triangular superior das matrizes, conforme (2.8)

$$h_{i,j} = \frac{2i+1}{2j+1}h_{j,i}, \quad j = 1, \dots, q, \quad i = 0, \dots, j-1$$

Exemplo 2.2 Para os polinómios de Chebyshev $T_i(z)$, normalizados por $T_i(1) = 1$, a relação de recorrência é

$$\begin{cases} zT_i(z) = \frac{1}{2}(T_{i+1}(z) + T_{i-1}(z)), & i \geq 1 \\ T_0(z) = 1, \quad T_1(z) = z \end{cases}$$

Logo:

$$\begin{aligned} h_{i0} &= f_i, & i &= 0, \dots, p+2q \\ h_{i1} &= \frac{1}{2}(f_{i+1} + f_{i-1}), & i &= 1, \dots, p+2q-1 \\ h_{i,j+1} &= h_{i+1,j} + h_{i-1,j} - h_{i,j-1}, & j &= 1, \dots, q-1 \\ & & i &= j+1, \dots, p+2q-j-1 \\ h_{i,j} &= h_{j,i}, & j &= 1, \dots, q, \quad i = 0, \dots, j-1 \end{aligned}$$

Estes são dois casos particulares da classe de polinómios de Gegenbauer $C_i^{(\nu)}(z)$ correspondentes, respectivamente, a $\nu = 1/2$ e $\nu = 0$.

Exemplo 2.3 Os polinómios de Gegenbauer $C_i^{(\nu)}(z)$, $\nu > -1/2$, tais que $C_i^{(\nu)}(1) = \binom{i+2\nu-1}{i}$ se $\nu \neq 0$ e $C_0^{(0)}(1) = 1$, $C_i^{(0)}(1) = 2/i$, $i \geq 1$, definem-se pela relação de recorrência

$$\begin{cases} zC_i^{(\nu)}(z) = \frac{i+1}{2(i+\nu)}C_{i+1}^{(\nu)}(z) + \frac{(i+2\nu-1)}{2(i+\nu)}C_{i-1}^{(\nu)}(z), & i \geq 1 \\ C_0^{(\nu)}(z) = 1, & C_1^{(\nu)}(z) = 2\nu z \end{cases}$$

Neste caso, os coeficientes $h_{i,j}$ podem calcular-se pela recorrência

$$\begin{aligned} h_{i0} &= f_i, & i &= 0, \dots, p+2q \\ h_{i1} &= \nu \left(\frac{i+2\nu}{i+1+\nu} f_{i+1} + \frac{i}{i-1+\nu} f_{i-1} \right), & i &= 1, \dots, p+2q-1 \\ h_{i,j+1} &= \frac{j+\nu}{j+1} \left(\frac{i+2\nu}{i+1+\nu} h_{i+1,j} + \frac{i}{i-1+\nu} h_{i-1,j} \right) - \frac{j-1+2\nu}{j+1} h_{i,j-1}, & j &= 1, \dots, q-1 \\ & & i &= j+1, \dots, p+2q-j-1 \end{aligned}$$

e

$$h_{i,j} = \frac{i!(i+\nu)\Gamma(j+2\nu)}{j!(j+\nu)\Gamma(i+2\nu)} h_{j,i}, \quad j = 1, \dots, q, \quad i = 0, \dots, j-1$$

Esta classe de polinómios, por sua vez, é um caso particular dos polinómios de Jacobi, $P_i^{(\alpha,\beta)}(z)$, correspondente a $\alpha = \beta$.

Exemplo 2.4 Com a normalização $P_i^{(\alpha,\beta)}(1) = \binom{i+\alpha}{i}$, os polinómios de Jacobi, $P_i^{(\alpha,\beta)}(z)$, $\operatorname{Re}(\alpha), \operatorname{Re}(\beta) > -1$, definem-se pela relação de recorrência (2.9) com

$$\alpha_i = \frac{2(i+1)(i+\gamma)}{(2i+\gamma)(2i+\gamma+1)}, \quad \beta_i = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{(2i+\gamma-1)(2i+\gamma+1)}, \quad \gamma_i = \frac{2(i+\alpha)(i+\beta)}{(2i+\gamma-1)(2i+\gamma)}, \quad i \geq 0$$

com $\gamma = \alpha + \beta + 1$

Exemplo 2.5 Os polinómios de Laguerre $L_i^{(\alpha)}(z)$, normalizados com coeficiente principal $k_i = \frac{(-1)^i}{i!}$, satisfazem a relação de recorrência

$$\begin{cases} zL_i^{(\alpha)}(z) = -(i+1)L_{i+1}^{(\alpha)}(z) + (2i+\alpha+1)L_i^{(\alpha)}(z) - (i+\alpha)L_{i-1}^{(\alpha)}(z), & i \geq 1 \\ L_0^{(\alpha)}(z) = 1, & L_1^{(\alpha)}(z) = 1 + \alpha - z \end{cases}$$

Com $\alpha = 0$, obtemos

$$\begin{aligned} h_{i,1} &= (i+1)f_{i+1} - 2if_i + i f_{i-1}, & i &\geq 1 \\ h_{i,j+1} &= \frac{i+1}{j+1} h_{i+1,j} - 2\frac{i-j}{j+1} h_{i,j} + \frac{i}{j+1} h_{i-1,j} - \frac{j}{j+1} h_{i,j-1}, & i, j &\geq 1 \end{aligned}$$

Exemplo 2.6 Os polinómios de Hermite, $H_i(z)$ tais que $\mu_i = i!2^i\sqrt{\pi}$, definem-se pela relação de recorrência

$$\begin{cases} zH_i(z) = \frac{1}{2}H_{i+1}(z) + iH_{i-1}(z), & i \geq 1 \\ H_0(z) = 1, & H_1(z) = 2z \end{cases}$$

Encontramos para h_{ij}

$$\begin{aligned} h_{i1} &= (i+1)f_{i+1} + \frac{1}{2} f_{i-1}, & i &\geq 1 \\ h_{i,j+1} &= 2(i+1)h_{i+1,j} + h_{i-1,j} - 2j h_{i,j-1}, & i, j &\geq 1 \end{aligned}$$

Exemplo 2.7 Para os polinómios de Bessel $Y_i^{(\alpha)}(z)$, com norma $\mu_i = \frac{2(-1)^{i+1}i!}{(2i+\alpha+1)(\alpha+1)^i}$, temos [11]

$$\begin{cases} zY_i^{(\alpha)}(z) = \frac{2}{(2i+\alpha)_3} \left[(i+\alpha+1)(2i+\alpha)Y_{i+1}^{(\alpha)}(z) - \alpha(2i+\alpha+1)Y_i^{(\alpha)}(z) - i(2i+\alpha+2)Y_{i-1}^{(\alpha)}(z) \right], \\ Y_0^{(\alpha)}(z) = 1, \quad Y_1^{(\alpha)}(z) = \frac{\alpha+2}{2}z + 1 \end{cases},$$

com $\alpha = 0$ obtemos

$$\begin{aligned} h_{i1} &= \frac{-1}{2i+3}f_{i+1} + \frac{1}{2i-1}f_{i-1}, \quad i \geq 1 \\ h_{i,j+1} &= h_{i,j-1} - (2j+1) \left[\frac{h_{i+1,j}}{2i+3} - \frac{h_{i-1,j}}{2i-1} \right], \quad i, j \geq 1 \end{aligned}$$

2.2.2 Coeficientes de linearização

Analisando (2.2) vemos que se tivermos uma forma simples de representar o produto $P_i(z)P_j(z)$ na própria base $\{P_i(z)\}_{i \geq 0}$, tal propriedade deve produzir uma forma simples de calcular os valores $h_{i,j}$. Sendo $P_i(z)$, $i \geq 0$ polinómios ortogonais, é sabido que satisfazem uma lei de multiplicação [28]

$$P_i(z)P_j(z) = \sum_{k=|i-j|}^{i+j} d_{ijk}P_k(z) \quad (2.12)$$

onde d_{ijk} constituem os chamados *coeficientes de linearização*. Substituindo em (2.2), obtemos

$$\begin{aligned} h_{i,j} &= \frac{1}{\mu_i} \sum_{k=|i-j|}^{i+j} d_{ijk} \langle u, P_k f \rangle \\ &= \frac{1}{\mu_i} \sum_{k=|i-j|}^{i+j} d_{ijk} \mu_k f_k, \quad i, j \geq 0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

Exemplo 2.8 Um caso particularmente simples, resulta da lei de multiplicação dos polinómios de Chebyshev. Se $P_i(z) = T_i(z)$, $i \geq 0$ são os polinómios do exemplo 2.2, então

$$T_i(z)T_j(z) = \frac{1}{2}(T_{|i-j|}(z) + T_{i+j}(z)),$$

ou seja $d_{i,j,|i-j|} = d_{i,j,i+j} = 1/2$ e $d_{i,j,k} = 0$, $|i-j| < k < i+j$. Logo, se $i \geq j$

$$h_{i,j} = \frac{1}{2\mu_i} (\mu_{i-j}f_{i-j} + \mu_{i+j}f_{i+j}) = \begin{cases} \frac{1}{2}(f_{i-j} + f_{i+j}), & i \neq j \geq 1 \\ \frac{1}{2}(2f_0 + f_{2i}), & i = j \geq 1 \\ f_i, & j = 0 \\ \frac{1}{2}f_j, & i = 0 \end{cases}$$

Geralmente, em (2.12) temos uma soma com mais coeficientes não nulos, do que no caso de Chebyshev, e expressões para os coeficientes d_{ijk} , que podem envolver de forma não elementar os índices i, j, k . Este facto desencoraja qualquer tentativa de utilização directa destas expressões para calcular numericamente os coeficientes $h_{i,j}$ utilizando (2.13), como se verifica com os exemplo seguintes.

Exemplo 2.9 Para os polinómios de Gegenbauer $C_i^{\nu}(z)$, referidos no exemplo 2.3, é dada a fórmula [1]

$$C_i^{\nu}(z)C_j^{\nu}(z) = \sum_{k=0}^{\min(i,j)} \frac{(i+j+\nu-2k)(\nu)_k(\nu)_{i-k}(\nu)_{j-k}(2\nu)_{i+j-k}}{(i+j+\nu-k)(\nu)_{i+j-k}(2\nu)_{i+j-2k}} \cdot \frac{(i+j-2k)!}{k!(i-k)!(j-k)!} C_{i+j-2k}^{\nu}(z), \quad i, j \geq 1$$

Exemplo 2.10 No caso dos polinómios de Hermite, com a definição do exemplo 2.6,

$$H_i(z)H_j(z) = \sum_{k=0}^{\min(i,j)} 2^k k! \binom{i}{k} \binom{j}{k} H_{i+j-2k}(z)$$

Exemplo 2.11 Para os coeficientes de linearização do produto dos polinómios de Laguerre, referidos no exemplo 2.5, em termos de uma soma hipergeométrica [28],

$$L_i^{(\alpha)}(z)L_j^{(\alpha)}(z) = \sum_{k=|i-j|}^{i+j} (-2)^{i+j-k} \frac{\binom{k}{i} \binom{k}{j} \binom{i+j}{k}}{\binom{i+j}{i}} \cdot {}_3F_2 \left(\begin{matrix} k+\alpha+1, (k-i-j)/2, (k-i-j+1)/2 \\ k-i+1, k-j+1 \end{matrix} \middle| 1 \right) L_k^{(\alpha)}(z), \quad i, j \geq 1$$

Por outro lado, o cálculo destes coeficientes de linearização, pode fazer-se por recorrência, utilizando propriedades dos polinómios. Os polinómios de Jacobi, de Laguerre, de Hermite e de Bessel, constituem os chamados polinómios ortogonais clássicos. Estes polinómios satisfazem um conjunto de propriedades bem conhecidas, de entre as quais [28]:

A relação de recorrência já referida em (2.9) e que, por uma questão de conveniência de notação se pode escrever na forma

$$\begin{aligned} zP_i(z) &= \xi_0 P_{i-1}(z) + \xi_1 P_i(z) + \xi_2 P_{i+1}(z), \quad i \geq 0 \\ P_{-1}(z) &= 0, \quad P_0(z) = 1 \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde $\xi_0 = \gamma_i \neq 0$, $\xi_1 = \beta_i$ e $\xi_2 = \alpha_i$ são funções do índice i e não dependem de z ;

A equação diferencial

$$\sigma P_i''(z) + \tau P_i'(z) + \lambda_i P_i(z) = 0 \quad (2.15)$$

σ e τ são polinómios em z , com $\partial\sigma \leq 2$ e $\partial\tau = 1$, que não dependem de i e

$$\lambda_i = -\frac{1}{2}i((i-1)\sigma'' + 2\tau'), \quad i \geq 0;$$

A relação de estrutura

$$\sigma P_i'(z) = d_0 P_{i-1}(z) + d_1 P_i(z) + d_2 P_{i+1}(z), \quad i \geq 0 \quad (2.16)$$

d_0, d_1 e d_2 são funções de i .

Esta notação é utilizada no teorema seguinte

Teorema 2.1 (Lewanowicz,1996) [28] *Os coeficientes de linearização em*

$$P_i(z)P_j(z) = \sum_{k=|i-j|}^{i+j} d_{ijk}P_k(z)$$

satisfazem a relação de recorrência

$$A_0\mu_{k-1}d_{i,j,k-1} + A_1\mu_k d_{i,j,k} + A_2\mu_{k+1}d_{i,j,k+1} = 0, \quad k = i+j, \dots, |i-j|+1 \quad (2.17)$$

com as condições iniciais

$$\begin{aligned} d_{i,j,i+j+1} &= 0 \\ d_{i,j,i+j} &= \frac{a_i a_j}{a_{i+j}}, \quad i, j \geq 0 \end{aligned} \quad (2.18)$$

onde a_i é o coeficiente principal de $P_i(z)$ na representação $P_i(z) = a_i z^i + \dots$ e $\mu_k = \langle u, P_k P_k \rangle$ e, utilizando a notação de (2.14)-(2.16),

$$A_m = (\tau' - \sigma'' - \lambda_k)B_m + (\lambda_i - \lambda_j)^2 C_m, \quad m = 0, 1, 2$$

com

$$\begin{aligned} B_m &= \xi_m(\sigma''(\lambda_{k+m-1} - \lambda_i - \lambda_j) - \tau'\lambda_{k+m-1}) + d_m(\lambda_{k+m-1} - 2\lambda_i - 2\lambda_j) \\ &\quad + \delta_{m1}(\sigma'(0)(\lambda_k - \lambda_i - \lambda_j) - \tau(0)\lambda_k), \quad m = 0, 1, 2 \end{aligned}$$

e

$$C_m = \xi_m(\sigma'' - \tau') - d_m + \delta_{m1}(\sigma'(0) - \tau(0)), \quad m = 0, 1, 2$$

As expressões dos polinómios σ e τ , bem como dos coeficientes a_i , ξ_m , d_m e dos valores μ_k são conhecidas para os polinómios ortogonais clássicos, i.e., para as famílias de polinómios de Bessel, Hermite, Laguerre e Jacobi [28].

Exemplo 2.12 *Considerando os polinómios de Jacobi $P_k^{(\alpha,\beta)}(z)$, referidos no exemplo 2.4, é sabido que [28]*

$$\begin{aligned} \mu_i &= \frac{2^i \Gamma(i+\alpha+1) \Gamma(i+\beta+1)}{(2i+\gamma)! i! \Gamma(i+\gamma)}, \quad i \geq 0, & \gamma &= \alpha + \beta + 1 \\ \sigma &= z^2 - 1 & \tau &= (\gamma+1)z + \delta, \quad \delta = \alpha - \beta \\ \lambda_k &= -k(k+\gamma), \quad k \geq 0 \\ a_k &= \frac{(-1)^k (\gamma+k)_k}{2^k k!} \\ \xi_0 &= \frac{2(k+\alpha)(k+\beta)}{(2k+\gamma-1)(2k+\gamma)}, & d_0 &= -(k+\gamma)\xi_0 \\ \xi_1 &= -\frac{\alpha^2 - \beta^2}{(2k+\gamma-1)(2k+\gamma+1)}, & d_1 &= \frac{2k(k+\gamma)}{\gamma-1} \xi_1 \\ \xi_2 &= \frac{2(k+1)(k+\gamma)}{(2k+\gamma)(2k+\gamma+1)}, & d_2 &= k\xi_2 \end{aligned}$$

Logo

$$\begin{aligned} A_m &= (k+1)(k+\gamma-1)B_m + (\lambda_i - \lambda_j)^2 C_m \\ B_m &= ((1-\gamma)\lambda_{k+m-1} - 2(\lambda_i + \lambda_j))\xi_m + (\lambda_{k+m-1} - 2(\lambda_i + \lambda_j))d_m - \delta\lambda_k\delta_{m1} \\ C_m &= (1-\gamma)\xi_m - d_m - \delta\delta_{m1} \end{aligned}$$

e os valores iniciais

$$\begin{aligned} d_{i,j,i+j+1} &= 0 \\ d_{i,j,i+j} &= \frac{(\gamma+i)_i(\gamma+j)_j(i+j)!}{i!j!(\gamma+i+j)_{i+j}}, \quad i, j \geq 0 \end{aligned}$$

No caso em que $\alpha = \beta$, obtemos para a classe de polinômios de Gegenbauer do exemplo 2.3

$$C_k^{(\nu)}(z) = \frac{(2\nu)_k}{(\nu + \frac{1}{2})_k} P_k^{(\alpha, \alpha)}(z), \quad \nu = \alpha + \frac{1}{2} \quad (2.19)$$

uma simplificação notável nas fórmulas de recorrência.

Proposição 2.4 Se $P_k(z) = C_k^{(\nu)}(z)$ são os polinômios de Gegenbauer (2.19), então para $i \geq j$

$$h_{ij} = \frac{\mu_{i+j}}{\mu_i} d_{i,j,i+j} [f_{i+j} + b_{i+j-1} [f_{i+j-2} + \cdots + b_{i-j+3} [f_{i-j+2} + b_{i-j+1} f_{i-j}] \cdots]], \quad j \geq 1, i \geq j$$

com as quantidades auxiliares

$$\begin{aligned} b_k &= \frac{4(k+2\nu)B_{k+1}}{(2k+2\nu+1)B_{k+2\nu-1}}, \quad k = i-j+1, i-j+3, \dots, i+j-1 \\ B_k &= [k^2 - (i-j)^2][k^2 - (i+j+2\nu)^2] \end{aligned}$$

Demonstração. Com $\alpha = \beta$, obtemos $\xi_1 = 0$ e $\delta = 0$, logo, também $d_1 = 0$ e $B_1 = C_1 = A_1 = 0$. Na relação de recorrência (2.17) fica

$$\begin{aligned} \mu_{k-1} d_{i,j,k-1} &= -\frac{A_2}{A_0} \mu_{k+1} d_{i,j,k+1}, \quad k = |i-j|+1, \dots, i+j \\ A_2 &= -\frac{(k+1)(k+2\nu-1)(k+2\nu)}{(k+\nu)(2k+2\nu+1)} \left[(k+1)^2 - (i-j)^2 \right] \left[(k+1)^2 - (i+j+2\nu)^2 \right] \\ A_0 &= \frac{(k+1)(2k+2\nu-1)}{4(k+\nu)} \left[(k+2\nu-1)^2 - (i-j)^2 \right] \left[(k+2\nu-1)^2 - (i+j+2\nu)^2 \right] \end{aligned}$$

Após substituição e simplificação, verifica-se que

$$\frac{A_2}{A_0} = -b_k$$

logo

$$\mu_{k-1} d_{i,j,k-1} = b_k \mu_{k+1} d_{i,j,k+1}$$

Uma vez que $d_{i,j,i+j+1} = 0$, então todos os coeficientes $d_{i,j,k}$ são nulos se k tem a paridade de $i+j+1$, e para os outros

$$\mu_{i+j-2k} d_{i,j,i+j-2k} = b_{i+j-2k+1} \mu_{i+j-2k+2} d_{i,j,i+j-2k+2}, \quad k = 1, \dots, j$$

Logo

$$\begin{aligned} h_{ij} &= \frac{1}{\mu_i} \sum_{k=|i-j|}^{i+j} \mu_k f_k d_{i,j,k}, \quad i, j \geq 0 \\ &= \frac{1}{\mu_i} \sum_{k=0}^j f_{i+j-2k} \mu_{i+j-2k} d_{i,j,i+j-2k}, \quad j \geq 0, \quad i \geq j \end{aligned}$$

e o resultado segue pondo em evidência os factores comuns ■

Conhecidos os valores b_k e

$$\hat{d}_{i,j,i+j} = \frac{\mu_{i+j}}{\mu_i} d_{i,j,i+j},$$

com esta fórmula os valores $h_{i,j}$ calculam-se com apenas j multiplicações e j adições. Os coeficientes $\hat{d}_{i,j,i+j}$ podem calcular-se por recorrência sobre i ou sobre j . Da definição resulta que

$$\begin{aligned} d_{000} &= 1 \\ d_{i+1,j,i+j+1} &= \frac{(2v+i+1)_{i+1} (2v+j)_j (i+j+1)!}{(i+1)! j! (2v+i+j+1)_{i+j+1}}, \quad i, j \geq 0 \end{aligned}$$

onde $(a)_m$ é o símbolo de Pochhammer,

$$\begin{aligned} (a)_0 &= 1 \\ (a)_m &= a(a+1) \cdots (a+m-1), \quad m \geq 1 \end{aligned}$$

Facilmente se verifica que

$$(a+1)_{m+1} = \frac{(a+m)(a+m+1)}{a} (a)_m, \quad a \neq 0, \quad m \geq 0$$

E com esta regra concluímos que

$$\begin{aligned} \hat{d}_{i,j,i+j} &= \frac{(v+i)(v+i+j-1/2)}{(v+i-1/2)(v+i+j)} \frac{\mu_{i+j-1}}{\mu_{i-1}} d_{i-1,j,i+j-1} \\ &= \left(1 + \frac{j}{(2v+2i-1)(v+i+j)}\right) \hat{d}_{i-1,j,i+j-1}, \quad i \geq 1, \quad j \geq 0 \\ \hat{d}_{j,j,2j} &= \frac{(v+j)(v+j-1)(v+2j-1/2)(v+2j-3/2)}{(v+2j)(v+2j-1)(2v+j-1)j} \hat{d}_{j-1,j-1,2j-2}, \quad j \geq 1 \end{aligned}$$

Estas fórmulas justificam o seguinte algoritmo, para o caso em que a família de polinómios pertence à classe de Gegenbauer:

Algoritmo 2.1

Dados: $p, q \in \mathbb{N}$ e $\{f_i\}_{i=0}^{p+2q}$

Calcula: $H = (h_{i,j})_{i=0,j=0}^{p+q,q}$

Parâmetros: v

Quantidades auxiliares:

$$B_{i,j,k} = [k^2 - (i-j)^2][k^2 - (i+j+2v)^2]$$

$$b_{i,j,k} = \frac{4(k+2v)B(i,j,k+1)}{(2k+2v+1)B(i,j,k+2v-1)}$$

Valores iniciais: $d_{00} = 1$

Calcular:

$$h_{i,0} = f_i, \quad i = 0, p+q \quad (\text{coluna } 0)$$

$$h_{0,j} = f_j, \quad j = 1, q \quad (\text{linha } 0)$$

Para $j = 1, q$

$$d_{j,j} = \frac{(v+j)(v+j-1)(v+2j-1/2)(v+2j-3/2)}{(v+2j)(v+2j-1)(2v+j-1)j} d_{j-1,j-1}$$

$$S = f_0$$

Para $k = 1, j$

$$S = f_{2k} + b_{j,j,2k-1} S$$

Fim k

$$h_{j,j} = d_{j,j} S$$

Para $i = j+1, p+q$

$$d_{i,j} = \left(1 + \frac{j}{(2v+2i-1)(v+i+j)}\right) d_{i-1,j}$$

$$S = f_{i-j}$$

Para $k = 1, j$

$$S = f_{2k+i-j} + b_{i,j,2k+i-j-1} S$$

Fim k

$$h_{i,j} = d_{i,j} S$$

Fim i

Para $i = j+1, q$

$$h_{j,i} = \frac{\Gamma(i+2v)j!(j+v)}{\Gamma(j+2v)i!(i+v)} h_{i,j}$$

Fim i

Fim j

Este algoritmo calcula cada elemento $h_{i,j}$ com j multiplicações, o que totaliza $O(\frac{1}{6}q^2(3p+q))$ multiplicações se for necessário calcular toda a tabela $H = H^{[p/q]}$. Cada uma destas multiplicações envolve um factor $b_{i,j,k}$ que é uma função racional dos índices i, j e k . São ainda necessárias $O(\frac{1}{2}q(2p+q+1))$ operações para implementar a relação de recorrência que envolve os coeficientes $d_{i,j,i+j}$. No algoritmo de [34], baseado na relação de recorrência (2.10), calculam-se os valores de H , e mais as quantidades auxiliares, com $5q(p+q)$ multiplicações. Podemos concluir que, pelo menos

sob o ponto de vista do volume de cálculos, o algoritmo de recorrência é vantajoso se se pretende calcular toda a tabela H . Este algoritmo alternativo, poderá ter vantagem se apenas se pretende calcular alguns dos valores $h_{i,j}$. No capítulo seguinte, apresenta-se um algoritmo de resolução dos sistemas de Frobenius-Padé, onde a factorização LU das matrizes $H^{[p/q]}$ é efectuada a partir dos valores de apenas uma das suas colunas e duas das suas linhas.

Na secção seguinte, desenvolve-se um algoritmo que, explorando a relação entre os sistemas de Frobenius-Padé associados a dois aproximantes consecutivos da mesma linha, permite calcular recursivamente a factorização LU das matrizes, e calcular recursivamente os coeficientes dos aproximantes de uma mesma linha.

2.3 Cálculo recursivo dos aproximantes de uma mesma linha por decomposição LU da matriz H

A partir das fórmulas para a e b na proposição 2.1 podemos obter uma relação de recorrência para aproximantes na mesma linha da TFP. Consideremos p um inteiro fixo, e suponhamos que para algum inteiro q , a factorização LU da matriz $H_q = H^{[p/q]}$ está calculada e que o sistema de Frobenius-Padé $H_q \cdot b_q = -h_q$, com $h_q = h^{[p/q]}$ como na proposição 2.1, já foi resolvido. Com o resultado da proposição seguinte, obtemos uma factorização triangular da matriz H_{q+1} com o custo computacional de resolver um sistema triangular inferior de equações lineares.

Proposição 2.5 Dado $p \geq 0$, sejam $H_q = L_q \cdot U_q$, $b_q = (b_0, \dots, b_{q-1})^T$ e $y_q = (y_0, \dots, y_{q-1})^T$ tais que

$$\begin{cases} L_q \cdot y_q = -h_q \\ U_q \cdot b_q = y_q \end{cases}$$

com $H_q = H^{[p/q]} = [h_{ij}]_{i=p+1, j=0}^{p+q, q-1}$ e $h_q = h^{[p/q]} = [h_{iq}]_{i=p+1}^{p+q}$ para algum $q = 1, 2, \dots$. Então

$$H_{q+1} = \begin{bmatrix} L_q & 0 \\ x_q^T & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_q & -y_q \\ 0 & e_{p+q+1}^{[p/q]} \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

onde

$$e_{p+q+1}^{[p/q]} = l_q^T \cdot b_q + h_{p+q+1, q}, \quad l_q = [h_{p+q+1, j}]_{j=0}^{q-1},$$

constitui o primeiro termo do erro em (2.3) e x_q definido por

$$U_q^T \cdot x_q = l_q.$$

Demonstração. Partindo da definição (2.6) temos

$$H_{q+1} = H^{[p/q+1]} = \begin{bmatrix} H_q & h_q \\ l_q^T & h_{p+q+1, q} \end{bmatrix}$$

logo

$$\begin{aligned} H_{q+1} &= \begin{bmatrix} L_q \cdot U_q & -L_q \cdot y_q \\ l_q^T & h_{p+q+1, q} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} L_q & 0 \\ l_q^T \cdot U_q^{-1} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_q & -y_q \\ 0 & h_{p+q+1, q} + l_q^T \cdot U_q^{-1} \cdot y_q \end{bmatrix} \end{aligned}$$

e (2.20) segue imediatamente de $l_q^T \cdot U_q^{-1} = x_q^T$ e $U_q^{-1} \cdot y_q = b_q$ ■

Desta proposição obtemos dois corolários, o primeiro fornece uma condição equivalente à condição de normalidade para o aproximante $[p/q+1]_f^P(z)$.

Corolário 2.2 *Se $H_q = H^{[p/q]}$ é uma matriz regular e $e_{p+q+1}^{[p/q]} \neq 0$, então $H_{q+1} = H^{[p/q+1]}$ é uma matriz regular e*

$$\det(H^{[p/q+1]}) = \det(H^{[p/q]}) * e_{p+q+1}^{[p/q]} = f_{p+1} * \prod_{j=1}^q e_{p+j+1}^{[p/j]}$$

Demonstração. A partir de (2.20) obtemos

$$\det(H_{q+1}) = \det(H_q) * e_{p+q+1}^{[p/q]}$$

e o resultado obtém-se por indução sobre k e o facto de $H_1 = [h_{p+1,0}]$ e $h_{p+1,0} = f_{p+1}$. ■

O corolário seguinte estabelece a forma de cálculo do vector b_{q+1} dos coeficientes do denominador $D^{[p/q+1]}(z) = P_{q+1}(z) + \sum_{j=0}^q b_{q+1,j} P_j(z)$ de $[p/q+1]_f^P(z)$.

Corolário 2.3 *Se $e_{p+q+1}^{[p/q]} \neq 0$, definindo*

$$h_{q+1} = \begin{bmatrix} h^{(1)} \\ h_{p+q+1,q+1} \end{bmatrix}, h^{(1)} = \begin{bmatrix} h_{p+1,q+1} \\ \vdots \\ h_{p+q,q+1} \end{bmatrix}$$

obtemos

$$y_{q+1} = \begin{bmatrix} y^{(1)} \\ \Psi \end{bmatrix}, b_{q+1} = \begin{bmatrix} b^{(1)} \\ \beta \end{bmatrix}$$

resolvendo os dois sistemas triangulares

$$\begin{cases} L_q \cdot y^{(1)} = -h^{(1)} \\ \Psi = -x_q^T \cdot y^{(1)} - h_{p+q+1,q+1} \end{cases}, \begin{cases} \beta = \Psi / e_{p+q+1}^{[p/q]} \\ U_q \cdot b^{(1)} = y^{(1)} + \beta * y_q \end{cases}$$

Demonstração. É imediata após substituição em

$$\begin{cases} L_{q+1} \cdot y_{q+1} = -h_{q+1} \\ U_{q+1} \cdot b_{q+1} = y_{q+1} \end{cases}$$

■

Calculado o vector b_{q+1} dos coeficientes do denominador, com a notação da proposição 2.1, o vector $a_{q+1} = (a_{q+1,0}, \dots, a_{q+1,p})^T$ dos coeficientes do numerador, $N^{[p/q+1]}(z) = \sum_{j=0}^p a_{q+1,j} P_j(z)$ do aproximante $[p/q+1]_f^P(z)$, calcula-se com o produto matriz-vector

$$a_{q+1} = G^{[p/q+1]} \cdot b_{q+1} + g^{[p/q+1]}.$$

Com os pressupostos do corolário anterior, estes resultados podem iterar-se para calcular os vectores $(b_{q+k})_{k=1}^J$ e $(a_{q+k})_{k=1}^J$ dos coeficientes, respectivamente dos denominadores $D^{[p/q+k]}(z)$ e

dos numeradores $N^{[p/q+k]}(z)$, da sucessão de aproximantes $[p/q+k]_f^P(z)$, $k = 1, 2, \dots, J$, sendo J um inteiro positivo dado.

A implementação destas fórmulas num algoritmo pode enquadrar-se em duas situações distintas:

$q = 1$ Para calcular os primeiros elementos, $[p/k]_f^P(z)$, $k = 1, 2, \dots, J+1$, de uma determinada linha p da tabela. Neste caso os valores iniciais L e U são as matrizes 1×1 , $L = [1]$, $U = [f_{p+1}]$, logo $y = -[h_{p+1,1}]$ e se $h_{p+1,0} = f_{p+1} \neq 0$ então $b_1 = -h_{p+1,1}/h_{p+1,0}$. Os restantes dados, neste caso os coeficientes $h_{i,j}$, $i = 0, \dots, p+J+1$, $j = 0, \dots, J+1$, podem calcular-se, a partir dos primeiros $p+2J+2$ coeficientes da série, utilizando um dos processos apresentados na secção anterior.

$q > 1$ Atendendo aos pressupostos do início desta secção, se os coeficientes do aproximante $[p/q]_f^P(z)$ foram calculados via factorização LU da matriz FP associada, para o que se poderá utilizar um algoritmo rápido apresentado no capítulo seguinte, então os aproximantes seguintes da mesma linha, poderão calcular-se com este algoritmo, reduzindo o esforço computacional na factorização das matrizes. Esta utilização do algoritmo poderá ser necessária, se uma sucessão de aproximantes, iniciada com $q = 1$, quebra com um valor singular, i.e. se $e_{p+k+1}^{[p/k+1]} = 0$ para algum $k > 0$. Neste caso, esta utilização do algoritmo permite reinicializar o cálculo dos aproximantes da linha p , a partir de uma coluna $q > k+1$ tal que $H^{[p/q]}$ é uma matriz regular.

Em qualquer caso, verifica-se que o conjunto de coeficientes da série, necessário para calcular os aproximantes $[p/q+k]_f^P(z)$, $k = 1, \dots, J$ é $\{f_i\}_{i=0}^{p+2q+2J}$ ou seja, o mesmo conjunto de coeficientes necessário para calcular a matriz $H^{[p/q+J]}$ e calcular os coeficientes do aproximante $[p/q+J]_f^P(z)$ resolvendo o sistema associado.

Para a implementação do algoritmo seguinte, é suposto estarem disponíveis rotinas para calcular todas as quantidades auxiliares, a saber: os coeficientes $h_{i,j}$, $i = 0, \dots, p+q+J$, $j = 0, \dots, q+J$, para o que se pode utilizar um dos processos apresentados na secção anterior; para o caso $q > 1$, as matrizes $\{L, U\}$ tais que $H^{[p/q]} = L \cdot U$, para o que se pode utilizar uma rotina geral de decomposição LU ou, como se mostra no capítulo seguinte, utilizar um algoritmo rápido de decomposição LU baseado na estrutura da matriz $H^{[p/q]}$, com vantagens sob o ponto de vista do volume de cálculos a efectuar; a resolução do sistema de Frobenius-Padé $H^{[p/q]} \cdot b_q = -h^{[p/q]}$, utilizando uma rotina de resolução de sistemas triangulares, com as matrizes L e U .

Algoritmo 2.2

Dados: $p, q, J \in \mathbb{N}$, e $\{f_i\}_{i=0}^{p+2q+2J}$

Calcula: $[p/q+k]_f^P(z) = \frac{N^{[p/q+k]}(z)}{D^{[p/q+k]}(z)}$, $k = 1, \dots, J$

Cálculos auxiliares: $\{h_{i,j}\}_{i=0, j=0}^{p+q+J, q+J}$
 $\{L, U\} : H^{[p/q]} = L \cdot U$
 $\{b_q, y\} : L \cdot y = -h^{[p/q]}, U \cdot b_q = y$

Calcular:

Para $k = 1, J$

$$l = \{h_{p+q+k,j}\}_{j=0}^{q+k-2}$$

$$e_k = l^T \cdot b_{q+k-1} + h_{p+q+k,q+k-1}$$

Se $e_k = 0$ então " $e_{p+q+k}^{[p/q+k-1]}$ é nulo" e termina

Resolver $U^T \cdot x = l$

$$h^{(1)} = \{h_{i,q+k}\}_{i=p+1}^{p+q+k-1}$$

Resolver $L \cdot y^{(1)} = -h^{(1)}$

$$\psi = -x^T \cdot y^{(1)} - h_{p+q+k,q+k}$$

$$\beta = \psi/e_k$$

Resolver $U \cdot b^{(1)} = y^{(1)} + \beta * y$

$$L = \begin{bmatrix} L & 0 \\ x^T & 1 \end{bmatrix}, U = \begin{bmatrix} U & -y \\ 0 & e_k \end{bmatrix}, y = \begin{bmatrix} y^{(1)} \\ \psi \end{bmatrix}$$

$$b_{q+k} = \begin{bmatrix} b^{(1)} \\ \beta \end{bmatrix}$$

$$a_{q+k} = \begin{bmatrix} h_{0,0} & \cdots & h_{0,q+k-1} \\ \vdots & & \vdots \\ h_{p,0} & \cdots & h_{p,q+k-1} \end{bmatrix} \cdot b_{q+k} + \begin{bmatrix} h_{0,q+k} \\ \vdots \\ h_{p,q+k} \end{bmatrix}$$

Fim k

Resultados: $N^{[p/q+k]} = \sum_{i=0}^p a_{q+k,i} P_i, k = 1, J$
 $D^{[p/q+k]} = \sum_{i=0}^{q+k-1} b_{q+k,i} P_i + P_{q+k}, k = 1, J$
 $D^{[p/q+k]} f - N^{[p/q+k]} = e_k P_{p+q+k+1} + O(P_{p+q+k+2}), k = 1, J$

Analisando o algoritmo, verifica-se que cada iteração k necessita da resolução de três sistemas triangulares de equações lineares, de dois produtos de vectores e de um produto de um vector por uma constante. Em termos de volume de aritmética, isto significa cerca de $\frac{3}{2}(q+k+1)(q+k-\frac{2}{3})$ multiplicações na iteração k , necessárias para calcular os coeficientes do denominador $D^{[p/q+k]}(z)$. A este valor deve acrescentar-se $(p+1)(q+k)$ multiplicações, necessárias para calcular os $p+1$ coeficientes do numerador $N^{[p/q+k]}(z)$. No total, verifica-se que com cerca de $\frac{1}{2}J((J+q)^2 + (p+q)(J+2q))$ multiplicações, calculam-se os coeficientes dos J aproximantes $[p/q+1]_f^p(z), \dots, [p/q+J]_f^p(z)$.

Implementado com $q = 1$, este algoritmo calcula os coeficientes dos aproximantes da linha p , desde $[p/2]_f^p(z)$ até $[p/J+1]_f^p(z)$ (se $\det(H^{[p/J+1]}) \neq 0$), com o total de cerca de $\frac{1}{2}J^2(J+3+p)$ multiplicações. No capítulo 4, apresenta-se um algoritmo recursivo, para calcular o mesmo conjunto de aproximantes, com $O(J^2)$ multiplicações, o que é, sob este ponto de vista, claramente vantajoso.

Em [34] propõe-se um algoritmo, designado por *algoritmo de tipo-Frobenius* que, a partir do conjunto dos primeiros $2M+1$ coeficientes da série, calcula os coeficientes dos aproximantes $[m/n]_f^p(z)$ tais que $m+2n \geq 2M$ com cerca de $\frac{5}{2}M^2(M+3)$ multiplicações. Se bem que a comparação seja desvirtuada pelo facto de o algoritmo de [34] calcular um conjunto de coeficientes maior e que inclui o conjunto de coeficientes calculados com o algoritmo aqui proposto, podemos verificar que, para o mesmo conjunto de $p+2J+2$ coeficientes da série, este algoritmo envolve cerca de 20% do volume de aritmética do algoritmo tipo-Frobenius de [34].

Para avaliar a sua fiabilidade, este algoritmo foi programado e testado com funções de que se conhecem simultaneamente um desenvolvimento de Fourier com fórmulas exactas para os coeficientes e uma fórmula analítica fechada que permita avaliar a função, em qualquer abcissa do intervalo de aproximação, com a mesma precisão de cálculo dos aproximantes no programa. Na secção seguinte, apresentam-se dois exemplos de aplicação do algoritmo. Os resultados são ilustrados com os erros na aproximação da função utilizando os aproximantes avaliados com os coeficientes calculados pelas fórmulas apresentadas no algoritmo.

Exemplos e resultados

Este algoritmo foi implementado em Fortran, recorrendo a rotinas padrão de resolução de sistemas de equações lineares triangulares, com aritmética de dupla precisão. Com o objectivo de ilustrar os resultados obtidos, o programa foi testado com os exemplos seguintes:

Exemplo 2.13 *A partir da fórmula [30]*

$$x^\mu = \Gamma(\mu + \beta + 1) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n + \gamma) \Gamma(n + \gamma) (-\mu)_n}{\Gamma(n + \beta + 1) \Gamma(n + \gamma + \mu + 1)} R_n^{(\alpha, \beta)}(x), \quad 0 < x < 1$$

válida para

$$\alpha, \beta > -1, \quad -\operatorname{Re}(\mu) < \min(1 + \beta, 3/4 + \beta/2),$$

onde $R_n^{(\alpha, \beta)}(x)$ representa o polinómio de Jacobi de grau n com deslocamento para o intervalo $[0, 1]$, com peso $w(x) = (1 - x)^\alpha x^\beta$ e $\gamma = \alpha + \beta + 1$. Tomando $\alpha = \beta = 1/2$ e $\mu = -1/2$, obtemos

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{x}} = \frac{16}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{n+1}{(2n+1)(2n+3)} U_n^*(x), \quad 0 < x < 1$$

onde $U_n^*(x)$ é o polinómio de Chebyshev de segunda espécie de grau n com deslocamento para o intervalo $[0, 1]$, normalizado pela condição $U_n^*(1) = n + 1$. Estes polinómios satisfazem a relação de recorrência [24]

$$xU_n^*(x) = \frac{1}{4}U_{n+1}^*(x) + \frac{1}{2}U_n^*(x) + \frac{1}{4}U_{n-1}^*(x).$$

Para testar a propagação dos erros no algoritmo, o programa foi executado com o valor $J = 40$, para diversos valores de p . O resultado do programa é o conjunto dos coeficientes dos aproximantes $[p/q]_f^{U^*}(z)$, $q = 1, \dots, 40$. A tabela 2.1 representa, em cada posição (p, q) , o número de dígitos decimais exactos na AFP, isto é, $-\log_{10} |f(z) - [p/q]_f^{U^*}(z)|$ arredondado a inteiro, para os valores de z indicados.

Dos resultados destaca-se que a qualidade da aproximação é significativamente melhor no ponto médio do intervalo de aproximação do que na abcissa $z = 0.01$, perto da singularidade da função em $z = 0$. Em ambos os pontos, os resultados obtidos não evidenciam instabilidade numérica, uma vez que, apesar do número considerável de aproximantes calculados em cada linha, não se observa em caso algum um aumento significativo do erro com o número de iterações do algoritmo.

Os resultados obtidos servem também para ilustrar o comportamento dos aproximantes racionais no intervalo de aproximação. Na figura 2.1 representam-se as curvas do erro absoluto, em escala logarítmica, para alguns elementos da TFP.

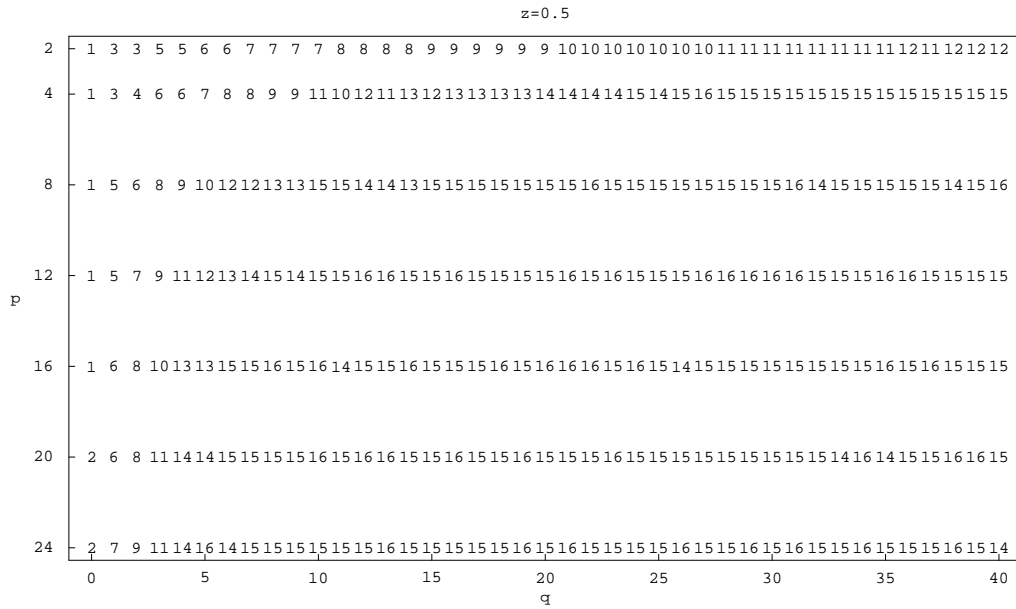
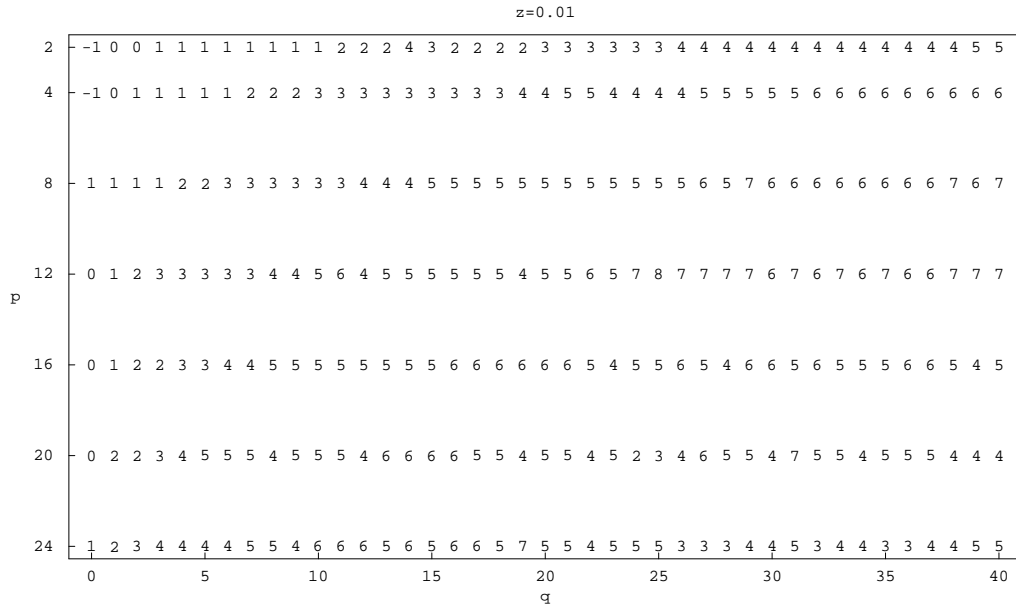


Tabela 2.1: $-\log_{10}(|f(z) - [p/q]_f^{U^*}(z)|)$, para $f(z) = \frac{1}{\sqrt{z}}$

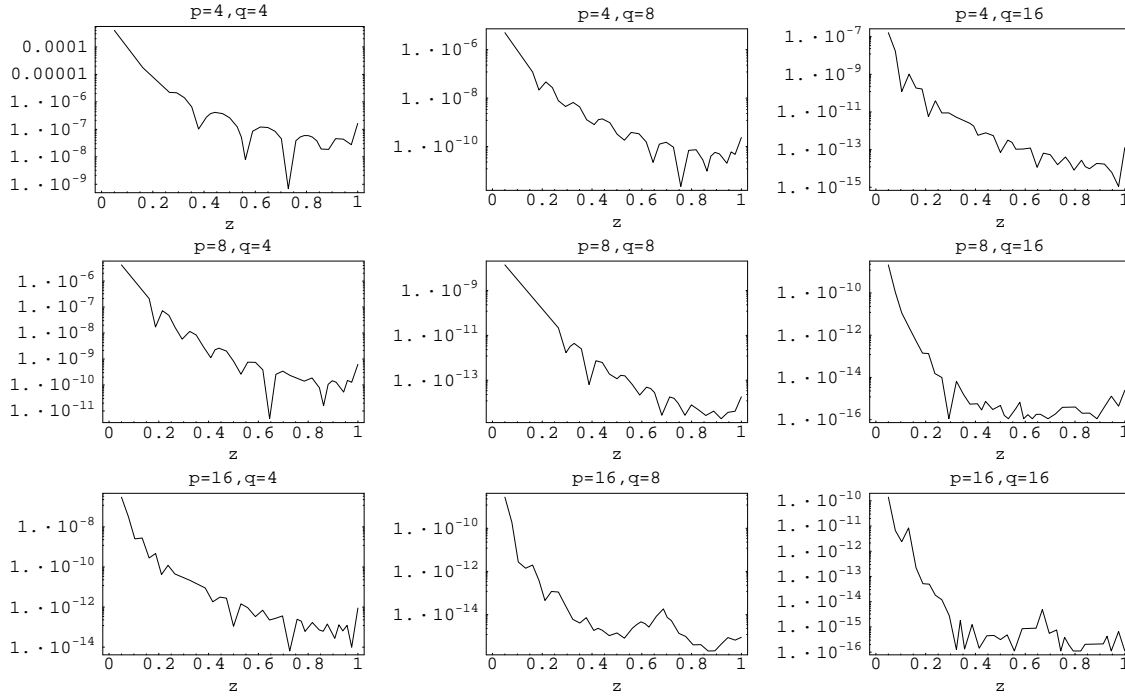


Figura 2.1: $|f(z) - [p/q]_f^{U*}(z)|$, para $f(z) = \frac{1}{\sqrt{z}}$

Os gráficos apresentados, assim como os valores das tabelas na figura anterior, são gerados pela função Plot do programa Mathematica. Os coeficientes dos aproximantes, bem como o primeiro termo da série do erro neste algoritmo, são calculados pelo programa implementado em Fortran e escritos num ficheiro, com 16 algarismos significativos. Em Mathematica implementou-se uma rotina que lê estes coeficientes e, utilizando as suas próprias rotinas de cálculo dos polinómios ortogonais, constroi os aproximantes de Frobenius-Padé.

Estimativa do erro absoluto: Partindo da definição de FPA

$$D^{[p/q]}(z)f(z) - N^{[p/q]}(z) = \sum_{k \geq p+q+1} e_k^{[p/q]} P_k(z)$$

obtemos para expressão do erro absoluto na aproximação

$$f(z) - [p/q]_f^P(z) = \frac{\sum_{k \geq p+q+1} e_k^{[p/q]} P_k(z)}{D^{[p/q]}(z)}.$$

Admitindo que os valores dos coeficientes $|e_k^{[p/q]}|$ com k crescente, decrescem rapidamente para zero, então do termo principal do segundo membro, isto é

$$e_{p+q+1}^{[p/q]} \frac{P_{p+q+1}(z)}{D^{[p/q]}(z)} \quad (2.21)$$

podemos esperar que seja uma aproximação do erro $f(z) - [p/q]_f^P(z)$. No algoritmo 2.2 os coeficientes $e_{p+q+1}^{[p/q]}$ são calculados como quantidades auxiliares, logo, podem utilizar-se para construir esta estimativa do erro absoluto, sem qualquer acréscimo do esforço de cálculo no algoritmo.

Na figura 2.2 podemos observar que a estimativa (2.21) e o erro absoluto tomam valores próximos no intervalo $[0.2, 1]$. No intervalo $[0, 0.2]$ o erro tem grandes oscilações e não se podem tirar as mesmas conclusões.

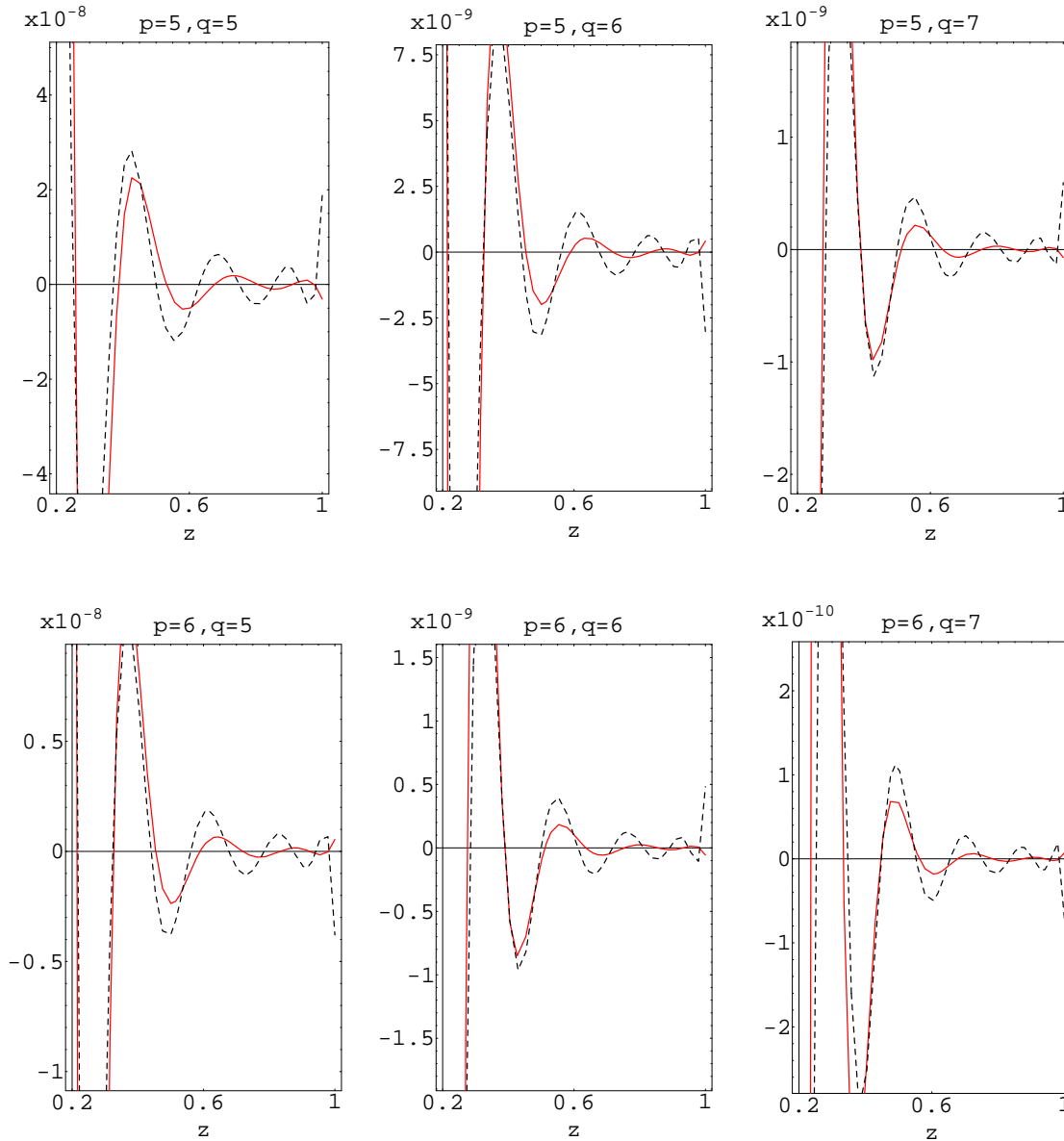


Figura 2.2: $f(z) - [p/q]_f^{U^*}(z)$ (linha cheia) e a estimativa $e_{p+q+1}^{[p/q]} \frac{U_{p+q+1}^*(z)}{D^{[p/q]}(z)}$ (tracejado), para $f(z) = \frac{1}{\sqrt{z}}$

Podemos observar nestes gráficos que o comportamento do erro, excepto para pontos próximos de $z = 0$ onde a função é singular, é semelhante ao erro da aproximação uniforme, oscilando em torno de zero com amplitudes que não variam muito em ordem de grandeza ao longo do intervalo e que diminuem com o aumento dos graus do numerador e do denominador. Este comportamento é menos visível para os graus mais elevados, provavelmente por a amplitude do erro absoluto se situar

próximo da precisão de cálculo da máquina.

Um segundo exemplo foi considerado para testar o algoritmo:

Exemplo 2.14 *Seja $\{L_i^{(\alpha)}\}_{i \geq 0}$ a família dos polinômios de Laguerre, definidos como no exemplo 2.5. Considerando o caso particular dos polinômios $L_i = L_i^{(0)}$, e a função geradora destes polinômios [24],*

$$(1-a)^{-1} e^{\frac{az}{a-1}} = \sum_{i \geq 0} a^i L_i(z),$$

tomando $a = -1$ temos que

$$f(z) = \frac{1}{2} e^{\frac{1}{2}z} = \sum_{i \geq 0} (-1)^i L_i(z) \quad z \geq 0$$

Tratando-se de uma função exponencial, que toma valores de ordens de grandeza significativamente distintas no intervalo observado, a precisão dos resultados obtidos é melhor caracterizada pelo erro relativo do que pelo erro absoluto. Calculadas diversas linha da tabela FP, a precisão dos aproximantes foi testada nos pontos $z = 0$ e $z = 20$. A tabela 2.2 representa, em cada posição (p, q) , o número de algarismos significativos corretos, isto é $-\log_{10} |(f(z) - [p/q]_f^L(z))/f(z)|$, arredondado a inteiro, para estes valores de z .

Podemos observar que, pelo menos até à coluna $q = 40$, a eventual acumulação de erros no cálculo dos coeficientes com este algoritmo, não chega para impedir o sistemático aumento da precisão na aproximação da função.

Os gráficos das curvas do erro relativo, apresentados na figura 2.3, apresentam um comportamento oscilatório em torno de zero. Nos casos observados podemos verificar um aumento da amplitude das oscilações do erro relativo com os valores de z , e uma diminuição destas amplitudes à medida que progredimos nas linhas e nas colunas da tabela.

Os resultados numéricos, obtidos com este programa, parecem indicar, para além de boas qualidades de aproximação dos AFP, que o algoritmo de cálculo apresentado neste capítulo, baseado no cálculo por recorrência da decomposição LU das matrizes de Frobenius-Padé, é suficientemente robusto para calcular uma sucessão de aproximantes sem evidenciar uma significativa perturbação de valores, eventualmente provocada pela propagação dos erros de arredondamento.

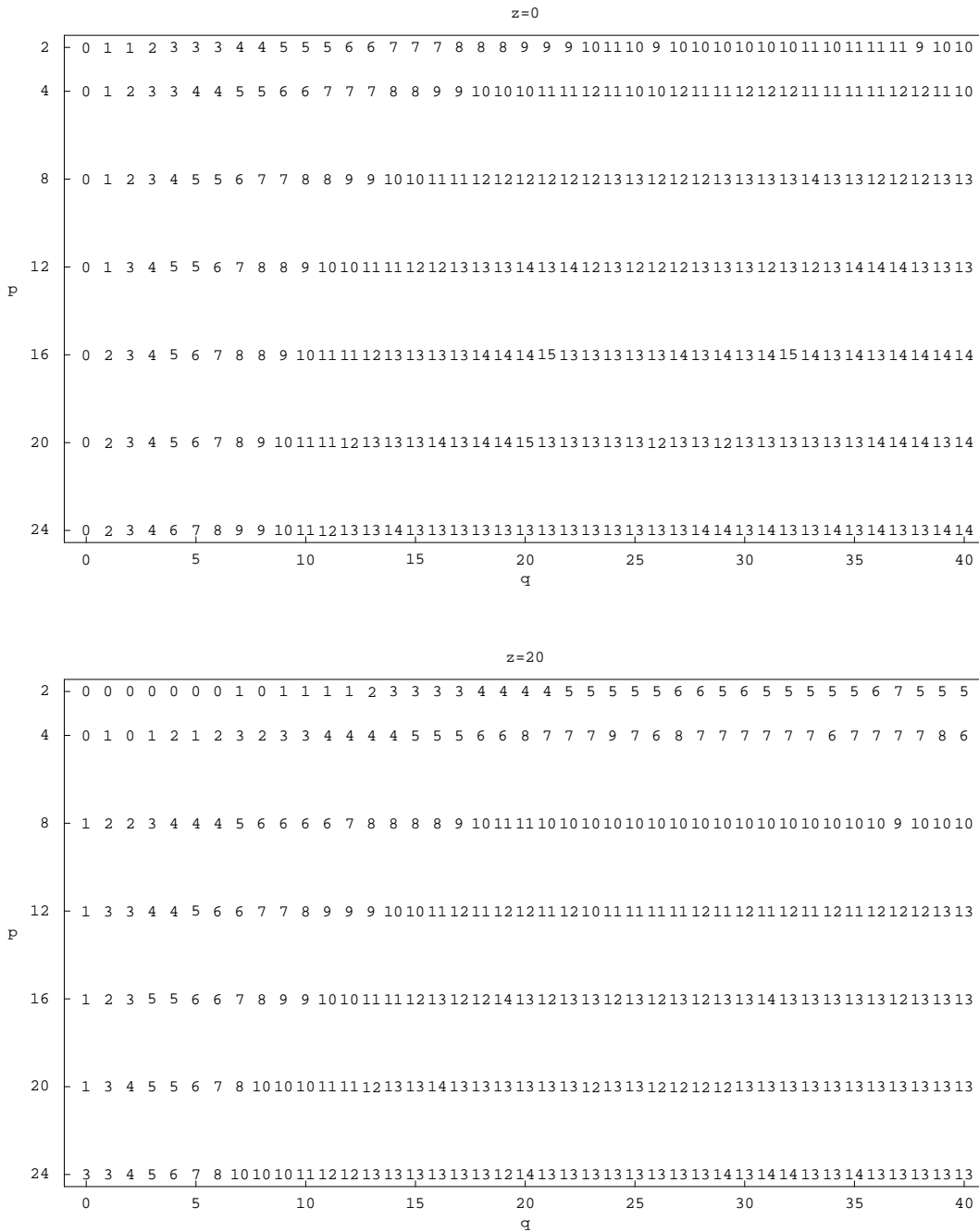


Tabela 2.2: $-\log_{10} |(f(z) - [p/q]_f^L(z))/f(z)|$, para $f(z) = \frac{1}{2}e^{\frac{1}{2}z}$

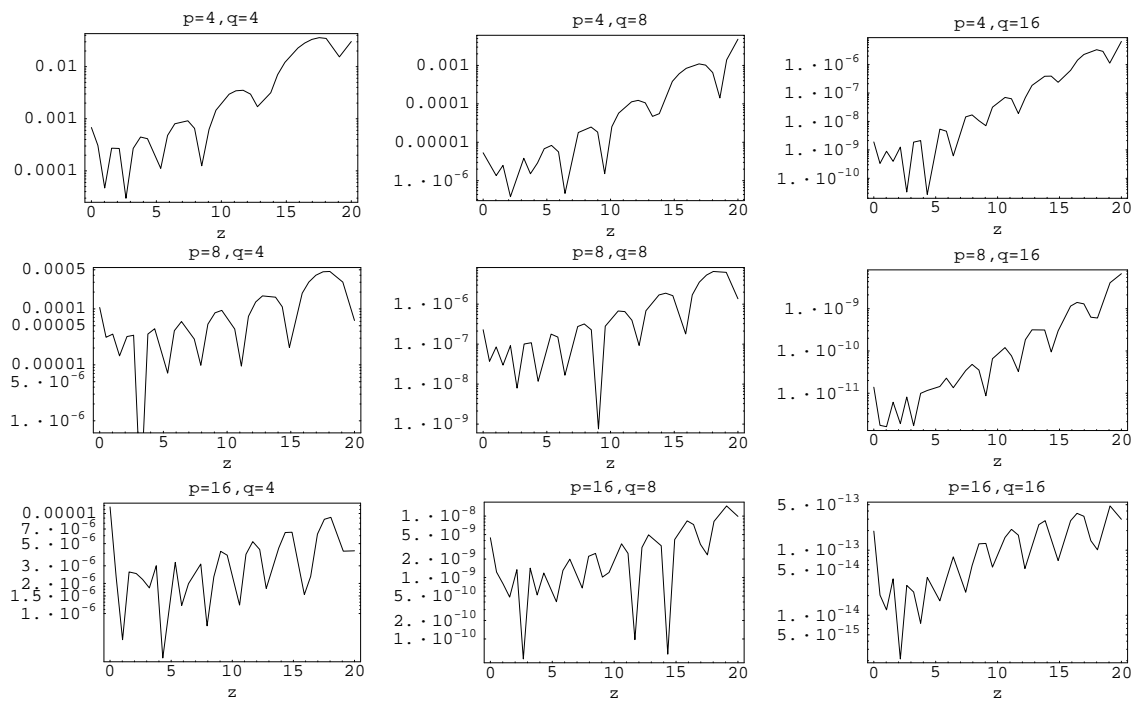


Figura 2.3: $|(f(z) - [p/q]_f^L(z))/f(z)|$, para $f(z) = \frac{1}{2}e^{\frac{1}{2}z}$

Capítulo 3

Estrutura de Desvio de Característica

Como vimos no capítulo anterior, o cálculo dos coeficientes dos denominadores dos aproximantes de Frobenius-Padé, tal como para o caso dos aproximantes de Padé, pode fazer-se resolvendo um sistema de equações lineares. No caso da aproximação de Padé de funções definidas, pelo menos formalmente, por um desenvolvimento em série de potências $f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i z^i$, as matrizes H associadas ao cálculo dos coeficientes dos denominadores, pertencem a uma classe de matrizes designadas por matrizes de Hankel. Para estas matrizes, existem algoritmos rápidos de eliminação de Gauss, isto é, algoritmos que calculam uma decomposição LU de uma matriz $n \times n$ com $O(n^2)$ operações aritméticas elementares.

Na generalização da aproximação de Padé a séries de Fourier em polinómios ortogonais, definida no capítulo anterior como aproximação de Frobenius-Padé, as matrizes H associadas ao cálculo dos coeficientes dos denominadores dos aproximantes, já não são matrizes de Hankel. No entanto, estas matrizes têm uma estrutura, como se irá demonstrar. Neste capítulo apresentam-se novos resultados, permitindo explorar essa estrutura e implementar um algoritmo rápido de tipo eliminação de Gauss, para resolver os sistemas de equações lineares associados a estas matrizes.

A primeira parte deste capítulo é dedicada à teoria de desvio de característica de matrizes, introduzindo-se as definições e os resultados principais, permitindo explorar a estrutura de matrizes para implementar algoritmos rápidos de decomposição LU . Na segunda parte, explora-se a relação de recorrência envolvendo os elementos $h_{i,j}$ das matrizes de Frobenius-Padé H , introduzida em 2.2.1, para demonstrar a existência de uma estrutura de desvio de característica para estas matrizes. Em seguida, são introduzidos novos resultados, permitindo explorar esta estrutura e desenvolver um algoritmo rápido de factorização triangular das matrizes H . Na última parte do capítulo apresentam-se resultados numéricos obtidos com a implementação em *Fortran* deste algoritmo rápido.

3.1 Introdução

Um resultado conhecido, corrente em livros de álgebra linear numérica, é que, para resolver um sistema genérico de n equações lineares em n incógnitas, o método da eliminação de Gauss ou da factorização LU , pode implementar-se em $O(n^3)$ operações aritméticas elementares.

Quando a matriz do sistema exhibe algum tipo de estrutura (matrizes de Hankel, de Toeplitz ou

Toeplitz-plus-Hankel, matrizes de Cauchy, de Vandermonde ou matrizes de Vandermonde-confluentes) encontram-se na literatura, algoritmos rápidos para a resolução do sistema em $O(n^2)$ operações aritméticas elementares [4], [8], [19], [20], [26].

Tais algoritmos baseiam-se no conceito de desvio de característica:

Definição 3.1 [20] *Seja $M \in \mathbb{C}^{n \times n}$ tal que*

$$F \cdot M - M \cdot R = G \cdot B$$

para algum conjunto de matrizes $F, R \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $G \in \mathbb{C}^{n \times \alpha}$ e $B \in \mathbb{C}^{\alpha \times n}$, e para algum $\alpha \leq n$. O operador $\nabla_{\{F,R\}}(\cdot) : \mathbb{C}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{C}^{n \times n}$ definido por

$$\nabla_{\{F,R\}}(M) \equiv F \cdot M - M \cdot R$$

é designado por operador de desvio de característica. O par $\{G, B\}$ designa-se $\nabla_{\{F,R\}}$ -gerador de M . Se $\alpha \ll n$, da matriz M diz-se que possui uma estrutura de desvio de característica e

$$\alpha = \text{rank}(\nabla_{\{F,R\}}(M))$$

diz-se $\nabla_{\{F,R\}}$ -desvio de característica de M .

Pode mostrar-se que, para algumas classes de matrizes com estrutura de desvio de característica, os sucessivos complementos de Schur gerados pelo processo de eliminação Gaussiana, pertencem à mesma classe de matrizes [20], [26]. Mais precisamente:

Teorema 3.1 [20] *Seja*

$$M_i = \begin{bmatrix} a_i & u_i^T \\ l_i & M^{(i)} \end{bmatrix}, \quad a_i \neq 0$$

uma matriz satisfazendo a equação de estrutura de desvio de característica

$$\nabla_{\{F_i, R_i\}}(M_i) \equiv F_i \cdot M_i - M_i \cdot R_i = G_i \cdot B_i \quad (3.1)$$

com

$$F_i = \begin{bmatrix} f_i & 0 \\ * & F_{i+1} \end{bmatrix}, \quad R_i = \begin{bmatrix} r_i & * \\ 0 & R_{i+1} \end{bmatrix}$$

$$G_i = \begin{bmatrix} g_i^T \\ G^{(i)} \end{bmatrix}, \quad B_i = \begin{bmatrix} b_i & B^{(i)} \end{bmatrix}.$$

Então o complemento de Schur de a_i

$$M_{i+1} = M^{(i)} - \frac{1}{a_i} l_i \cdot u_i^T \quad (3.2)$$

satisfaz a equação de estrutura de desvio de característica

$$\nabla_{\{F_{i+1}, R_{i+1}\}}(M_{i+1}) = G_{i+1} \cdot B_{i+1} \quad (3.3)$$

com

$$G_{i+1} = G^{(i)} - \frac{1}{a_i} l_i \cdot g_i^T, \quad B_{i+1} = B^{(i)} - \frac{1}{a_i} b_i \cdot u_i^T \quad (3.4)$$

Quando o operador de desvio de característica $\nabla_{\{F_i, R_i\}}$ é invertível, a matriz M , ou os factores triangulares L e U , podem calcular-se a partir do par gerador $\{G, B\}$. Este facto, juntamente com o resultado do teorema anterior, permite transferir as operações efectuadas nos $(n+1-i)^2$ elementos dos sucessivos complementos de Schur M_i , efectuadas no processo de eliminação Gaussiana,

$$\begin{array}{ccccccc} \{M_1\} & \longrightarrow & \{M_2\} & \longrightarrow & \cdots & \longrightarrow & \{M_n\} \\ \downarrow & & \downarrow & & & & \downarrow \\ \{l_1, u_1\} & & \{l_2, u_2\} & & \cdots & & \{l_n, u_n\} \end{array}$$

em operações nos $2\alpha(n+1-i)$ elementos dos sucessivos pares geradores $\{G_i, B_i\}$

$$\begin{array}{ccccccc} \{G_1, B_1\} & \longrightarrow & \{G_2, B_2\} & \longrightarrow & \cdots & \longrightarrow & \{G_n, B_n\} \\ \downarrow & & \downarrow & & & & \downarrow \\ \{l_1, u_1\} & & \{l_2, u_2\} & & \cdots & & \{l_n, u_n\} \end{array}$$

permitindo reduzir o esforço de cálculo nos algoritmos [21].

3.2 Estrutura das matrizes de Frobenius-Padé

No capítulo anterior mostrou-se que, com as definições

$$H^{[p/q]} = \begin{bmatrix} h_{p+1,0} & \cdots & h_{p+1,q-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{p+q,0} & \cdots & h_{p+q,q-1} \end{bmatrix}, \quad h^{[p/q]} = \begin{bmatrix} h_{p+1,q} \\ \vdots \\ h_{p+q,q} \end{bmatrix}$$

o cálculo dos coeficientes dos aproximantes de Frobenius-Padé pode fazer-se resolvendo o sistema $H^{[p/q]}b = -h^{[p/q]}$, em que os elementos $h_{i,j}$ são definidos por

$$h_{i,j} = \frac{1}{\mu_i} \langle u, P_i(x)P_j(x)f(x) \rangle, \quad i, j = 0, 1, \dots \quad (3.5)$$

Resolvido o problema do cálculo destes elementos, importa resolver o sistema de equações. Escrevendo (2.11) na forma

$$\alpha_j h_{i,j+1} + \beta_j h_{i,j} + \gamma_j h_{i,j-1} = \alpha_{i-1} h_{i-1,j} + \beta_i h_{i,j} + \gamma_{i+1} h_{i+1,j}, \quad i, j \geq 0 \quad (3.6)$$

obtemos um operador de desvio de característica para $H^{[p/q]}$, como se mostra na seguinte proposição:

Proposição 3.1 *Dados $p \geq 0$, $q \geq 1$ e $H = H^{[p/q]}$, defina-se $F = Q^{[p/q]}$ e $R = Q^{[-1/q]}$ onde $Q^{[p/q]}$ é a matriz tridiagonal*

$$Q^{[p/q]} = \begin{bmatrix} \beta_{p+1} & \gamma_{p+2} & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_{p+1} & \beta_{p+2} & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \alpha_{p+2} & \ddots & \gamma_{p+q-1} & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \beta_{p+q-1} & \gamma_{p+q} \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha_{p+q-1} & \beta_{p+q} \end{bmatrix}$$

então

$$\nabla_{\{F,R\}}(H) \equiv F \cdot H - H \cdot R = G \cdot B \quad (3.7)$$

com

$$G = \begin{bmatrix} -\alpha_p & 0 & h_{p+1,q} \\ 0 & 0 & h_{p+2,q} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & h_{p+q-1,q} \\ 0 & -\gamma_{p+q+1} & h_{p+q,q} \end{bmatrix}$$

e

$$B = \begin{bmatrix} h_{p,0} & \cdots & h_{p,q-2} & h_{p,q-1} \\ h_{p+q+1,0} & \cdots & h_{p+q+1,q-2} & h_{p+q+1,q-1} \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha_{q-1} \end{bmatrix}$$

Demonstração. Por cálculo directo verifica-se que

$$G \cdot B = \begin{bmatrix} -\alpha_p h_{p,0} & \cdots & -\alpha_p h_{p,q-2} & \alpha_{q-1} h_{p+1,q} - \alpha_p h_{p,q-1} \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha_{q-1} h_{p+2,q} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha_{q-1} h_{p+q-1,q} \\ -\gamma_{p+q+1} h_{p+q+1,0} & \cdots & -\gamma_{p+q+1} h_{p+q+1,q-2} & \alpha_{q-1} h_{p+q,q} - \gamma_{p+q+1} h_{p+q+1,q-1} \end{bmatrix}$$

Definindo

$$S = F \cdot H = \begin{bmatrix} \beta_{p+1} & \gamma_{p+2} & & & \\ \alpha_{p+1} & \beta_{p+2} & \gamma_{p+3} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \alpha_{p+q-2} & \beta_{p+q-1} & \gamma_{p+q} \\ & & & \alpha_{p+q-1} & \beta_{p+q} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} h_{p+1,0} & \cdots & h_{p+1,q-1} \\ \vdots & & \vdots \\ h_{p+q,0} & \cdots & h_{p+q,q-1} \end{bmatrix}$$

obtemos

$$\begin{cases} S_{0,j} = \beta_{p+1} h_{p+1,j} + \gamma_{p+2} h_{p+2,j}, & j = 0, \dots, q-1 \\ S_{i,j} = \alpha_{p+i} h_{p+i,j} + \beta_{p+1+i} h_{p+1+i,j} + \gamma_{p+2+i} h_{p+2+i,j}, & i = 1, \dots, q-2 \\ & j = 0, \dots, q-1 \\ S_{q-1,j} = \alpha_{p+q-1} h_{p+q-1,j} + \beta_{p+q} h_{p+q,j}, & j = 0, \dots, q-1 \end{cases}$$

e para

$$T = H \cdot R = \begin{bmatrix} h_{p+1,0} & \cdots & h_{p+1,q-1} \\ \vdots & & \vdots \\ h_{p+q,0} & \cdots & h_{p+q,q-1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \beta_0 & \gamma_1 & & & \\ \alpha_0 & \beta_1 & \ddots & & \\ & \alpha_1 & \ddots & \gamma_{q-2} & \\ & & \ddots & \beta_{q-2} & \gamma_{q-1} \\ & & & \alpha_{q-2} & \beta_{q-1} \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} T_{i,0} = \beta_0 h_{p+1+i,0} + \alpha_0 h_{p+1+i,1}, & i = 0, \dots, q-1 \\ T_{i,j} = \gamma_j h_{p+1+i,j-1} + \beta_j h_{p+1+i,j} + \alpha_j h_{p+1+i,j+1}, & j = 1, \dots, q-2 \\ & i = 0, \dots, q-1 \\ T_{i,q-1} = \gamma_{q-1} h_{p+1+i,q-2} + \beta_{q-1} h_{p+1+i,q-1}, & i = 0, \dots, q-1 \end{cases}$$

Utilizando (3.6) verifica-se que $S_{i,j} - T_{i,j} = 0$, para $i = 1, \dots, q-2$ e $j = 0, \dots, q-2$. Para os elementos da primeira e da última linha e da última coluna:

$$S_{0,0} - T_{0,0} = \beta_{p+1} h_{p+1,0} + \gamma_{p+2} h_{p+2,0} - (\beta_0 h_{p+1,0} + \alpha_0 h_{p+1,1})$$

e

$$S_{0,j} - T_{0,j} = \beta_{p+1}h_{p+1,j} + \gamma_{p+2}h_{p+2,j} - (\gamma_j h_{p+1,j-1} + \beta_j h_{p+1,j} + \alpha_j h_{p+1,j+1}), \quad j = 1, \dots, q-2$$

Tomando $i = p+1$ e $j = 0, \dots, q-2$ em (3.6) obtemos

$$S_{0,j} - T_{0,j} = -\alpha_p h_{p,j}, \quad j = 0, \dots, q-2$$

Analogamente, com $i = p+q$

$$S_{q-1,j} - T_{q-1,j} = -\gamma_{p+q+1} h_{p+q+1,j}, \quad j = 0, \dots, q-2$$

e para $j = q-1$

$$\begin{aligned} S_{0,q-1} - T_{0,q-1} &= \alpha_{q-1} h_{p+1,q} - \alpha_p h_{p,q-1} \\ S_{i,q-1} - T_{i,q-1} &= \alpha_{q-1} h_{p+1+i,q}, \quad i = 1, \dots, q-2 \\ S_{q-1,q-1} - T_{q-1,q-1} &= \alpha_{q-1} h_{p+q,q} - \gamma_{p+q+1} h_{p+q+1,q-1} \end{aligned}$$

Logo $S - T = G \cdot B$ ■

Desta proposição resulta que H tem $\nabla_{\{F,R\}}$ -desvio de característica $\alpha \leq 3$. Como corolário obtemos

Corolário 3.1 A matriz $H = [h_{i,j}]_{i,j=0}^{q-1}$ tem desvio de característica 2 para o operador

$$\nabla_Q(H) = Q \cdot H - H \cdot Q$$

com $Q = Q^{[-1/q]}$. E

$$\nabla_Q(H) = G \cdot J \cdot G^T$$

com

$$G = \begin{bmatrix} 0 & h_{0,q} \\ \vdots & \vdots \\ 0 & h_{q-2,q} \\ -\alpha_{q-1} & h_{q-1,q} \end{bmatrix}, \quad J = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

Demonstração. Na demonstração anterior, pode tomar-se $p = -1$, excepto para a primeira linha de $\nabla_Q(H)$. Neste caso, para $j = 0, \dots, q-2$

$$(Q \cdot H - H \cdot Q)_{0,j} = \beta_0 h_{0,j} + \alpha_0 h_{1,j} - (\gamma_j h_{0,j-1} + \beta_j h_{0,j} + \alpha_j h_{0,j+1}) = 0$$

e

$$(Q \cdot H - H \cdot Q)_{0,q-1} = \beta_0 h_{0,q-1} + \alpha_0 h_{1,q-1} - (\gamma_{q-1} h_{0,q-2} + \beta_{q-1} h_{0,q-1}) = -\alpha_{q-1} h_{0,q}$$

■

Com estas equações de desvio de característica, uma vez que $Q^{[p/q]}$ não são matrizes triangulares, o teorema 3.1 não é aplicável. Com o objectivo de construir um algoritmo rápido baseado no operador de desvio de característica $\nabla_{\{F,R\}}$ da proposição 3.1, é necessário generalizar o teorema a uma classe mais lata de operadores de desvio de característica. A proposição seguinte mostra que o complemento de Schur de uma matriz M satisfazendo a equações de desvio de característica

$$\nabla_{\{F,R\}}(M) \equiv F \cdot M - M \cdot R = G \cdot B$$

pertence à mesma classe de estrutura de M , para qualquer F e R .

Proposição 3.2 *Seja*

$$M_i = \begin{bmatrix} a_i & u_i^T \\ l_i & M^{(i)} \end{bmatrix}, \quad a_i \neq 0$$

tal que

$$\nabla_{\{F_i, R_i\}}(M_i) \equiv F_i \cdot M_i - M_i \cdot R_i = G_i \cdot B_i$$

com

$$F_i = \begin{bmatrix} f & f_i^T \\ h & F^{(i)} \end{bmatrix}, \quad R_i = \begin{bmatrix} r & s^T \\ r_i & R^{(i)} \end{bmatrix}, \quad G_i = \begin{bmatrix} g_i^T \\ G^{(i)} \end{bmatrix}, \quad B_i = [b_i \quad B^{(i)}]$$

então o complemento de Schur

$$M_{i+1} = M^{(i)} - \frac{1}{a_i} l_i \cdot u_i^T \tag{3.8}$$

satisfaz a equação de desvio de característica

$$F_{i+1} \cdot M_{i+1} - M_{i+1} \cdot R_{i+1} = G_{i+1} \cdot B_{i+1}$$

com

$$\begin{aligned} F_{i+1} &= F^{(i)} - \frac{1}{a_i} l_i \cdot f_i^T, & R_{i+1} &= R^{(i)} - \frac{1}{a_i} r_i \cdot u_i^T, \\ G_{i+1} &= G^{(i)} - \frac{1}{a_i} l_i \cdot g_i^T, & B_{i+1} &= B^{(i)} - \frac{1}{a_i} b_i \cdot u_i^T. \end{aligned} \tag{3.9}$$

Demonstração. A partir de $F_i \cdot M_i - M_i \cdot R_i = G_i \cdot B_i$, identificando blocos correspondentes

$$\begin{cases} f_i^T \cdot l_i - u_i^T \cdot r_i = g_i^T \cdot b_i - (f - r) a_i \\ f_i^T \cdot M^{(i)} - u_i^T \cdot R^{(i)} = a_i s^T - f u_i^T - g_i^T \cdot B^{(i)} \\ F^{(i)} \cdot l_i - M^{(i)} \cdot r_i = r l_i - a_i h + G^{(i)} \cdot b_i \\ F^{(i)} \cdot M^{(i)} - M^{(i)} \cdot R^{(i)} = G^{(i)} \cdot B^{(i)} - h \cdot u_i^T + l_i \cdot s^T \end{cases}$$

Logo

$$\begin{aligned} \nabla_{\{F_{i+1}, R_{i+1}\}}(M_{i+1}) &= F_{i+1} \cdot M_{i+1} - M_{i+1} \cdot R_{i+1} \\ &= \left(F^{(i)} - \frac{1}{a_i} l_i \cdot f_i^T \right) \cdot M_{i+1} - M_{i+1} \cdot \left(R^{(i)} - \frac{1}{a_i} r_i \cdot u_i^T \right) \\ &= F^{(i)} \cdot M^{(i)} - M^{(i)} \cdot R^{(i)} - \frac{1}{a_i} l_i \cdot \left(f_i^T \cdot M^{(i)} - u_i^T \cdot R^{(i)} \right) \\ &\quad - \frac{1}{a_i} \left(F^{(i)} \cdot l_i - M^{(i)} \cdot r_i \right) \cdot u_i^T + \frac{1}{a_i^2} l_i \left(f_i^T \cdot l_i - u_i^T \cdot r_i \right) u_i^T \\ &= G^{(i)} \cdot B^{(i)} - h \cdot u_i^T + l_i \cdot s^T - \frac{1}{a_i} l_i \cdot \left(a_i s^T - f u_i^T - g_i^T \cdot B^{(i)} \right) \\ &\quad - \frac{1}{a_i} \left(r l_i - a_i h + G^{(i)} \cdot b_i \right) \cdot u_i^T + \frac{1}{a_i^2} l_i \left(g_i^T \cdot b_i - (f - r) a_i \right) u_i^T \\ &= G^{(i)} \cdot B^{(i)} - \frac{1}{a_i} \left(G^{(i)} \cdot b_i \cdot u_i^T + l_i \cdot g_i^T \cdot B^{(i)} \right) + \frac{1}{a_i^2} l_i \left(g_i^T \cdot b_i \right) u_i^T \\ &= \left(G^{(i)} - \frac{1}{a_i} l_i \cdot g_i^T \right) \cdot \left(B^{(i)} - \frac{1}{a_i} b_i \cdot u_i^T \right) = G_{i+1} \cdot B_{i+1} \end{aligned}$$

■

O resultado desta proposição, bem como do corolário seguinte, foi apresentado em [23], em data posterior ao trabalho desenvolvido para elaboração deste capítulo da tese. Os enunciados, bem como as demonstrações, da proposição e do corolário apresentam-se sem referência, uma vez que o trabalho aqui apresentado foi desenvolvido de forma independente, e quase em simultâneo com o trabalho apresentado em [23].

Uma relação de recorrência baseada neste resultado, sendo F e R matrizes cheias, não parece trazer vantagens sob o ponto de vista do número de operações aritméticas, comparado com a eliminação Gaussiana baseada no cálculo dos complementos de Schur. De facto, sendo $q - i$ a dimensão da matriz M_i , então (3.9) envolve $2(q - i)^2 + 2\alpha(q - i)$ multiplicações e temos $(q - i)^2$ multiplicações em (3.8). A situação muda no caso em que F e R são matrizes de Hessenberg, e que claramente inclui o caso das matrizes tridiagonais F e R da proposição (3.1).

Corolário 3.2 *Se nas matrizes F_i e R_i da proposição anterior $f_i = f_1 e_1$ e $r_i = r_1 e_1$, onde e_1 é a primeira coluna da matriz identidade (de ordem $q - i - 1$), então esta propriedade é herdada pelas matrizes F_{i+1} and R_{i+1} . Além disso, com $l_i = (l_{i+1,i}, \dots, l_{q-1,i})^T$ e $u_i^T = (u_{i,i+1}, \dots, u_{i,q-1})$ temos*

$$F_{i+1} - F^{(i)} = -\frac{f_1}{a_i} \begin{bmatrix} l_{i+1,i} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{q-1,i} & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix},$$

$$R_{i+1} - R^{(i)} = -\frac{r_1}{a_i} \begin{bmatrix} u_{i,i+1} & \cdots & u_{i,q-1} \\ 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}.$$

Demonstração. É imediata após substituição de $f_i = f_1 e_1$ e $r_i = r_1 e_1$ em (3.9). ■

Este resultado mostra que $F_{i+1} - F^{(i)}$ e $R_{i+1} - R^{(i)}$ são matrizes esparsas e que F e R podem actualizar-se com $2(q - i)$ multiplicações na iteração i . Antes de prosseguir com um algoritmo, pode mostrar-se que a actualização do par gerador G e B é também uma operação económica, no sentido em que as matrizes $G_{i+1} - G^{(i)}$ e $B_{i+1} - B^{(i)}$ têm, no máximo, $2(q - i)$ elementos não nulos cada uma.

Corolário 3.3 *Seja*

$$G_0 = \begin{bmatrix} G_{00}^{(0)} & 0 & G_{02}^{(0)} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ G_{q-2,0}^{(0)} & 0 & G_{q-2,2}^{(0)} \\ G_{q-1,0}^{(0)} & * & G_{q-1,2}^{(0)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\alpha_p & 0 & h_{p+1,q} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & h_{p+q-1,q} \\ 0 & -\gamma_{p+q+1} & h_{p+q,q} \end{bmatrix}$$

e

$$B_0 = \begin{bmatrix} B_{00}^{(0)} & \cdots & B_{0,q-2}^{(0)} & B_{0,q-1}^{(0)} \\ B_{10}^{(0)} & \cdots & B_{1,q-2}^{(0)} & B_{1,q-1}^{(0)} \\ 0 & \cdots & 0 & * \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{p,0} & \cdots & h_{p,q-2} & h_{p,q-1} \\ h_{p+q+1,0} & \cdots & h_{p+q+1,q-2} & h_{p+q+1,q-1} \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha_{q-1} \end{bmatrix}$$

o par $\nabla_{\{F,R\}}$ -gerador de H da proposição 3.1, então

$$G_i = \begin{bmatrix} G_{i,0}^{(i)} & 0 & G_{i,1}^{(i)} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ G_{q-2,0}^{(i)} & 0 & G_{q-2,1}^{(i)} \\ G_{q-1,0}^{(i)} & -\gamma_{p+q+1} & G_{q-1,1}^{(i)} \end{bmatrix}, \quad B_i = \begin{bmatrix} B_{0,i}^{(i)} & \cdots & B_{0,q-2}^{(i)} & B_{0,q-1}^{(i)} \\ B_{1,i}^{(i)} & \cdots & B_{1,q-2}^{(i)} & B_{1,q-1}^{(i)} \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha_{q-1} \end{bmatrix}$$

com

$$\begin{cases} G_{k,j}^{(i+1)} = G_{k,j}^{(i)} - \frac{l_{k,i}}{u_{i,i}} G_{i,j}^{(i)} \\ B_{j,k}^{(i+1)} = B_{j,k}^{(i)} - \frac{u_{i,k}}{u_{i,i}} B_{j,i}^{(i)}, \end{cases} \quad k = i+1, \dots, q-1, \quad j = 0, 1$$

Demonstração. A demonstração é imediata substituindo $l_i = (l_{i+1,i}, \dots, h_{q-1,i})^T$, $g_i^T = (G_{i0}^{(i)}, 0, G_{i1}^{(i)})$, $b_i = (B_{0i}^{(i)}, B_{1i}^{(i)}, 0)^T$ e $u_i^T = (u_{i,i+1}, \dots, u_{i,q-1})$ em (3.9) ■

Finalmente, afim de obter um algoritmo rápido de factorização $H = L \cdot U$ em $O(q^2)$ operações aritméticas, é necessário obter os elementos de L e de U a partir da equação de desvio de característica $\nabla_{\{F,R\}}(H) = G \cdot B$. A possibilidade de o fazer depende do carácter, invertível ou não, do operador. No caso do operador (3.7) é imediato verificar que este não é invertível. Com efeito, a equação (3.7), traduzida em termos das componentes das matrizes, não determina completamente os valores $h_{i,j}$.

3.3 Operadores não invertíveis

Na construção dos algoritmos que utilizam a estrutura de desvio de característica das matrizes, em cada passo de iteração, é necessário recuperar $\{l_i, u_i\}$ a partir da equação de estrutura da matriz e actualizar o par gerador $\{G_i, B_i\}$

$$\begin{array}{ccc} \{G_i, B_i\} & \xrightarrow{(2)} & \{G_{i+1}, B_{i+1}\} \\ (1) \downarrow & & \\ \{l_i, u_i\} & & \end{array} \quad (3.10)$$

Se o passo (2) resulta da aplicação directa da fórmula (3.9), o passo (1) \downarrow depende da forma das matrizes F e R na equação (3.7) [20]. Para cada classe de estrutura, resultam imediatamente as fórmulas que relacionam os elementos dos vectores l_i e u_i com as entradas do par gerador $\{G_i, B_i\}$ [21]. No entanto, na implementação de um algoritmo de decomposição triangular de uma matriz com estrutura, utilizando uma equação de desvio de característica, pode acontecer que a matriz não seja completamente recuperável a partir de G e de B [21].

Se um operador de desvio de característica

$$\nabla_{\{F,R\}}(M) = F \cdot M - M \cdot R = G \cdot B$$

tem um núcleo não trivial, da matriz M diz-se que é *parcialmente reconstruível*, porque $\{G, B\}$ contém apenas parte da informação em M [21]. A definição de par gerador pode generalizar-se ao caso dos operadores com núcleo não trivial, considerando

$$M = M_{\mathcal{X}} + M_{\mathcal{X}^\perp}$$

onde $M_{\mathcal{K}}$ constitui a parte da matriz M pertencente ao núcleo $\mathcal{K} = \ker \nabla_{\{F,R\}}(\cdot)$ e $M_{\mathcal{K}^\perp}$ a parte pertencente ao seu espaço ortogonal \mathcal{K}^\perp , relativamente à decomposição ortogonal

$$\mathbf{R}^{n \times n} = \mathcal{K} \oplus \mathcal{K}^\perp$$

A matriz M é univocamente determinada pelas matrizes G , B e $M_{\mathcal{K}}$, o que justifica a designação de *gerador* ao conjunto $\{G, B, M_{\mathcal{K}}\}$ [21].

Se, para o caso geral, parece não haver uma forma universal de tratar com o caso dos operadores não invertíveis, em alguns casos podem utilizar-se métodos especiais que permitem ultrapassar o problema [26]. Uma forma de ultrapassar a dificuldade consiste em utilizar a fórmula do complemento de Schur para calcular os elementos de $\{l_i, u_i\}$ que não são univocamente determinados pela equação de estrutura, substituindo (3.10) pela recorrência

$$\begin{array}{ccc} \{G_i, B_i, M_{\mathcal{K}_i}\} & \xrightarrow{(2)(3)} & \{G_{i+1}, B_{i+1}, M_{\mathcal{K}_{i+1}}\} \\ (1) \downarrow & & \\ \{l_i, u_i\} & & \end{array}$$

Resumindo o processo, temos três etapas em cada passo de iteração [26]:

- (1) Calcular a partir de $\{G_i, B_i, M_{\mathcal{K}_i}\}$ os vectores $\{l_i, u_i\}$
- (2) Calcular $\{G_{i+1}, B_{i+1}\}$ utilizando (3.4)
- (3) Calcular $M_{\mathcal{K}_{i+1}}$ utilizando a fórmula do complemento de Schur (3.8)

Quando $\mathcal{K} = 0$, toda a informação acerca dos n^2 elementos da matriz M está contida nos $2\alpha n$ elementos do seu par gerador $\{G, B\}$. Contudo, para o caso de o núcleo ser não trivial, então $M_{\mathcal{K}}$ é uma matriz $n \times n$ e, à primeira vista, a representação de M pelo seu conjunto gerador $\{G, B, M_{\mathcal{K}}\}$ parece não ser eficiente, no sentido em que no passo (3) não evitamos o cálculo de um complemento de Schur. No entanto, para muitas classes de estrutura, a dimensão do espaço $\mathcal{K} = \ker \nabla_{\{F,R\}}$ é pequena ($\ll n^2$) e a matriz $M_{\mathcal{K}}$ tem uma forma simples e esparsa, definida por um pequeno número de parâmetros [21].

Em [21], uma matriz H satisfazendo a equação (3.7) com $F = R^T$, é designada como sendo de *tipo Hankel polinomial*. Para estas matrizes, é sugerido um processo que permite transformar a matriz H numa matriz de *tipo Cauchy*, envolvendo uma diagonalização da matriz R .

3.3.1 Diagonalização das matrizes

A matriz tridiagonal

$$R = Q^{[-1/q]} = \begin{bmatrix} \beta_0 & \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_0 & \beta_1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \alpha_1 & \ddots & \gamma_{q-2} & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \beta_{q-2} & \gamma_{q-1} \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha_{q-2} & \beta_{q-1} \end{bmatrix}$$

pertence a uma conhecida classe de matrizes, relacionadas com uma família de polinómios $\{P_i(x)\}_{i \geq 0}$. Se os polinómios $P_i(x)$ satisfazem a relação de recorrência

$$\begin{aligned} xP_i(x) &= \alpha_i P_{i+1}(x) + \beta_i P_i(x) + \gamma_i P_{i-1}(x), \quad i \geq 1 \\ P_0(x) &= 1, \quad P_1(x) = (x - \beta_0)/\alpha_0, \quad \alpha_i, \gamma_i \neq 0 \end{aligned} \quad (3.11)$$

ao polinómio

$$p(x) = \sum_{i=0}^n a_i P_i(x), \quad a_n \neq 0$$

associamos a matriz

$$C = C(p) = \begin{bmatrix} \beta_0 & \gamma_1 & & & -\frac{a_0}{a_n} \alpha_{n-1} \\ \alpha_0 & \beta_1 & \gamma_2 & & -\frac{a_1}{a_n} \alpha_{n-1} \\ & \alpha_1 & \beta_2 & \ddots & \vdots \\ & & \alpha_2 & \ddots & \gamma_{n-2} - \frac{a_{n-3}}{a_n} \alpha_{n-1} \\ & & & \ddots & \beta_{n-2} - \frac{\gamma_{n-1}}{a_n} - \frac{a_{n-2}}{a_n} \alpha_{n-1} \\ & & & & \alpha_{n-2} - \frac{\beta_{n-1}}{a_n} - \frac{a_{n-1}}{a_n} \alpha_{n-1} \end{bmatrix}$$

Estas matrizes, introduzidas em [3] e designadas por matrizes *camaradas* do polinómio $p(x)$ na família de polinómios $\{P_i(x)\}_{i \geq 0}$, têm propriedades semelhantes às matrizes *associadas* a polinómios com coeficientes na base das potências. Nomeadamente:

1. $\det(xI - C) = p(x)$
2. Se C tem valores-próprios x_0, \dots, x_{n-1} distintos, então

$$v(x_i) = (1, P_1(x_i), \dots, P_{n-1}(x_i)), \quad i = 0, \dots, n-1$$

são os vectores-próprios

3. C é diagonalizável por

$$V \cdot C = D_x \cdot V$$

onde V é a matriz Vandermonde-polinomial $V = (v(x_0), \dots, v(x_{n-1}))^T$ e D_x é a matriz diagonal $D_x = \text{diag}(x_0, \dots, x_{n-1})$.

É imediata a identificação da matriz R com a matriz camarada do polinómio $P_q(x)$,

$$R = C(P_q(x))$$

Logo, os valores próprios de R são os zeros do polinómio $P_q(x)$ e

$$\begin{aligned} V \cdot R &= D_x \cdot V \\ V &= \begin{bmatrix} 1 & P_1(x_0) & \cdots & P_{q-1}(x_0) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & P_1(x_{q-1}) & \cdots & P_{q-1}(x_{q-1}) \end{bmatrix} \\ D_x &= \text{diag}(x_0, \dots, x_{q-1}), \quad x_i : P_q(x_i) = 0 \end{aligned}$$

Se R constitui a matriz camarada do polinómio $P_q(z)$, no sistema de polinómios ortogonais que satisfaz a relação de recorrência (3.11), então a matriz

$$C^{(k)} = \begin{bmatrix} \beta_k & \gamma_{k+1} & & & \\ \alpha_k & \beta_{k+1} & \ddots & & \\ & \alpha_{k+1} & \ddots & \gamma_{k+q-2} & \\ & & \ddots & \beta_{k+q-2} & \gamma_{k+q-1} \\ & & & \alpha_{k+q-2} & \beta_{k+q-1} \end{bmatrix}, k \geq 0$$

é a matriz camarada do polinómio $P_q^{(k)}(x)$ no sistema $\{P_i^{(k)}(x)\}_{i \geq 0}$ de polinómios ortogonais ditos associados, definido pela relação de recorrência

$$\begin{aligned} xP_i^{(k)}(x) &= \alpha_{k+i}P_{i+1}^{(k)}(x) + \beta_{k+i}P_i^{(k)}(x) + \gamma_{k+i}P_{i-1}^{(k)}(x), \quad i \geq 1 \\ P_0^{(k)}(x) &= 1, \quad P_1^{(k)}(x) = (x - \beta_k)/\alpha_k \end{aligned} \quad (3.12)$$

Com os polinómios associados, é possível obter uma diagonalização para a matriz $C^{(k)}$, como se mostra com a proposição seguinte.

Proposição 3.3 A matriz $C^{(k)} = C(P_n^{(k)}(x))$ é diagonalizável por

$$V^{(k)} \cdot C^{(k)} = D_x^{(k)} \cdot V^{(k)}$$

com

$$V^{(k)} = \begin{bmatrix} 1 & P_1^{(k)}(x_0) & \cdots & P_{n-1}^{(k)}(x_0) \\ \vdots & & & \vdots \\ 1 & P_1^{(k)}(x_{n-1}) & \cdots & P_{n-1}^{(k)}(x_{n-1}) \end{bmatrix}$$

e

$$D_x^{(k)} = \text{diag}(x_0, \dots, x_{n-1}), \quad x_i : P_n^{(k)}(x_i) = 0$$

Demonstração. Da relação de recorrência (3.12), arbitrando abcissas x_0, \dots, x_{n-1} , obtemos

$$\begin{bmatrix} x_0 & & & \\ & \ddots & & \\ & & & x_{n-1} \end{bmatrix} \cdot V^{(k)} = V^{(k)} \cdot C^{(k)} + \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & \alpha_{k+n-1}P_n^{(k)}(x_0) \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha_{k+n-1}P_n^{(k)}(x_{n-1}) \end{bmatrix}$$

Tomando para x_i os zeros do polinómio $P_n^{(k)}(x)$, fica demonstrado o resultado. ■

Com este resultado obtemos para $F = Q^{[p/q]}$

$$V^{(p+1)} \cdot F = D_x^{(p+1)} \cdot V^{(p+1)}$$

Designando as matrizes Vandermonde polinomiais por

$$\begin{aligned} M &= V^{(p+1)} = \left(P_j^{(p+1)}(y_i) \right)_{i,j=0}^{q-1}, \quad y_i : P_q^{(p+1)}(y_i) = 0 \\ N &= V^{(0)} = \left(P_j(x_i) \right)_{i,j=0}^{q-1}, \quad x_i : P_q(x_i) = 0 \end{aligned}$$

uma vez que os zeros, x_i , $i = 0, \dots, q-1$ dos polinómios ortogonais, são distintos, então N é uma matriz regular [18] e obtemos a proposição seguinte.

Proposição 3.4 *Seja $H = H^{[p/q]}$ uma matriz satisfazendo a equação (3.7), então*

$$\tilde{H} = M \cdot H \cdot N^{-1}$$

é uma matriz tipo-Cauchy que satisfaz a equação de estrutura

$$\nabla_{\{D_x^{(p+1)}, D_x^{(0)}\}}(\tilde{H}) \equiv D_x^{(p+1)} \cdot \tilde{H} - \tilde{H} \cdot D_x^{(0)} = \tilde{G} \cdot \tilde{B} \quad (3.13)$$

com $\tilde{G} = M \cdot G$ e $\tilde{B} = B \cdot N^{-1}$.

Demonstração. Em (3.7), multiplicando à esquerda por M e à direita por N^{-1} , obtemos

$$M \cdot F \cdot H \cdot N^{-1} - M \cdot H \cdot R \cdot N^{-1} = M \cdot G \cdot B \cdot N^{-1}$$

Utilizando a proposição anterior, $M \cdot F = D_x^{(p+1)} \cdot M$ e $R \cdot N^{-1} = N^{-1} \cdot D_x^{(0)}$ obtemos o resultado. ■

Calculadas as matrizes M e N , a resolução do sistema de Frobenius-Padé $H \cdot b = -h$ é equivalente a resolver para \tilde{b} , o sistema

$$\tilde{H} \cdot \tilde{b} = -\tilde{h} \quad (3.14)$$

com $\tilde{h} = M \cdot h$ e resolver para b o sistema

$$N \cdot b = \tilde{b} \quad (3.15)$$

Supondo calculados os valores x_0, \dots, x_{q-1} , a resolução do sistema (3.15), constituindo um sistema Vandermonde polinomial, pode fazer-se de forma económica, do ponto de vista do volume de aritmética envolvido, utilizando um algoritmo rápido [29], em $O(q \log^2 q)$ operações aritméticas. Analogamente, o sistema (3.14) pode resolver-se utilizando um algoritmo rápido de factorização triangular, baseado na equação de estrutura (3.13), que traduzida nas componentes das matrizes resulta em

$$(y_i - x_j) \tilde{h}_{i,j} = \tilde{g}_i \cdot \tilde{b}_j,$$

onde \tilde{g}_i representa a linha i de \tilde{G} e \tilde{b}_j a coluna j de \tilde{B} . Esta fórmula, se $y_i \neq x_j$, $i, j = 0, \dots, q-1$, permite inverter o operador e construir um algoritmo de factorização LU em $O(q^2)$ operações aritméticas [21].

Este processo deixa em aberto o problema de calcular os zeros dos polinómios ortogonais $P_q(x)$ e $P_q^{(p+1)}(x)$ ou, o que é equivalente, calcular os valores próprios das matrizes F e R . Sem pretender aprofundar o problema, pode dizer-se que um algoritmo baseado neste método será útil nos casos em que o esforço envolvido na resolução deste problema não ultrapassar os ganhos relativos à utilização da estrutura das matrizes. Este é claramente o caso dos polinómios de Chebyshev, em que os zeros são bem conhecidos.

No âmbito deste trabalho, não querendo particularizar a família de polinómios envolvida na série a aproximar, optou-se por seguir o caminho alternativo, e nesse sentido mais original, de inverter parcialmente o operador.

3.3.2 Inversão parcial do operador

Se, como vimos, a diagonalização das matrizes $F = Q^{[p/q]}$ e $R = Q^{[-1/q]}$, que definem o operador de desvio de característica $\nabla_{\{F,R\}}(H) = F \cdot H - H \cdot R$, conduz a algoritmos de resolução dos sistemas

de Frobenius-Padé em $O(q^2)$ operações, mas envolve o cálculo dos zeros de polinómios ortogonais, podemos implementar um algoritmo que não passe por tal diagonalização.

Podemos aplicar ao operador $\nabla_{\{F,R\}}$ o resultado da proposição 3.2, logo, sabemos que os complementos de Schur gerados no processo de factorização de H , constituem matrizes pertencentes à mesma classe de estrutura de H . As fórmulas (3.9) permitem actualizar as matrizes F , R , G e B , quando se passa de uma matriz para o seu complemento de Schur.

Com a proposição seguinte verifica-se que, se a primeira coluna de L e a primeira linha de U são dadas, então todas as outras se podem calcular, por recorrência, invertendo parcialmente o operador de desvio de característica.

Proposição 3.5 *A partir da equação de desvio de característica*

$$F_i \cdot H_i - H_i \cdot R_i = G_i \cdot B_i \quad (3.16)$$

a primeira linha, $u_{i+1,i+1}$ e u_{i+1} e a primeira coluna, l_{i+1} do complemento de Schur H_{i+1} , podem calcular-se por

$$\begin{cases} u_{i+1}^T = \frac{1}{f_i} u_i^T \cdot (R^{(i)} - dI) + \frac{1}{f_i} (u_{ii} s_i^T + g_i^T \cdot B^{(i)}), & d = d_i + \frac{f_i}{u_{ii}} e_1^T \cdot l_i \\ l_{i+1} = \frac{1}{r_i} (F^{(i)} - tI) \cdot l_i + \frac{1}{r_i} (u_{ii} r_i - G^{(i)} \cdot b_i), & t = t_i + \frac{r_i}{u_{ii}} u_i^T \cdot e_1 \end{cases}$$

com

$$\begin{aligned} H_i &= \begin{bmatrix} u_{ii} & u_i^T \\ l_i & H^{(i)} \end{bmatrix}, \quad u_{ii} \neq 0, \\ F_i &= \begin{bmatrix} d_i & f_i^T \\ h_i & F^{(i)} \end{bmatrix}, \quad f_i = f_i e_1 \neq 0, \quad G_i = \begin{bmatrix} g_i^T \\ G^{(i)} \end{bmatrix}, \\ R_i &= \begin{bmatrix} t_i & s_i^T \\ r_i & R^{(i)} \end{bmatrix}, \quad r_i = r_i e_1 \neq 0, \quad B_i = [b_i \quad B^{(i)}]. \end{aligned}$$

Demonstração. Identificando os blocos correspondentes em (3.16), obtemos

$$\begin{cases} u_{ii} s_i^T + u_i^T \cdot (R^{(i)} - d_i I) = -g_i^T \cdot B^{(i)} + f_i e_1^T \cdot H^{(i)} \\ u_{ii} h_i + (F^{(i)} - t_i I) \cdot l_i = G^{(i)} \cdot b_i + r_i H^{(i)} \cdot e_1 \end{cases}$$

Resolvendo ambas as equações em ordem a $H^{(i)}$, uma vez que $f_i \neq 0$ e $r_i \neq 0$, resulta que

$$\begin{cases} e_1^T \cdot H^{(i)} = \frac{1}{f_i} u_i^T \cdot (R^{(i)} - d_i I) + \frac{1}{f_i} (g_i^T \cdot B^{(i)} + u_{ii} s_i^T) \\ H^{(i)} \cdot e_1 = \frac{1}{r_i} (F^{(i)} - t_i I) \cdot l_i - \frac{1}{r_i} (G^{(i)} \cdot b_i - u_{ii} h_i) \end{cases}$$

e a demonstração fica completa notando que

$$H_{i+1} = H^{(i)} - \frac{1}{u_{ii}} l_i \cdot u_i^T$$

■

Deve notar-se que as condições $f_i \neq 0$ e $r_i \neq 0$ não representam de facto qualquer restrição ao objectivo de implementar um algoritmo rápido de resolução dos sistemas FP, uma vez que, da definição de F e de R , e de (3.9) temos que $f_i = \gamma_{p+2+i}$ e $r_i = \alpha_i$, $i = 0, \dots, q-1$ e que $\alpha_i, \gamma_i \neq 0$, $i \geq 0$ da condição de ortogonalidade dos polinómios P_i .

A vantagem de um algoritmo baseado nesta proposição, reside no facto de que, em cada iteração, apenas é necessário calcular a primeira linha e a primeira coluna do complemento de Shur M_{i+1} . Este facto reduz de $(q-i)^2$ para $2(q-i)$ o número de operações aritméticas envolvidas no processo de complemento de Shur. A necessidade de actualizar as matrizes do operador $\nabla_{\{F_i, R_i\}}$ e do par gerador $\{G_i, B_i\}$ representa o esforço de cálculo adicional, permitindo implementar um algoritmo de factorização LU em $O(q^2)$ operações aritméticas elementares, como se mostra na secção seguinte.

3.4 Algoritmo e resultados

O resultado da proposição anterior, justifica o seguinte algoritmo de factorização LU de matrizes de Frobenius-Padé $H = H^{[p/q]}$, baseado na sua estrutura de desvio de característica.

Algoritmo 3.1

Dados: $p, q, \in \mathbb{N}$

$$h_{i,j}, i = p, p+1, p+q+1, j = 0, \dots, q-1,$$

$$h_{i,j}, i = p+1, \dots, p+q, j = 0, q$$

Calcula: $\{L, U\} : H^{[p/q]} = L \cdot U$

Parâmetros: $\{\alpha_i, \alpha_{p+1+i}\}_{i=0}^{q-2}, \{\beta_i, \beta_{p+1+i}\}_{i=0}^{q-1}, \{\gamma_i, \gamma_{p+1+i}\}_{i=1}^{q-1}$

Notação:
$$L_i = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ l_i & L_{i+1} \end{bmatrix}, \quad U_i = \begin{bmatrix} u_{i,i} & u_i^T \\ 0 & U_{i+1} \end{bmatrix},$$

$$F_i = \begin{bmatrix} d_i & f_i^T \\ h_i & F^{(i)} \end{bmatrix}, \quad R_i = \begin{bmatrix} t_i & s_i^T \\ r_i & R^{(i)} \end{bmatrix}, \quad G_i = \begin{bmatrix} g_i^T \\ G^{(i)} \end{bmatrix}, \quad B_i = [b_i \quad B^{(i)}]$$

Valores iniciais: $F_0 = F, R_0 = R, G_0 = G, B_0 = B$, matrizes definidas como na proposição 3.1,

Calcular: $u_{0,0} = h_{p+1,0}, u_0 = (h_{p+1,1}, \dots, h_{p+1,q-1}), l_0 = (h_{p+2,0}, \dots, h_{p+q,0})^T$

Para $i = 0, q-2$

Se $u_{ii} = 0$ então "u_{ii} é nulo" e Termina

$$d = d_i + \frac{f_i}{u_{ii}} l_{i+1,i}$$

$$t = t_i + \frac{r_i}{u_{ii}} u_{i,i+1}$$

$$u_{i+1}^T = \frac{1}{f_i} u_i^T \cdot (R^{(i)} - dI) + \frac{1}{f_i} (u_{ii} s_i^T + g_i^T \cdot B^{(i)})$$

$$l_{i+1} = \frac{1}{r_i} (F^{(i)} - tI) \cdot l_i + \frac{1}{r_i} (u_{ii} r_i - G^{(i)} \cdot b_i)$$

$$F_{i+1} = F^{(i)} - \frac{1}{u_{ii}} l_i \cdot f_i^T$$

$$R_{i+1} = R^{(i)} - \frac{1}{u_{ii}} r_i \cdot u_i^T$$

$$G_{i+1} = G^{(i)} - \frac{1}{u_{ii}} l_i \cdot g_i^T$$

$$B_{i+1} = B^{(i)} - \frac{1}{u_{ii}} b_i \cdot u_i^T$$

Fim i

Contando o número de operações aritméticas, verifica-se que este algoritmo efectua a factorização LU da matriz $q \times q$, $H^{[p/q]}$ em $(3q-1)^2$ multiplicações. Para calcular os coeficientes do aproximante $[p/q]_f^p$ são ainda necessárias q^2 multiplicações para resolver os dois sistemas triangulares obtidos com esta factorização e $(p+1)q$ multiplicações para calcular os $p+1$ coeficientes a_i .

Refira-se que, com este algoritmo, para o cálculo da factorização LU da matriz $H^{[p/q]}$, não é necessário calcular todos os elementos da matriz. De facto, as matrizes L e U são calculadas a partir dos valores da primeira linha e da primeira coluna de $H^{[p/q]}$ e das matrizes geradoras G, B . Sendo a primeira coluna de $H^{[p/q]}$ composta de coeficientes de Fourier da função, $h_{i,0} = f_i$, $i = p+1, \dots, p+q$, então apenas necessitamos de avaliar três vectores de coeficientes $h_{i,j}$: a primeira linha da matriz $H^{[p/q]}$, constituída pelos elementos $\{h_{p+1,i}\}_{i=0}^{q-1}$; a coluna $\{h_{i,q}\}_{i=p+1}^{p+q}$ que constitui simultaneamente a última coluna da matriz G e o vector dos termos independentes do sistema FP; as linhas $\{h_{p,i}\}_{i=0}^{q-1}$ e $\{h_{p+q+1,i}\}_{i=0}^{q-1}$ da matriz B . Nesta situação, do ponto de vista do volume de aritmética, parece vantajoso utilizar o algoritmo baseado nos coeficientes de linearização, apresentado em 2.2.2. De facto, este algoritmo calcula cada elemento $h_{i,j}$, para o caso de a família de polinómios envolvida pertencer à classe de Gegenbauer, com j multiplicações, o que totaliza $\frac{1}{2}q(5q-3)$, contra as $5q(p+q)$ multiplicações necessárias para calcular os mesmos elementos por recorrência.

Resultados Numéricos

Este algoritmo foi programado em Fortran, com aritmética de dupla precisão. Para testar a sua eficiência computacional, foram feitas diversas experiências numéricas.

Exemplo 3.1 Retomando a família dos polinómios de Laguerre $L_n^{(\alpha)}(x)$, referida no exemplo 2.5 do capítulo anterior, e que se define [24] como os polinómios com coeficiente principal $(-1)^n/n!$ correspondentes à função peso

$$w(x) = x^\alpha e^{-x}, \quad \alpha > -1, \quad x > 0.$$

Temos, neste caso,

$$\alpha_n = -(n+1), \quad \beta_n = 2n + \alpha + 1, \quad \gamma_n = -(n + \alpha). \quad (3.17)$$

logo, com $\alpha = 0$, as matrizes F e R do operador de desvio de característica são

$$F = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 3 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & -2 & \ddots & 2-q & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 2q-3 & 1-q \\ 0 & \cdots & 0 & 1-q & 2q-1 \end{bmatrix}$$

e

$$R = \begin{bmatrix} 2p+3 & -(p+2) & 0 & \cdots & 0 \\ -(p+2) & 2p+5 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & -(p+3) & \ddots & -(p+q-1) & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 2p+2q-1 & -(p+q) \\ 0 & \cdots & 0 & -(p+q) & 2p+2q+1 \end{bmatrix}$$

O programa foi testado tomando $f(z)$ a partir da função geradora dos polinómios de Laguerre [24],

$$f_a(z) = (1-a)^{-\alpha-1} e^{-\frac{a}{1-a}z} = \sum_{n \geq 0} a^n L_n^\alpha(z), \quad z > 0$$

com $\alpha = 0$ e para diversos valores de a . Nestes casos $f_i = a^i$, $i \geq 0$ e com as fórmulas de recorrência do exemplo 2.5 podem calcular-se os elementos $h_{i,j}$ envolvidos no cálculo dos coeficientes de cada aproximante. Os resultados apresentados nas figuras seguintes, correspondem a tomar $a = 1/2$ para aproximar a função

$$f_{1/2}(z) = 2e^{-z} = \sum_{n \geq 0} 2^{-n} L_n(z), \quad z > 0$$

e $a = -1$ para aproximar a função

$$f_{-1}(z) = \frac{1}{2} e^{\frac{1}{2}z} = \sum_{n \geq 0} (-1)^n L_n(z), \quad z > 0$$

Com o objectivo de comparar os resultados do algoritmo, com resultados obtidos com rotinas de decomposição LU gerais, resolveram-se os sistemas $H^{[p/q]} \cdot b = -h^{[p/q]}$, para uma amostra de pares de valores (p, q) , utilizando o algoritmo rápido de decomposição LU proposto na secção anterior, e calcularam-se os vectores dos resíduos $r^{[p/q]} = H^{[p/q]} \cdot \tilde{b} + h^{[p/q]}$ obtidos, onde \tilde{b} representa a solução numérica calculada. Os mesmos sistemas foram resolvidos com uma rotina padrão, resolvendo um sistema de equações lineares com uma matriz genérica de coeficientes reais utilizando factorização LU baseada na eliminação de Gauss com pivotagem parcial. Nas figuras 3.1 e 3.2 representa-se, para as duas funções tomadas como exemplo, a componente máxima do resíduo, isto é $\|r^{[p/q]}\|_\infty$, obtida com ambas as rotinas, para os valores de p e de q indicados.

Nos casos observados, verifica-se que ambas as rotinas produzem soluções associadas a vectores de resíduos cujas componentes crescem rapidamente com a dimensão do sistema. Os resíduos obtidos são consistentemente menores com o algoritmo rápido do que com o algoritmo geral, para as primeiras colunas da tabela. Com valores de q crescentes, a vantagem da solução com o novo algoritmo, vai desaparecendo.

A superioridade dos resultados obtidos com o algoritmo rápido, relativamente aos resultados obtidos com algoritmos que não consideram a estrutura da matriz, constitui uma característica comum a outros algoritmos rápidos [22].

Para satisfação do objectivo da resolução destes sistemas, isto é para calcular os coeficientes dos AFP, encontrar soluções afectadas de resíduos pequenos, é mais importante do que encontrar soluções afectadas de erros pequenos. Com efeito, designando por

$$r^{[p/q]} = (r_0, \dots, r_{q-1})^T$$

o vector dos resíduos, e por

$$\tilde{b} = (\tilde{b}_0, \dots, \tilde{b}_{q-1})^T$$

a solução calculada, tal que

$$H^{[p/q]} \cdot \tilde{b} = -h^{[p/q]} + r^{[p/q]}$$

então, uma vez que as primeiras $p+1$ equações em (2.4) são resolvidas de forma exacta, com $G^{[p/q]}$ definida em (2.6), com

$$\tilde{a} = G^{[p/q]} \cdot \tilde{b}$$

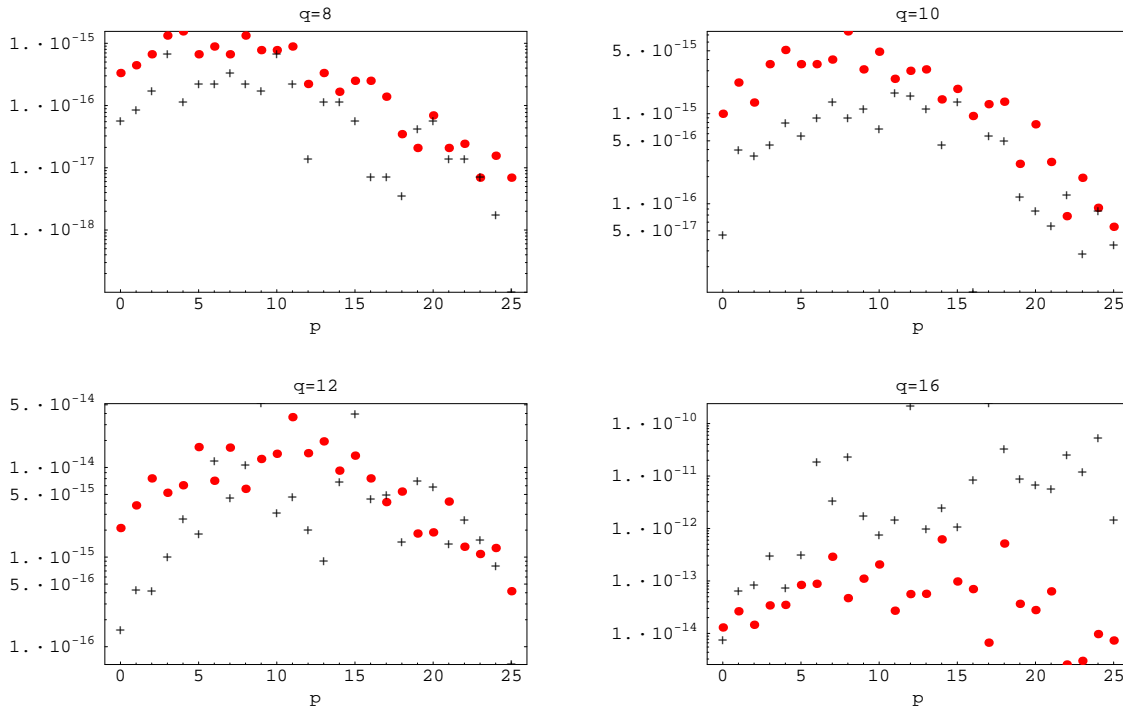


Figura 3.1: $\|r^{[p/q]}\|_{\infty}$, para $f_{1/2}(z) = 2e^{-z}$, com o algoritmo rápido de decomposição LU (+) e com uma rotina padrão (•)

obtemos um aproximante

$$[\widetilde{p/q}]_f^P(z) = \tilde{N}(z)/\tilde{D}(z)$$

que em vez de (2.1), satisfaz

$$\tilde{N}(z) - \tilde{D}(z)f(z) + R(z) = O(P_{p+q+1})$$

com

$$R(z) = \sum_{i=0}^{q-1} r_i P_{p+1+i}(z)$$

Ou seja, a condição, fundamental na definição dos AFP, de o erro constituir uma série de ordem P_{p+q+1} , é satisfeita de forma exacta na parte principal da série, i.e. nos coeficientes de P_0, \dots, P_p que são todos nulos. Para os coeficientes de P_{p+1}, \dots, P_{p+q} , em vez do valor nulo, obtemos os valores dos resíduos r_i , desejavelmente pequenos em valor absoluto.

Como previsto, podemos verificar que, para as duas funções testadas, a resíduos pequenos na solução do sistema FP, correspondem erros pequenos na aproximação racional. Nas figuras 3.3 e 3.4 apresentam-se as curvas do valor absoluto do erro relativo $|(f(z) - [p/q]_f^L(z))/f(z)|$ em escala logarítmica, para os pares de valores (p, q) indicados, obtidas com ambos os métodos de resolução numérica do sistema FP: utilizando o novo algoritmo (+); e utilizando uma factorização LU geral (•). Para além das primeiras colunas da tabela, onde os gráficos do erro relativo nas duas rotinas coincidem, podemos observar que o algoritmo baseado na estrutura de desvio de característica produz uma solução com mais algarismos significativos correctos, na generalidade dos pontos do intervalo, do que a solução baseada na eliminação de Gauss.

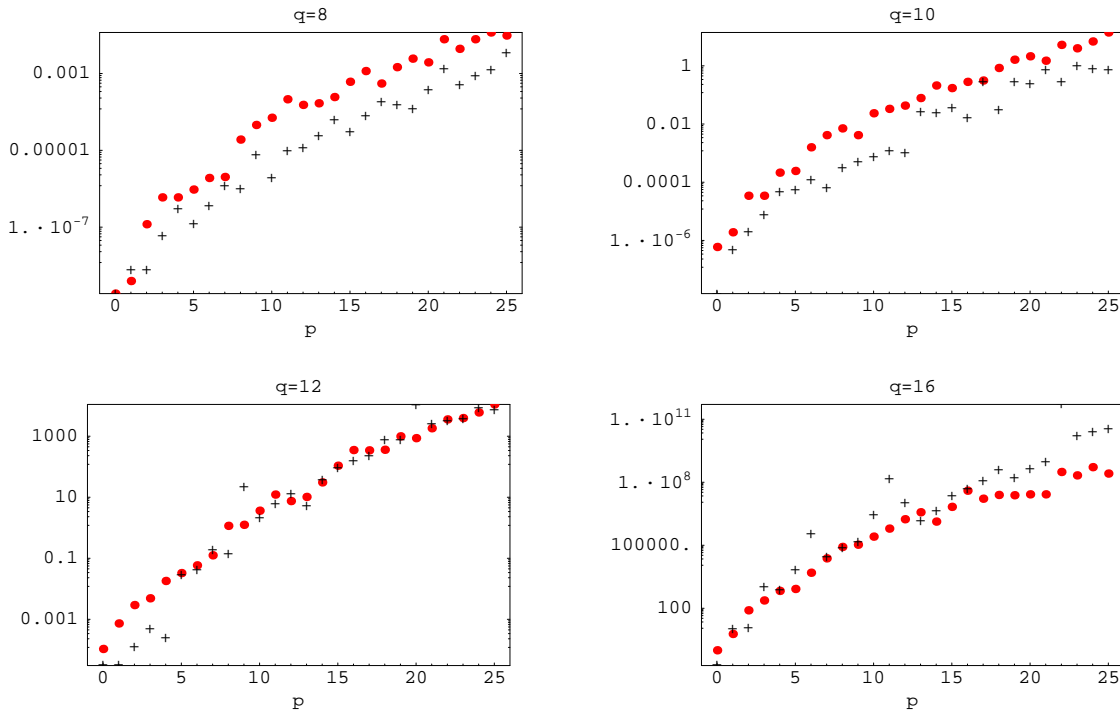


Figura 3.2: $\|r^{[p/q]}\|_\infty$, para $f_{-1}(z) = \frac{1}{2}e^{\frac{1}{2}z}$, com o algoritmo rápido de decomposição LU (+) e com uma rotina padrão (•)

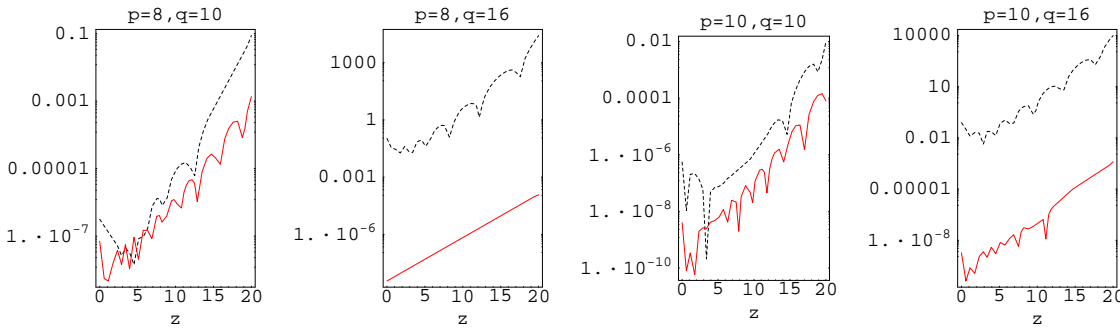


Figura 3.3: $\left| \frac{f(z) - [p/q]_f^P(z)}{f(z)} \right|$, com o algoritmo rápido de factorização LU (a cheio) e com factorização LU padrão (tracejado), para $f_{1/2}(z) = 2e^{-z}$

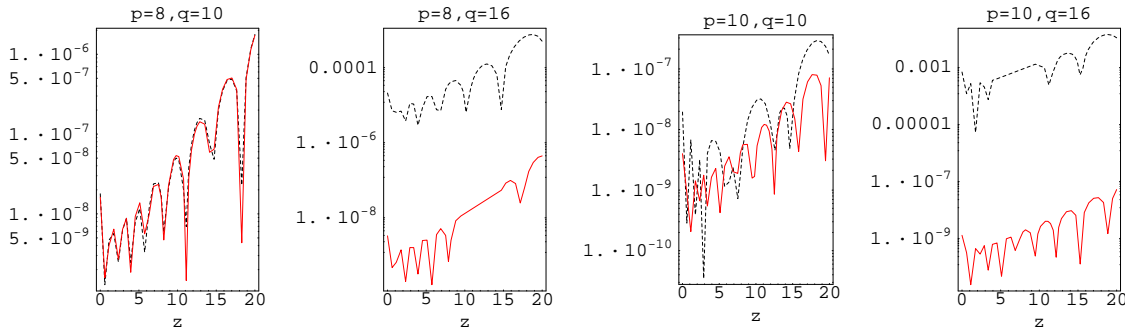


Figura 3.4: $\left| (f(z) - [p/q]_f^P(z)) / f(z) \right|$, com o algoritmo rápido de factorização LU (a cheio) e com factorização LU padrão (tracejado), para $f_{-1}(z) = \frac{1}{2}e^{\frac{1}{2}z}$

Na tentativa de explicar os resultados numéricos obtidos na resolução dos sistemas, exibindo vectores de resíduos com componentes consideravelmente grandes, podemos utilizar rotinas padronizadas para calcular estimativas do número de condição das matrizes. Para os pares de valores (p, q) seleccionados, a matriz $H = H^{[p/q]}$ foi calculada e utilizou-se a rotina *DLFCRG*, incluída na biblioteca *IMSL MATH/LIBRARY* fornecida com o *Microsoft Developer Studio* juntamente com o compilador *Fortran 90* da *Microsoft*, para calcular uma estimativa do número de condição da matriz. Os valores apresentados na tabela 3.1 correspondem à definição $cond_1(H) = \|H\|_1 \|H^{-1}\|_1$. A tabela representa, em cada posição (p, q) indicada, a ordem de grandeza do número de condição de $H^{[p/q]}$, isto é $\log_{10}(cond_1(H))$ arredondado a inteiro.

		a=-1									a=0.5								
		0	4	7	11	15	18	22	26	29	0	3	6	9	11	14	17	18	19
p	0	0	4	7	11	15	18	22	26	29	0	3	6	9	11	14	17	18	19
	4	0	6	11	15	19	23	27	31	34	0	4	8	10	13	16	18	19	18
	8	0	7	13	18	22	27	31	34	37	0	5	9	12	15	18	18	20	19
	12	0	8	14	20	25	30	33	36	39	0	6	10	14	17	19	20	20	21
		1	4	7	10	13	16	19	22	25	1	4	7	10	13	16	19	22	25
		q									q								

Tabela 3.1: Ordem de grandeza decimal do número de condição de $H^{[p/q]}$, i.e. $\log_{10}(cond_1(H^{[p/q]}))$ arredondado a inteiro, para $f_{-1}(z) = \frac{1}{2}e^{\frac{1}{2}z}$ com $a = -1$ e para $f_{1/2}(z) = 2e^{-z}$ com $a = 0.5$

Na tabela, podemos observar que as matrizes de Frobenius-Padé calculadas, são extremamente mal condicionadas. Variando o número de condição, nos casos observados, entre aproximadamente 10^3 para uma matriz 4×4 e 10^39 para uma matriz 25×25 , poderíamos esperar resultados catastróficos na resolução dos sistemas. Como ficou exposto, o facto de os erros no cálculo dos coeficientes $a_i, i = 0, \dots, p$ e $b_i, i = 0, \dots, q - 1$ só afectarem os coeficientes da ordem de aproximação a partir do grau $p + 1$, explica os bons resultados obtidos com os aproximantes, ilustrados nas figuras 3.3 e 3.4.

Um exemplo, envolvendo outra família de polinómios ortogonais, foi testado.

Exemplo 3.2 Considerando para $f(z)$ a função geradora dos polinómios de Legendre, introduzidos no exemplo 2.1

$$f(z) = \frac{1}{\sqrt{1-2az+a^2}} = \sum_{i \geq 0} a^i P_i(z).$$

Neste caso

$$\alpha_i = \frac{i+1}{2i+1}, \quad \beta_i = 0, \quad \gamma_i = \frac{i}{2i+1}, \quad i \geq 0$$

e

$$f_i = a^i, \quad i \geq 0,$$

para cada valor do parâmetro a , são os dados para o programa.

Para valores de $a < 1$ a série converge no interior da elipse ϵ_a com focos em ± 1 e semi-eixos $\frac{1}{2}(a+a^{-1})$ e $\frac{1}{2}(a^{-1}-a)$ [15]. O programa foi testado com o parâmetro, *próximo* da fronteira dos valores de convergência, $a = 0.8$. Com este valor do parâmetro, a função

$$f(z) = \frac{5}{\sqrt{41-40z}},$$

tem uma singularidade no ponto $z = 41/40 = 1.025$. Diversos valores de p e de q foram considerados para o programa e os resultados obtidos são ilustrados nas tabelas e nos gráficos seguintes.

Na tabela 3.2, apresentam-se os resultados da aproximação, em termos do número de dígitos decimais exactos $-\log_{10}(|f(z) - [p/q]_f^p(z)|)$ arredondado a inteiro, num ponto *próximo* da singularidade da função $z = 0.9$, onde os valores dos aproximantes são comparados com o valor exacto da função $f(0.9) = \sqrt{5}$, e num ponto mais afastado da singularidade, $z = -0.5$ onde a função toma o valor $f(-0.5) = 5/\sqrt{61}$. Dos valores tabelados, destaca-se a perturbação introduzida pela singularidade, impedindo os resultados de ir além das 12 casas decimais exactas na aproximação de $f(0.9)$. Outro facto a destacar é a qualidade da aproximação na abcissa $z = -0.5$, consistentemente nas 16 casas decimais exactas, coincidentes com a dupla precisão utilizada no cálculo dos coeficientes.

Os mesmos aproximantes calculados, podem utilizar-se para testar a qualidade da aproximação no domínio de convergência da série. Na figura 3.5 representa-se a precisão $-\log_{10}(|f(z) - [p/q]_f^p(z)|)$ na aproximação da função nos pontos interiores da elipse ϵ_a . Para efeitos de comparação, juntamente com os resultados referentes a três aproximantes da diagonal da tabela, apresenta-se o resultado obtido com a soma parcial da série, considerados 24 termos, tantos quantos os necessários para calcular os coeficientes do aproximante $[8/8]_f^p$. Dos resultados destaca-se a vantagem dos aproximantes racionais, mesmo os que envolvem menos termos do que as somas parciais, em todos os pontos do domínio de convergência da série.

Nos gráficos da figura 3.6 destaca-se o erro relativo $|(f(z) - [p/q]_f^p(z))/f(z)|$ em escala logarítmica, para os pontos do intervalo $-1 < z < 1$. Em cada um dos dois gráficos, apresenta-se um conjunto de curvas relativas a aproximantes calculados com o mesmo número de termos da série. Nos exemplos observados, verifica-se que os melhores resultados são obtidos com aproximantes localizados na vizinhança da diagonal principal da tabela, i.e. tais que $p \approx q$. Outro facto, confirmando o factor perturbador introduzido pela singularidade da função, é que o ganho de precisão,

		z=0.9							z=-0.5										
		0	5	10	15	20	25	30			0	5	10	15	20	25	30	35	40
p	4	1	4	6	6	6	6	5	2	8	12	12	12	10	9	9	8		
	8	1	6	8	7	7	6	5	2	11	14	13	12	10	10	10	9		
	12	1	8	9	8	8	8	8	2	14	16	15	13	14	13	13	12		
	16	3	9	9	10	9	9	9	3	16	15	15	16	16	15	16	16		
	20	2	10	11	10	10	10	10	3	16	16	15	16	16	15	15	15		
	24	3	12	11	11	11	11	11	3	16	16	16	16	16	16	16	15		
	28	3	10	11	12	11	11	11	5	16	15	15	16	16	16	15	15		
	32	4	10	10	12	10	10	10	4	16	16	16	16	16	15	16	16		
	36	4	10	11	9	11	10	10	5	15	16	16	15	15	16	15	16		

Tabela 3.2: Número de dígitos decimais exactos, $-\log_{10}(|f(z) - [p/q]_f^p(z)|)$ arredondado a inteiro, na aproximação de $f(0.9)$ e de $f(-0.5)$, para $f(z) = \frac{5}{\sqrt{41-40z}}$

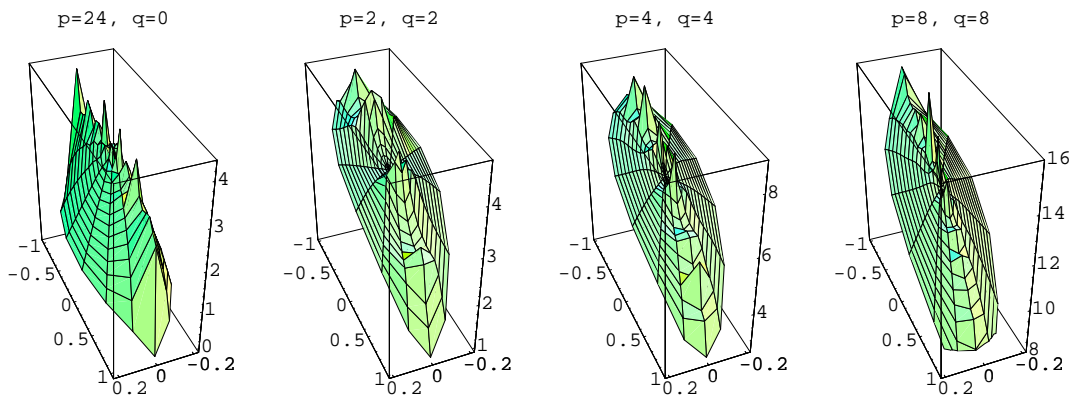


Figura 3.5: $-\log_{10}(|f(z) - [p/q]_f^p(z)|)$ para $f(z) = \frac{5}{\sqrt{41-40z}}$

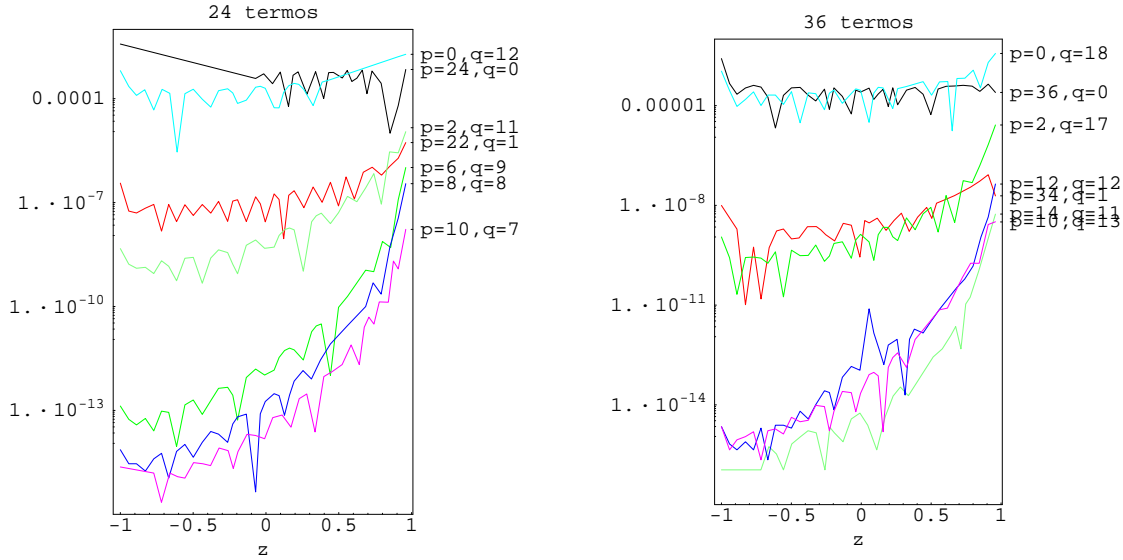


Figura 3.6: $|(f(z) - [p/q]_f^P(z))/f(z)|$ para $f(z) = \frac{5}{\sqrt{41-40z}}$

com a progressão no sentido da diagonal da tabela, é tanto maior, em cada ponto z , quanto mais afastado está o ponto do extremo $z = 1$.

Este exemplo pode utilizar-se para ilustrar uma propriedade destes aproximantes racionais, partilhada com os aproximantes de Padé e referida em [25], relativamente aos zeros e aos pólos dos aproximantes. Consiste esta propriedade no aparecimento de um conjunto de pólos dos aproximantes acumulados fora do domínio de analiticidade da função, ou seja neste caso, a existência de pólos acumulados sobre o corte no plano complexo $z > 1.025$. Para além desses, observam-se outros pólos, cuja posição varia com a ordem de aproximação, e que aparecem frequentemente *cancelados* pelos zeros dos aproximantes. Calculados os coeficientes dos aproximantes, utilizou-se uma rotina geral de determinação de zeros de polinómios, no caso a função *Solve* do *Mathematica*, os resultados apresentam-se na figura 3.7.

Comparação de resultados com outros algoritmos

Em [34] apresentam-se dois algoritmos recursivos de cálculo de sucessões de aproximantes da tabela Padé-Legendre. Evitando a resolução numérica do sistema de equações lineares associado ao cálculo dos coeficientes dos denominadores, ambos os algoritmos são baseados em relações de recorrência envolvendo os numeradores e os denominadores dos aproximantes. Estes algoritmos de A.C. Matos, para além da aplicação ao cálculo dos aproximantes de Padé-Legendre, podem sem dificuldade, aplicar-se a toda a classe mais lata, dos aproximantes de Frobenius-Padé. Progredindo por recorrência, estes algoritmos são indicados para calcular sucessões de aproximantes. Nesse sentido, se o objectivo consiste no cálculo dos coeficientes da sucessão $[N - q/q]_f^P(z)$, $q = 0, \dots, N$,

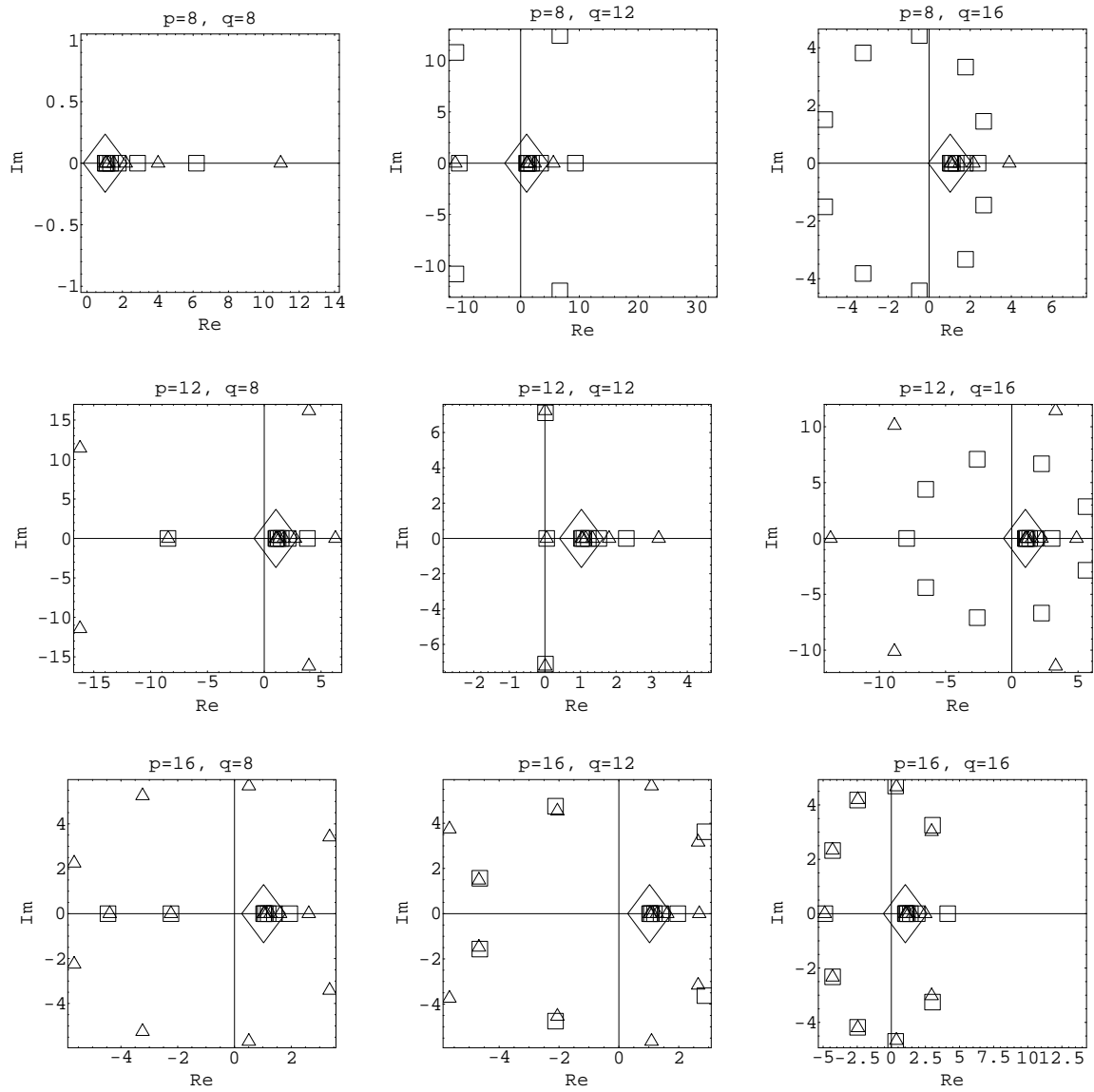


Figura 3.7: Os zeros (\square) e os pólos (\triangle) dos aproximantes e a singularidade da função (\diamond), para $f(z) = \frac{5}{\sqrt{41-40z}}$

ou no conjunto de aproximantes $[p/q]_f^p(z)$, tal que $p + 2q \leq N$, com N fixo, respectivamente, o algoritmo designado por tipo Kronecker (Kta) ou o algoritmo designado por tipo Frobenius (Fta), são indubitavelmente melhores, em termos do volume de aritmética, do que o algoritmo baseado na estrutura de desvio de característica (EDCa) aqui proposto.

Estes algoritmos foram programados, tal como o algoritmo EDCa, em Fortran com aritmética de dupla precisão. Os gráficos seguintes ilustram os resultados das experiências numéricas efectuadas.

Na figura 3.8 compara-se o erro relativo no AFP obtido com o algoritmo EDCa, com o obtido com o algoritmo Kta. Nestes gráficos observa-se, para além dos fracos resultados, com ambos os algoritmos, em abcissas próximas do extremo $z = 1$, que os resultados são quase coincidentes para aproximantes de baixa ordem, para valores intermédios de p e de q os aproximantes obtidos com o algoritmo Kta são mais precisos, em quase todos os pontos do intervalo, e que o algoritmo EDCa se torna mais preciso do que o concorrente, com valores de p e de q crescentes.

Os mesmos comentários podem fazer-se quanto à comparação dos resultados com os obtidos com o algoritmo Fta, como se pode observar nos gráficos da figura 3.9. Neste caso, a vantagem dos aproximantes calculados com o algoritmo EDCa é ainda mais expressiva.

Com um volume de aritmética de $O(q^2)$ multiplicações, o algoritmo Kta pode competir com o algoritmo EDCa se o objectivo consiste em calcular os coeficientes de apenas um aproximante $[p/q]_f^p(z)$. Este não é, no entanto o caso do algoritmo Fta, com um volume de aritmética de $O(q^3)$ multiplicações.

3.5 Conclusões

Neste capítulo, revelou-se a existência de uma estrutura de desvio de característica nas matrizes de Frobenius-Padé. Esta estrutura foi explorada, com sucesso, no desenvolvimento de um algoritmo rápido de factorização triangular das matrizes de Frobenius-Padé.

O algoritmo apresentado revelou-se suficientemente robusto para produzir aproximantes de grande precisão. Frequentemente, nos exemplos apresentados, os resultados da aproximação da função, coincidem ou aproximam-se dos 16 algarismos significativos exactos, ou seja, da precisão de cálculo utilizada na implementação do algoritmo. Este resultado é tanto mais surpreendente quanto as matrizes envolvidas são significativamente mal condicionadas. Uma possível explicação para este facto, apresentada com os comentários aos resultados do exemplo 3.1, reside no facto de que, com este algoritmo, a perturbação aritmética introduzida no processo de cálculo dos coeficientes dos aproximantes, manter a ordem de aproximação exacta, pelo menos, nos primeiros coeficientes do erro.

Com o objectivo de comparar o algoritmo apresentado neste capítulo com um algoritmo de factorização LU , baseado na eliminação de Gauss com pivotagem parcial, efectuaram-se diversos testes numéricos. Nos resultados observados, o algoritmo proposto compete favoravelmente com o processo clássico, no sentido em que os coeficientes calculados conduzem a aproximantes mais precisos. A mesma comparação, foi efectuada com outros algoritmos recolhidos da literatura, tendo-se verificado que, comparativamente a dois algoritmos recursivos de cálculo dos aproximantes Padé-Legendre, o novo algoritmo aparenta maior estabilidade numérica, uma vez que produz aproximantes mais precisos para ordens de aproximação mais elevadas.

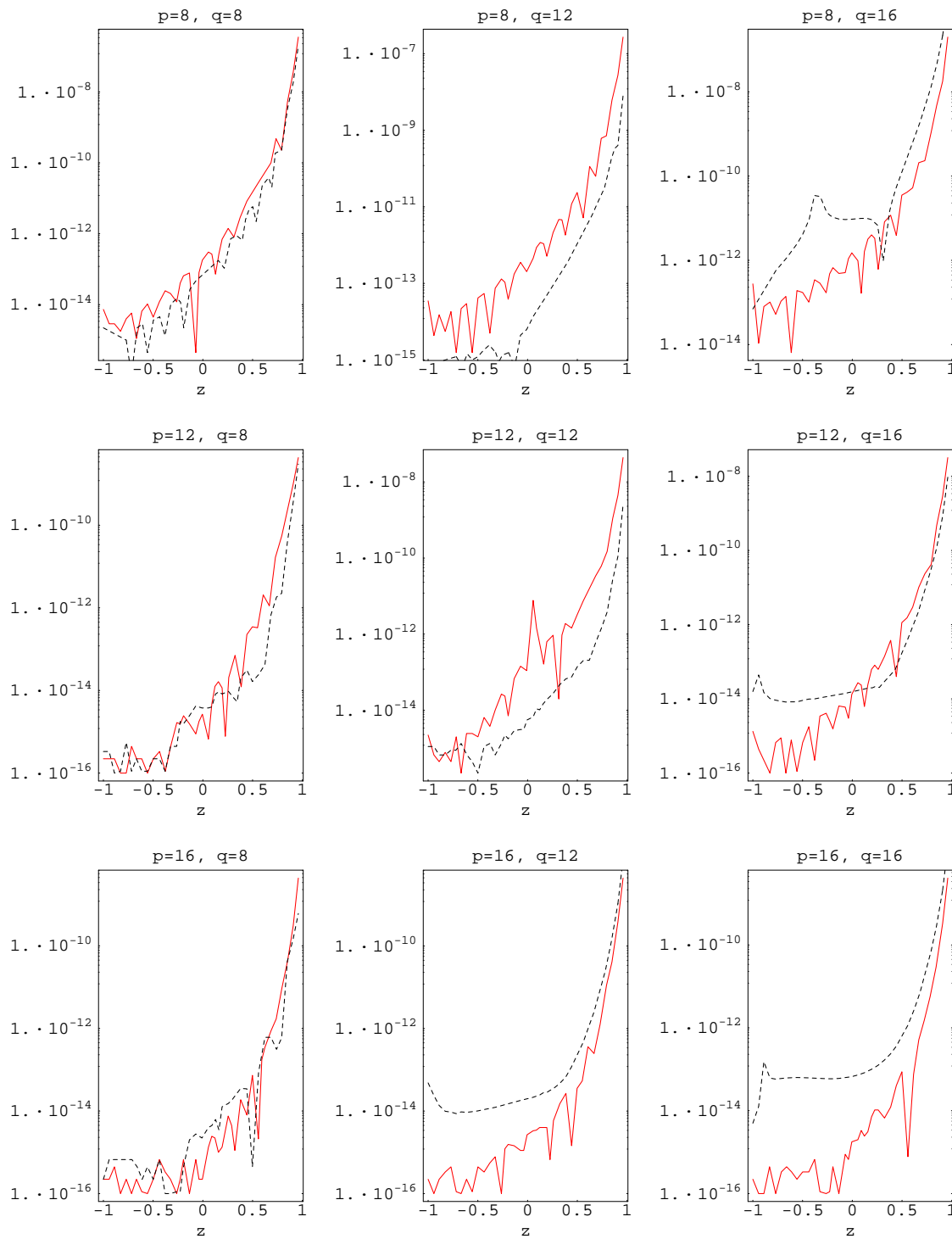


Figura 3.8: $|(f(z) - [p/q]_f^p(z))/f(z)|$, com o algoritmo rápido de decomposição *LU* (a cheio) e com o algoritmo tipo Kronecker (tracejado), para $f(z) = \frac{5}{\sqrt{41-40z}}$

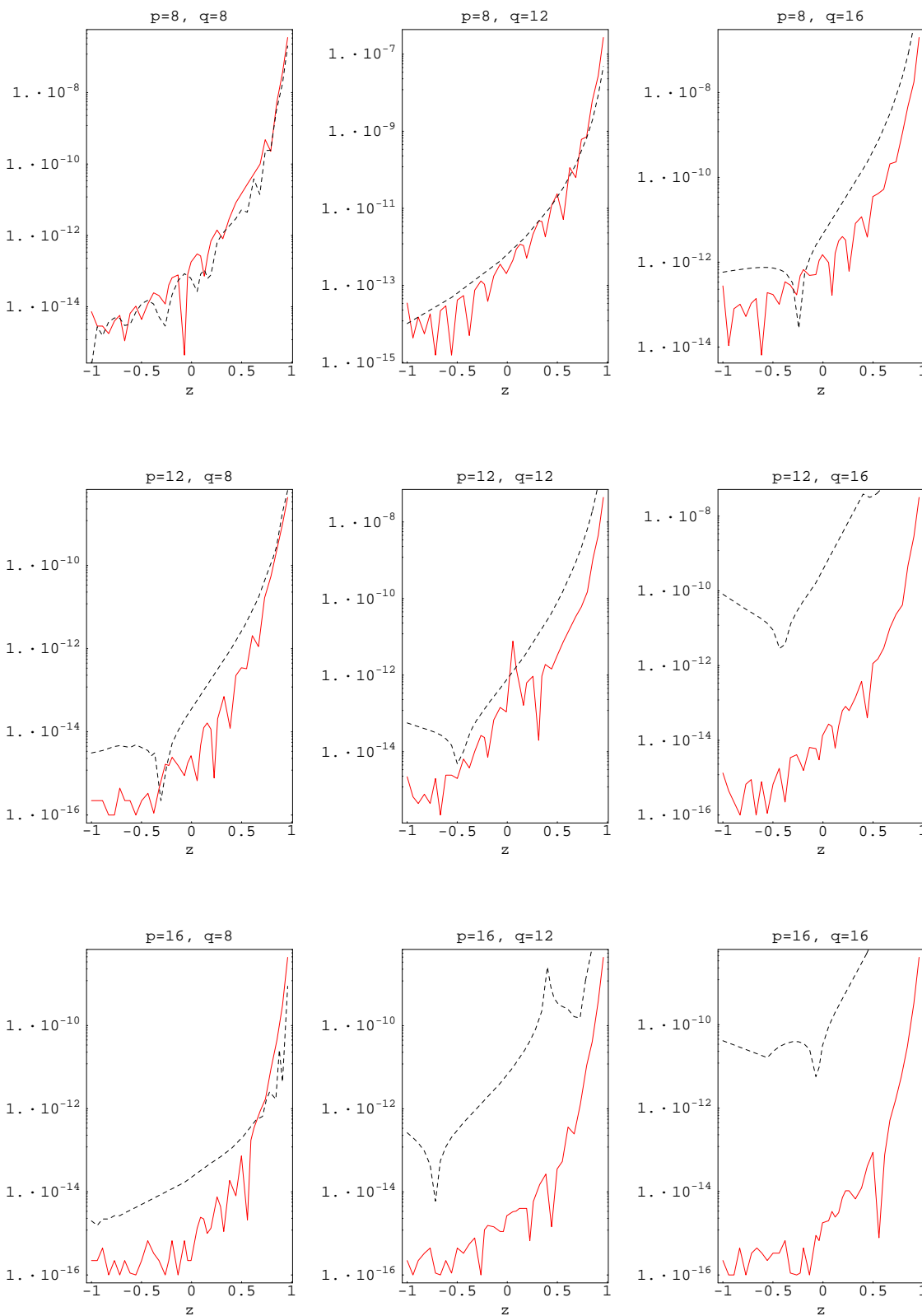


Figura 3.9: $|(f(z) - [p/q]_f^p(z))/f(z)|$, com o algoritmo rápido de decomposição LU (a cheio) e com o algoritmo tipo Frobenius (tracejado), para $f(z) = \frac{5}{\sqrt{41-40z}}$

Na secção 3.3.1 descreve-se um processo alternativo ao desenvolvido neste trabalho, que consiste em alterar a classe de estrutura das matrizes de Frobenius-Padé, por via da diagonalização das matrizes associadas ao operador. Este processo não foi utilizado porque envolve os zeros dos polinómios ortogonais e os zeros dos polinómios ortogonais associados. A possibilidade de implementação de um algoritmo baseado neste processo, é promissora para os casos que envolvam famílias de polinómios ortogonais de que se conhecem os respectivos zeros. Sendo a família dos polinómios de Chebyshev um desses casos, fica em aberto o estudo da aplicação generalizada, i.e. para qualquer família de polinómios ortogonais, deste algoritmo.

A possibilidade de contornar quebras do algoritmo, na eventualidade da existência de algum *pivot* nulo, implementando o algoritmo na base de uma partição das matrizes por blocos, é deixada como trabalho futuro. Outro tema que é deixado para futura reflexão, consiste na introdução de pivotagem no algoritmo. A simples permuta de linhas ou de colunas da matriz, porque destrói a sua estrutura, não se apresenta como uma técnica compatível com um algoritmo baseado nessa mesma estrutura. Fica em aberto a resolução dos problemas surgidos com esta técnica de pivotagem e a pesquisa de eventuais técnicas que possam constituir alternativa.

A estrutura das matrizes de Frobenius-Padé, como ficou demonstrado, constitui uma consequência directa da relação de recorrência de ordem dois, característica dos polinómios ortogonais. Este facto sugere a possibilidade de utilizar a mesma técnica para aproximar outros desenvolvimentos em série, que não séries de Fourier em polinómios ortogonais, definidos em bases de funções satisfazendo algum tipo de relação de recorrência mais geral. Este assunto é retomado no último capítulo da tese.

A implementação do algoritmo apresentado neste capítulo em conjunto com o algoritmo apresentado no capítulo anterior, é elementar e serve para calcular uma sucessão de aproximantes da mesma linha da tabela de Frobenius-Padé. O cálculo recursivo de sucessões de aproximantes AFP é o objectivo do capítulo seguinte desta tese, onde este tema é detalhado.

Capítulo 4

Relações de Recorrência na tabela de Frobenius-Padé

4.1 Identidades de tipo Frobenius generalizadas

Tal como no caso da aproximação de Padé, em que é possível estabelecerem-se alguns resultados relacionando elementos adjacentes da tabela de Padé, ver [5] e [7], também no caso da aproximação de Frobenius-Padé, se podem encontrar relações entre elementos adjacentes da tabela de Frobenius-Padé.

Até final deste capítulo, $N^{[p/q]}(z)$ e $D^{[p/q]}(z)$ representam as componentes i.e., respectivamente, o numerador e o denominador, do aproximante de Frobenius-Padé

$$[p/q]_f^p(z) = \frac{N^{[p/q]}(z)}{D^{[p/q]}(z)}$$

que é suposto existir e satisfazer as condições de normalidade para os graus e ordem de aproximação, i.e.

$$\begin{cases} N^{[p/q]}(z) = \sum_{i=0}^p a_i^{[p/q]} P_i(z), & a_p^{[p/q]} \neq 0 \\ D^{[p/q]}(z) = \sum_{i=0}^q b_i^{[p/q]} P_i(z), & b_q^{[p/q]} \neq 0 \\ N^{[p/q]}(z) - D^{[p/q]}(z)f(z) = \sum_{i \geq p+q+1} e_i^{[p/q]} P_i(z), & e_{p+q+1}^{[p/q]} \neq 0 \end{cases}, \quad (4.1)$$

segundo a definição apresentada no capítulo 2.

É fácil verificar que as relações de Frobenius, geralmente representadas pelos símbolos

$$\begin{array}{cc} * & * \\ * & * \end{array}$$

relacionando as componentes de elementos adjacentes da tabela de Padé, não possuem correspondência directa para elementos da tabela de Frobenius-Padé. O exemplo seguinte ilustra as dificuldades que podem surgir quando tratamos dos aproximantes de Frobenius-Padé, i.e. envolvendo desenvolvimentos em polinómios ortogonais. Suponhamos que se pretende calcular constantes λ e ρ , tais que:

$$\begin{cases} N^{[p/q]}(z) = \lambda N^{[p-1/q+1]}(z) + \rho z N^{[p-1/q]}(z) \\ D^{[p/q]}(z) = \lambda D^{[p-1/q+1]}(z) + \rho z D^{[p-1/q]}(z) \end{cases}, \quad (4.2)$$

em analogia com uma relação deste tipo para os aproximantes de Padé [7]. A dificuldade surge do facto de $z(D^{[p-1/q]}(z)f(z) - N^{[p-1/q]}(z)) = O(P_{p+q-1})$ para os aproximantes FP, enquanto que $z(D^{[p-1/q]}(z)f(z) - N^{[p-1/q]}(z)) = O(z^{p+q+1})$ para os aproximantes de Padé. Neste capítulo procuram-se relações entre elementos da tabela de Frobenius-Padé, afim de obter relações de recorrência envolvendo os coeficientes dos respectivos numeradores e denominadores.

Para estabelecer as relações de tipo Frobenius generalizadas, é necessário recorrer repetidas vezes às fórmulas que estabelecem a relação entre os coeficientes de Fourier de uma dada função, e os coeficientes de Fourier do produto da função pelo monómio z . Tais fórmulas encontram-se estabelecidas na seguinte proposição:

Proposição 4.1 *Se $\{P_i\}_{i \geq 0}$ é a família de polinómios ortogonais que satisfaz a relação de recorrência*

$$\begin{cases} zP_i(z) = \alpha_i P_{i+1}(z) + \beta_i P_i(z) + \gamma_i P_{i-1}(z), & i \geq 1 \\ P_0(z) = 1, P_1(z) = (z - \beta_0)/\alpha_0, & \alpha_i, \gamma_i \neq 0, i \geq 0 \end{cases}, \quad (4.3)$$

e

1. $f(z)$ é a série

$$f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i P_i(z),$$

2. $p(z)$ é o polinómio

$$p(z) = \sum_{i=0}^n p_i P_i(z),$$

3. $e(z)$ é a função

$$e(z) = \sum_{i \geq n} e_i P_i(z),$$

então:

1.

$$zf(z) = \sum_{i \geq 0} g_i P_i(z), \quad \begin{cases} g_0 = \beta_0 f_0 + \gamma_1 f_1 \\ g_i = \alpha_{i-1} f_{i-1} + \beta_i f_i + \gamma_{i+1} f_{i+1}, & i \geq 1 \end{cases}, \quad (4.4)$$

2.

$$zp(z) = \sum_{i=0}^{n+1} q_i P_i(z), \quad \begin{cases} q_0 = \beta_0 p_0 + \gamma_1 p_1 \\ q_i = \alpha_{i-1} p_{i-1} + \beta_i p_i + \gamma_{i+1} p_{i+1}, & i = 1, \dots, n-1 \\ q_n = \alpha_{n-1} p_{n-1} + \beta_n p_n \\ q_{n+1} = \alpha_n p_n \end{cases} \quad (4.5)$$

e

3.

$$ze(z) = \sum_{i \geq n-1} d_i P_i(z), \quad \begin{cases} d_{n-1} = \gamma_n e_n \\ d_n = \beta_n e_n + \gamma_{n+1} e_{n+1} \\ d_i = \alpha_{i-1} e_{i-1} + \beta_i e_i + \gamma_{i+1} e_{i+1}, & i \geq n+1 \end{cases}. \quad (4.6)$$

Convencionando que $p_{n+1} = p_{n+2} = 0$ em (4.5), $e_{n-1} = e_{n-2} = 0$ em (4.6) e que $f_{-1} = p_{-1}$ nos casos 1 e 2, podemos resumir qualquer das fórmulas a $h_i = \alpha_{i-1}F_{i-1} + \beta_i F_i + \gamma_{i+1}F_{i+1}$ para os três casos e para qualquer dos índices envolvidos. Esta convenção está presente em todas as fórmulas que se seguem e que envolvam o produto de z por um polinómio ou por uma série.

Na secção seguinte procura-se de forma sistemática, encontrar relações de recorrência envolvendo os coeficientes de três elementos da tabela FP. Nas restantes secções deste capítulo, constroem-se relações de recorrência a quatro termos e estabelecem-se algoritmos de cálculo dos elementos da tabela, baseados nessas relações.

4.2 Relações de recorrência a três termos

Para encontrar as relações possíveis envolvendo três elementos da tabela de Frobenius-Padé, podemos partir do caso geral e sistematizar a busca de soluções que permitam estabelecer relações de recorrência entre os coeficientes dos elementos dos aproximantes envolvidos.

4.2.1 Caso geral das relações a três termos

Com o objectivo de generalizar as relações de Frobenius entre as componentes de elementos adjacentes da tabela de Padé, vamos procurar constantes λ , η , ρ e τ , tais que:

$$\begin{cases} N^{[p/q]} &= (\lambda + \eta z)N^{[p+i/q+j]} + (\rho + \tau z)N^{[p+k/q+l]} \\ D^{[p/q]} &= (\lambda + \eta z)D^{[p+i/q+j]} + (\rho + \tau z)D^{[p+k/q+l]} \end{cases} \quad (4.7)$$

para todos os valores de p e de q , tais que os três aproximantes envolvidos existam e para i, j, k e l inteiros fixos. Limitando a busca a relações que envolvam elementos vizinhos da tabela, no sentido de estarem confinados às linhas e colunas mais próximas, seja

$$\begin{array}{ccccc} \bullet_{[p-2/q-2]} & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet_{[p-2/q+2]} \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & *_{[p/q]} & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet_{[p+2/q-2]} & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet_{[p+2/q+2]} \end{array}$$

a região de proximidade a considerar, então terá de ser $-2 \leq i, j, k, l \leq 2$. A procura exhaustiva de soluções, atribuindo os 5 valores possíveis a cada um destes quatro índices, produz $5^4 = 625$ casos possíveis. Este número pode reduzir-se, permutando as constantes λ e ρ ou η e τ , que permitem identificar algumas possibilidades umas com as outras. Ainda assim, não parece boa estratégia estudar o problema sem sistematizar a procura de soluções tentando reduzir à partida o número de casos com viabilidade de produzir soluções.

Podemos começar por estudar a tradução de cada uma das condições (4.1) impostas às componentes dos aproximantes em (4.7), em termos dos seus coeficientes, isto é, como é que as condições impostas se traduzem em termos dos coeficientes dos numeradores, dos denominadores e do erro de

aproximação. A condição sobre os numeradores pode traduzir-se, em termos dos coeficientes, por:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^p a_n^{[p/q]} P_n = \lambda \sum_{n=0}^{p+i} a_n^{[p+i/q+j]} P_n \\ + \eta \sum_{n=0}^{p+i+1} g_n^{[p+i/q+j]} P_n + \rho \sum_{n=0}^{p+k} a_n^{[p+k/q+l]} P_n + \tau \sum_{n=0}^{p+k+1} g_n^{[p+k/q+l]} P_n, \end{aligned} \quad (4.8)$$

e para os coeficientes dos denominadores, obtemos:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^q b_n^{[p/q]} P_n = \lambda \sum_{n=0}^{q+j} b_n^{[p+i/q+j]} P_n \\ + \eta \sum_{n=0}^{q+j+1} h_n^{[p+i/q+j]} P_n + \rho \sum_{n=0}^{q+l} b_n^{[p+k/q+l]} P_n + \tau \sum_{n=0}^{q+l+1} h_n^{[p+k/q+l]} P_n, \end{aligned} \quad (4.9)$$

com $g_n^{[.]} = \alpha_{n-1} a_{n-1}^{[.]} + \beta_n a_n^{[.]} + \gamma_{n+1} a_{n+1}^{[.]}$ e $h_n^{[.]} = \alpha_{n-1} b_{n-1}^{[.]} + \beta_n b_n^{[.]} + \gamma_{n+1} b_{n+1}^{[.]}$ conforme (4.5). Multiplicando $D^{[p/q]}(z)$ por $f(z)$ e subtraindo a $N^{[p/q]}(z)$, obtemos:

$$N^{[p/q]} - D^{[p/q]} f = (\lambda + \eta z)(N^{[p+i/q+j]} - D^{[p+i/q+j]} f) + (\rho + \tau z)(N^{[p+k/q+l]} - D^{[p+k/q+l]} f)$$

e aplicando (4.6)

$$\begin{aligned} \sum_{n \geq p+q+1} e_n^{[p/q]} P_n = \lambda \sum_{n \geq p+q+i+j+1} e_n^{[p+i/q+j]} P_n + \eta \sum_{n \geq p+q+i+j} d_n^{[p+i/q+j]} P_n \\ + \rho \sum_{n \geq p+q+k+l+1} e_n^{[p+k/q+l]} P_n + \tau \sum_{n \geq p+q+k+l} d_n^{[p+k/q+l]} P_n \end{aligned} \quad (4.10)$$

com $d_n^{[.]} = \alpha_{n-1} e_{n-1}^{[.]} + \beta_n e_n^{[.]} + \gamma_{n+1} e_{n+1}^{[.]}$.

Com a condição (4.8), para satisfazer os graus dos polinómios envolvidos, obtemos

$$p_N = 1 + \max\{i, k\}$$

equações lineares em λ , η , ρ e τ . Com a condição (4.9) obtemos mais

$$q_D = 1 + \max\{j, l\}$$

equações lineares. A condição sobre a ordem de aproximação (4.10) impõem mais

$$e_f = 1 - \min\{i + j, k + l\}$$

Por último, uma vez que (4.7) define $[p/q]_f^P$ a menos de uma constante multiplicativa, podemos, no caso normal, impor que $b_q^{[p/q]} = 1$, o que introduz mais uma equação linear envolvendo λ , η , ρ e τ . As condições (4.8)-(4.10) para serem satisfeitas, obrigam a que p_N , q_D e e_f sejam não negativos.

A análise da condição (4.10) permite verificar que se $|(k+l) - (i+j)| > 1$ obtemos

$$\left\{ \begin{array}{l} e_{p+q+i+j+1}^{[p+i/q+j]} \lambda = 0 \\ e_{p+q+i+j}^{[p+i/q+j]} \lambda + d_{p+q+i+j}^{[p+i/q+j]} \eta = 0 \end{array} \right. \quad \text{ou} \quad \left\{ \begin{array}{l} e_{p+q+k+l+1}^{[p+k/q+l]} \rho = 0 \\ e_{p+q+k+l}^{[p+k/q+l]} \rho + d_{p+q+k+l}^{[p+k/q+l]} \tau = 0 \end{array} \right.$$

conforme $k + l > i + j$ ou $i + j > k + l$, respectivamente. Sendo a conclusão do mesmo tipo em ambos os casos, é suficiente considerar o primeiro, e porque da fórmula 4.6 temos que $d_{p+q+i+j}^{[p+i/q+j]} = \gamma_{p+q+i+j+1} e_{p+q+i+j+1}^{[p+i/q+j]}$, obtemos $\lambda = \eta = 0$, uma vez que $e_{p+q+i+j+1}^{[p+i/q+j]} \neq 0$ devido à condição de normalidade do aproximante $[p+i/q+j]_f^P(z)$. Neste caso, obtemos uma relação do tipo

$$\begin{cases} N^{[p/q]}(z) &= (\rho + \tau z)N^{[p+k/q+l]}(z) \\ D^{[p/q]}(z) &= (\rho + \tau z)D^{[p+k/q+l]}(z) \end{cases}, \quad (4.11)$$

logo, ou $\tau = 0$ e $k = l = 0$ e obtemos a igualdade trivial com $\rho = 1$, ou $\tau \neq 0$ e $k = l = -1$ para satisfazer os graus dos polinômios, e neste caso, obtemos para a ordem de aproximação $O(P_{p+q+1}) = (\rho + \tau z) \sum_{n \geq p+q-1} e_n^{[p-1/q-1]} P_n(z)$ o que é impossível com $\tau \neq 0$. Concluimos que o problema só pode ter uma solução não trivial se $|(k+l) - (i+j)| \leq 1$, o que reduz o problema a duas situações possíveis: ou $k+l = i+j$ ou $k+l = i+j+1$, uma vez que, permutando i com k e j com l , a situação $k+l+1 = i+j$ é idêntica à segunda. De forma análoga, podemos concluir que $|k-i| \leq 1$ e que $|l-j| \leq 1$. Na tabela seguinte, resume-se o conjunto das situações possíveis considerando os valores que podemos admitir para $k-i$ e $l-j$,

$k-i$	$l-j$		p_N	q_D	e_f
-1	-1	Impossível			
-1	0	4	i+1	j+1	2-(i+j)
-1	1	3	i+1	j+2	1-(i+j)
0	-1	2	i+1	j+1	2-(i+j)
0	0	1	i+1	j+1	1-(i+j)
0	1	5	i+1	j+2	1-(i+j)
1	-1	3	i+2	j+1	1-(i+j)
1	0	4	i+2	j+1	1-(i+j)
1	1	Impossível			

As situações $k-i = l-j = \pm 1$ são incompatíveis com a condição $|(k+l) - (i+j)| \leq 1$. O número de situações possíveis distintas pode reduzir-se, considerando que as situações com $i > k$ se podem reduzir a situações com $i < k$, sem perder generalidade. Ficamos reduzidos a cinco casos distintos: No caso 1, com $k = i$, $l = j$ obtemos a situação (4.11), impossível pelas razões apontadas; Nos restantes 4 casos, com $p_N + q_D + e_f = 4$ equações, juntamente com a normalização $b_q^{[p/q]} = 1$, resulta num sistema, geralmente sobredeterminado, de 5 equações em 4 incógnitas. A característica de tais sistemas depende dos valores particulares de i e de j .

Analisando caso a caso os sistemas obtidos, verifica-se que muitos deles incluem equações incompatíveis, não produzindo qualquer solução; outros sistemas só são possíveis no caso de os coeficientes dos aproximantes do segundo membro satisfazerem determinadas restrições, não produzindo por isso, soluções gerais que possam utilizar-se no cálculo dos aproximantes; existem ainda alguns casos que produzem uma solução trivial, isto é, por exemplo com $i = j = 1$, para qualquer valor de k e de l , a solução $\lambda = 1$, $\eta = \rho = \tau = 0$; as únicas situações que produzem relações com alguma utilidade, do ponto de vista do cálculo da tabela FP, surgem dos casos:

2. Com $k = i = 1$, $j = 0$, $l = -1$ obtemos um sistema equivalente a

$$\begin{cases} \tau = \eta = 0 \\ \lambda = 1 \\ \rho = -a_{p+1}^{[p+1/q]} / a_{p+1}^{[p+1/q-1]} \end{cases},$$

$a_{p+1}^{[p+1/q-1]} \neq 0$ por hipótese de normalidade. Esta solução corresponde à relação de recorrência

$$\begin{cases} N^{[p/q]}(z) = N^{[p+1/q]}(z) + \rho N^{[p+1/q-1]}(z) \\ D^{[p/q]}(z) = D^{[p+1/q]}(z) + \rho D^{[p+1/q-1]}(z) \end{cases};$$

3. Para o caso $i = l = -1$, $j = k = 0$, obtemos

$$\begin{cases} \tau = \eta = 0 \\ \lambda = 1 \\ e_{p+q}^{[p-1/q]} + e_{p+q}^{[p/q-1]} \rho = 0 \end{cases}.$$

Uma vez que $e_{p+q}^{[p/q-1]} \neq 0$ por hipótese de normalidade, este caso produz a solução

$$\begin{cases} N^{[p/q]}(z) = N^{[p-1/q]}(z) + \rho N^{[p/q-1]}(z) \\ D^{[p/q]}(z) = D^{[p-1/q]}(z) + \rho D^{[p/q-1]}(z) \end{cases}$$

$$\text{com } \rho = -\frac{e_{p+q}^{[p-1/q]}}{e_{p+q}^{[p/q-1]}}$$

4. Com os valores $i = -1$, $j = l = 1$, $k = 0$, obtemos $\eta = 0$, do coeficiente de P_{p+q} na equação sobre a ordem de aproximação. Com este coeficiente nulo, obtemos $\tau = 0$ das condições sobre os coeficientes dos denominadores, e com estes coeficientes nulos, as restantes equações são

$$\begin{cases} \lambda + \rho = 0 \\ b_q^{[p-1/q+1]} \lambda + b_q^{[p/q+1]} \rho = 1 \end{cases}$$

Logo

$$\begin{cases} N^{[p/q]}(z) = \lambda N^{[p-1/q+1]}(z) - \lambda N^{[p/q+1]}(z) \\ D^{[p/q]}(z) = \lambda D^{[p-1/q+1]}(z) - \lambda D^{[p/q+1]}(z) \end{cases}$$

com

$$\lambda = (b_q^{[p-1/q+1]} - b_q^{[p/q+1]})^{-1}$$

excepto nos casos em que $b_q^{[p-1/q+1]} = b_q^{[p/q+1]}$. Mais à frente no corolário 4.2 da secção seguinte, mostra-se que esta condição é impossível.

Estes três casos, encontram-se apresentados na proposição 4.2 da secção seguinte. Uma vez que os aproximantes envolvidos ocupam as mesmas posições relativas na tabela FP, as três fórmulas podem designar-se genericamente por

$$\begin{matrix} * \\ * & * \end{matrix}.$$

4.2.2 Relações *
* *

A proposição seguinte e os seus corolários representam os três casos possíveis de relações de recorrência a três termos na tabela FP, obtidos na secção anterior. Com os corolários que se seguem, como se verá, para o caso de tabelas normais, estas três relações podem reduzir-se a uma única relação.

Proposição 4.2 *Sejam $p, q \geq 1$, tais que, os aproximantes $[p - 1/q]_f^p(z)$ e $[p/q - 1]_f^p(z)$ satisfazem as condições de normalidade (4.1), então*

$$\begin{cases} N^{[p/q]}(z) = N^{[p-1/q]}(z) + \lambda N^{[p/q-1]}(z) & \bullet \\ D^{[p/q]}(z) = D^{[p-1/q]}(z) + \lambda D^{[p/q-1]}(z) & \bullet * \end{cases}$$

com

$$\lambda = -e_{p+q}^{[p-1/q]} / e_{p+q}^{[p/q-1]},$$

define o aproximante $[p/q]_f^p(z) = N^{[p/q]}(z) / D^{[p/q]}(z)$. Além disso, $[p/q]_f^p(z)$ satisfaz as condições de normalidade sse $e_{p+q+1}^{[p-1/q]} + \lambda e_{p+q+1}^{[p/q-1]} \neq 0$.

Demonstração. A hipótese de normalidade dos aproximantes $[p - 1/q]_f^p(z)$ e $[p/q - 1]_f^p(z)$ é suficiente para garantir que λ está bem definido e é não nulo, logo que $N^{[p/q]}(z)$ tem grau p e que $D^{[p/q]}(z)$ tem grau q . A condição $b_q^{[p/q]} = 1$ resulta de $b_q^{[p-1/q]} = 1$ por construção do aproximante e $b_q^{[p-1/q]} = 1$ por hipótese de normalidade. Falta demonstrar a condição sobre a ordem de aproximação, que resulta de

$$\begin{aligned} D^{[p/q]}f - N^{[p/q]} &= D^{[p-1/q]}f - N^{[p-1/q]} + \lambda(D^{[p/q-1]}f - N^{[p/q-1]}) \\ &= \sum_{i \geq p+q} e_i^{[p-1/q]} P_i + \lambda \sum_{i \geq p+q} e_i^{[p/q-1]} P_i \\ &= \sum_{i \geq p+q+1} (e_i^{[p-1/q]} + \lambda e_i^{[p/q-1]}) P_i \end{aligned}$$

o que demonstra o resultado. ■

O resultado desta proposição, apresentado como o caso 3. na secção anterior, pode referir-se por ser do tipo

$$\begin{matrix} \bullet \\ \bullet * \end{matrix}$$

por relacionar elementos da tabela com estas posições relativas, permitindo calcular o elemento * a partir dos elementos •. As fórmulas encontram-se explícitas no seguinte corolário.

Corolário 4.1 *Nas condições de normalidade da tabela de Frobenius-Padé, os coeficientes dos aproximantes e do erro satisfazem a relação*

$$\begin{cases} a_p^{[p/q]} = \lambda a_p^{[p/q-1]} \\ a_i^{[p/q]} = a_i^{[p-1/q]} + \lambda a_i^{[p/q-1]}, & i = 0, \dots, p-1 \\ b_{q-1}^{[p/q]} = b_{q-1}^{[p-1/q]} + \lambda \\ b_i^{[p/q]} = b_i^{[p-1/q]} + \lambda b_i^{[p/q-1]}, & i = 0, \dots, q-2 \\ e_i^{[p/q]} = e_i^{[p-1/q]} + \lambda e_i^{[p/q-1]}, & i \geq p+q+1 \end{cases}$$

com

$$\lambda = -e_{p+q}^{[p-1/q]} / e_{p+q}^{[p/q-1]}.$$

Deve notar-se que da fórmula para $e_i^{[p/q]}$ com $i \geq p + q + 1$, deve ler-se que qualquer algoritmo baseado nestas relações deverá proceder com $i = p + q + 1, \dots, L_{p,q}$, sendo $L_{p,q}$ determinado, quer pelos dados, quer pelas necessidades dos cálculos subsequentes. Concretizando: o valor de $L_{p,q}$ está limitado pelo conjunto de coeficientes $e_i^{[p-1/q]}$ e $e_i^{[p/q-1]}$ disponíveis, e por iteração, pelo conjunto de coeficientes da série que podem calcular-se; a determinação de $L_{p,q}$ também terá em conta o conjunto de coeficientes a calcular em cada passo, de forma a poder prosseguir por recorrência. A aplicação seguinte é ilustrativa do que ficou exposto.

A utilização repetida do corolário anterior, permite calcular os elementos de uma região triangular da tabela

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & & & & & \bullet \\
 & & & & & \bullet & * \\
 & & & & & * & * \\
 & & & & \ddots & & \vdots \\
 & & & & & & * \\
 & & \bullet & * & & * & * \\
 \bullet & * & * & \dots & * & * & *
 \end{array} \tag{4.12}$$

a partir dos elementos da hipotenusa. O cálculo dos elementos desta anti-diagonal da tabela pode fazer-se, a partir do conhecimento dos coeficientes do desenvolvimento em série da função, até à ordem $2p + 1$ para calcular a sucessão $[p - q/q]_f^p(z)$, $q = 0 \dots p$, utilizando o algoritmo apresentado em [34] para o caso particular dos aproximantes Padé-Legendre, mas cuja generalização a outros aproximantes de Padé ortogonais é imediata. Como se verifica nas fórmulas acima, o cálculo do coeficiente λ envolve apenas o primeiro dos coeficientes das séries dos erros associadas aos aproximantes $[p - 1/q]_f^p(z)$ e $[p/q - 1]_f^p(z)$ e o cálculo do primeiro coeficiente da série do erro $e_{p+q+1}^{[p/q]}$ envolve $e_{p+q+1}^{[p-1/q]}$ e $e_{p+q+1}^{[p/q-1]}$, que já são os segundos coeficientes das séries respectivas. Concluímos que para progredir na tabela utilizando estas fórmulas, para calcular os elementos de cada uma das anti-diagonais $[p + k - m/m]_f^p(z)$, $m = k, \dots, p$, $k = 0, \dots, p$ é necessário, em cada passo, utilizar as fórmulas dadas para calcular os $2(p - k)$ coeficientes $e_i^{[p+k-m/m]}$, $i = p + k + 1, \dots, 3p - k$. Tomando $k = 0$, verifica-se que o aproximante $[p/0]_f^p(z) = \sum_{i=0}^p f_i P_i(z)$ terá de ser conhecido juntamente com os primeiros $2p$ coeficientes do erro $e_i^{[p/0]} = f_i$, $i = p + 1, \dots, 3p$ logo, para calcular todo o conjunto dos aproximantes desta região triangular, é necessário conhecer os coeficientes da série até à ordem $3p$.

As mesmas fórmulas do corolário 4.1 permitem calcular os elementos na região rectangular

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \\
 & & \bullet & * & * & & * \\
 & & \bullet & * & * & & * \\
 & & \vdots & & & \ddots & \vdots \\
 & & \bullet & * & * & \dots & *
 \end{array}$$

a partir de dois lados. Para o cálculo desta primeira linha pode utilizar-se o algoritmo recursivo apresentado em [35] e reproduzido na secção 2.3, e que permite calcular uma sucessão de aproximantes

na mesma linha, utilizando uma relação de recorrência entre os coeficientes dos denominadores baseada na decomposição LU das matrizes Frobenius-Padé. Uma alternativa, computacionalmente mais económica, apresenta-se na secção 4.3.1 deste capítulo. O cálculo da coluna inicial é imediato se esta for a primeira coluna da tabela, constituída pela sucessão das somas parciais da série dada. Os comentários e as conclusões, apresentadas acerca do cálculo da região triangular da tabela, mantêm validade para o cálculo desta região.

Uma consequência imediata do corolário anterior, e que vai ter aplicação na demonstração de outros resultados ao longo das secções seguintes deste capítulo, consiste no seguinte:

Corolário 4.2 *Nas condições de normalidade da tabela de Frobenius-Padé, podemos definir uma quantidade $\Lambda \equiv \Lambda^{[p/q]}$ que satisfaz*

$$\Lambda = -e_{p+q}^{[p-1/q]} / e_{p+q}^{[p/q-1]} = a_p^{[p/q]} / a_p^{[p/q-1]} = b_{q-1}^{[p/q]} - b_{q-1}^{[p-1/q]} \neq 0, p, q \geq 1.$$

Com estas igualdades obtemos fórmulas

$$\begin{array}{ccc} & \bullet & * \\ * & \bullet & e & \bullet & \bullet \end{array}$$

que permitem calcular a região triangular da tabela (4.12) a partir de um dos catetos, desde que os aproximantes nessas posições sejam conhecidos juntamente com um número suficiente de coeficientes das respectivas séries dos erros.

Corolário 4.3 *Nas condições de normalidade da tabela de Frobenius-Padé,*

$$\left\{ \begin{array}{l} N^{[p/q-1]} = \frac{1}{\Lambda} (N^{[p/q]} - N^{[p-1/q]}) \\ D^{[p/q-1]} = \frac{1}{\Lambda} (D^{[p/q]} - D^{[p-1/q]}) \end{array} \right., \Lambda = b_{q-1}^{[p/q]} - b_{q-1}^{[p-1/q]}, p, q \geq 1 \quad \begin{array}{l} \bullet \\ * \bullet \end{array}$$

e

$$\left\{ \begin{array}{l} N^{[p-1/q]} = N^{[p/q]} - \Lambda N^{[p/q-1]} \\ D^{[p-1/q]} = D^{[p/q]} - \Lambda D^{[p/q-1]} \end{array} \right., \Lambda = a_p^{[p/q]} / a_p^{[p/q-1]}, p, q \geq 1 \quad \begin{array}{l} * \\ \bullet \bullet \end{array}$$

Estas fórmulas representam as relações 4. e 2. obtidas no contexto da secção anterior. Uma consequência imediata do corolário 4.2, é que as condições $e_{p+q+1}^{[p/q]} \neq 0$ e $a_p^{[p/q]} \neq 0$ para todos os pares (p, q) , incluídas nas condições de normalidade da tabela, implicam que $b_{q-1}^{[p/q]} \neq b_{q-1}^{[p-1/q]}$, para todos os pares (p, q) , que é a restrição de aplicabilidade em 4., e que assim se verifica constituir uma condição universal em tabelas normais.

Podemos concluir, com os resultados destes corolários, que as três únicas relações a três termos, válidas sem restrições sobre os coeficientes, obtidas na secção precedente, constituem afinal um só resultado, que pode utilizar-se para calcular qualquer um dos elementos envolvidos à custa dos outros dois. Deve notar-se que apenas a relação $\begin{array}{c} \bullet \\ * \end{array}$ constitui uma progressão na tabela, no sentido de produzir um aproximante de ordem de aproximação superior aos aproximantes dados. As outras

duas formas da relação apresentada configuram retrocessos na tabela, uma vez que fornecem um aproximante a partir de um aproximante de ordem superior, sendo por isso, em termos de cálculo dos elementos da tabela, de interesse limitado.

Qualquer uma destas três fórmulas de progressão na tabela de Frobenius-Padé, tem a sua congénere válida para o caso da tabela de Padé, como se mostra em [5, pág. 140 e 145].

A obtenção de outras relações na tabela pode fazer-se introduzindo mais um termo no segundo membro das equações, introduzindo assim as relações de recorrência a quatro termos.

4.3 Relações de recorrência a quatro termos

Com o objectivo de encontrar fórmulas, que permitam obter outras relações de recorrência nos coeficientes dos elementos da tabela de Frobenius-Padé, podemos introduzir mais parâmetros, introduzindo mais um termo nas relações do tipo (4.7). Nesta secção apresentam-se alguns resultados envolvendo relações do tipo

$$\begin{cases} N^{[p/q]} = (\lambda + \eta z)N^{[p+i/q+j]} + (\rho + \tau z)N^{[p+k/q+l]} + (\theta + \omega z)N^{[p+m/q+n]} \\ D^{[p/q]} = (\lambda + \eta z)D^{[p+i/q+j]} + (\rho + \tau z)D^{[p+k/q+l]} + (\theta + \omega z)D^{[p+m/q+n]} \end{cases} \quad (4.13)$$

para todos os valores de p e de q tais que os aproximantes envolvidos existam e para i, j, k, l, m e n inteiros fixos.

As fórmulas seguintes podem considerar-se como uma generalização das fórmulas de cálculo recursivo dos aproximantes de Padé. De facto, se em cada uma das proposições seguintes, substituímos os AFP pelos aproximantes de Padé, substituindo os polinómios ortogonais P_i pelas potências z^i , obtemos em cada caso, uma das fórmulas de cálculo recursivo dos aproximantes de Padé apresentadas em [5] e [7].

Em todos os resultados seguintes é suposto que os aproximantes envolvidos existem e que a tabela de Frobenius-Padé é normal. Logo, para cada par (p, q) são satisfeitas as condições (4.1).

Os valores α_i, β_i e γ_i , nas fórmulas seguintes, constituem os coeficientes da relação de recorrência dos polinómios ortogonais (4.3), introduzidos por via das fórmulas da proposição 4.1.

Uma vez que as fórmulas apresentadas envolvem, com as mesmas expressões, numeradores e denominadores de aproximantes adjacentes as duas fórmulas (4.13) substituem-se por uma única

$$S^{[p/q]}(z) = (\lambda + \eta z)S^{[p+i/q+j]}(z) + (\rho + \tau z)S^{[p+k/q+l]}(z) + (\theta + \omega z)S^{[p+m/q+n]}(z)$$

com $S^{[p/q]}(z)$ a significar simultâneamente $N^{[p/q]}(z)$ e $D^{[p/q]}(z)$.

Começando com valores de j, l, n negativos, obtemos relações de progressão da esquerda para a direita na tabela Frobenius-Padé.

4.3.1 Progressão da esquerda para a direita na tabela

O resultado seguinte é do tipo (4.13), com q substituído por $q + 1$ para simplificar as notações.

Proposição 4.3 *Sejam $p \geq 1$ e $q \geq 0$, tais que, os aproximantes $[p-1/q]_f^p$, $[p/q]_f^p$ e $[p+1/q]_f^p$ satisfazem as condições de normalidade (4.1), então*

$$S^{[p/q+1]} = \lambda S^{[p-1/q]} + (\eta + \tau z) S^{[p/q]} + \rho S^{[p+1/q]} \quad \begin{array}{l} \bullet \\ \bullet * \\ \bullet \end{array}$$

com

$$\begin{cases} \tau = 1/\alpha_q \\ \rho = -\alpha_p \frac{a_p^{[p/q]}}{a_{p+1}^{[p+1/q]}} \tau \\ \lambda = -\gamma_{p+q+1} \frac{e_{p+q+1}^{[p/q]}}{e_{p+q+1}^{[p-1/q]}} \tau \\ \eta = -\frac{1}{e_{p+q+1}^{[p/q]}} (d_{p+q+1}^{[p/q]} \tau + e_{p+q+1}^{[p-1/q]} \lambda) \end{cases}$$

define o aproximante $[p/q]_f^p$.

Demonstração. Das propriedades dos polinômios ortogonais, temos que $\alpha_q \neq 0$ logo τ está bem definido. Atendendo às condições de normalidade, temos que $a_{p+1}^{[p+1/q]} \neq 0$, $e_{p+q}^{[p-1/q]} \neq 0$ e $e_{p+q+1}^{[p/q]} \neq 0$, o que permite concluir que ρ , λ e η também estão bem definidos. Substituindo na fórmula acima S por D , verifica-se que $b_{q+1}^{[p/q+1]} = \tau h_{q+1}^{[p/q]}$, e utilizando (4.5) temos $h_{q+1}^{[p/q]} = \alpha_q b_q^{[p/q]}$, logo $b_{q+1}^{[p/q+1]} = b_q^{[p/q]} = 1$, por hipótese de normalidade. Analogamente, substituindo S por N , obtemos

$$g_{p+1}^{[p/q]} \tau + a_{p+1}^{[p+1/q]} \rho = \alpha_p a_p^{[p/q]} \tau + a_{p+1}^{[p+1/q]} \rho = 0,$$

logo $N^{[p/q+1]}$ tem grau p . Para verificar que a condição sobre a ordem de aproximação é satisfeita, utilizando a fórmula dada, podemos escrever

$$\begin{cases} D^{[p/q+1]} f = \lambda D^{[p-1/q]} f + (\eta + \tau z) D^{[p/q]} f + \rho D^{[p+1/q]} f \\ N^{[p/q+1]} = \lambda N^{[p-1/q]} + (\eta + \tau z) N^{[p/q]} + \rho N^{[p+1/q]} \end{cases}.$$

Subtraindo membro a membro e utilizando a definição da ordem de aproximação, de cada um dos aproximantes do segundo membro, temos

$$D^{[p/q+1]} f - N^{[p/q+1]} = \lambda \sum_{i \geq p+q} e_i^{[p-1/q]} P_i + \eta \sum_{i \geq p+q+1} e_i^{[p/q]} P_i + \tau \sum_{i \geq p+q} d_i^{[p/q]} P_i + \rho \sum_{i \geq p+q+2} e_i^{[p+1/q]} P_i$$

com $d_i^{[p/q]}$ dado por (4.4). Para terminar a demonstração, falta mostrar que o segundo membro desta equação, constitui uma série de ordem $p+q+2$, para o que é suficiente mostrar que τ , λ e η satisfazem as equações

$$\begin{cases} e_{p+q}^{[p-1/q]} \lambda + d_{p+q}^{[p/q]} \tau = 0 \\ e_{p+q+1}^{[p-1/q]} \lambda + e_{p+q+1}^{[p/q]} \eta + d_{p+q+1}^{[p/q]} \tau = 0 \end{cases}$$

o que é imediato, uma vez que, de (4.4) $d_{p+q}^{[p/q]} = \gamma_{p+q+1} e_{p+q+1}^{[p/q]}$. ■

O cálculo dos coeficientes ρ , λ e η para esta relação de recorrência, bem como para todas as outras a seguir neste capítulo, leva-nos a ter de supor que, dos aproximantes que figuram no segundo membro, são conhecidos, juntamente com os coeficientes do numerador e do denominador, o número de coeficientes $e_i^{[p/q]}$ das respectivas séries do erro, suficiente para calcular todas as quantidades

envolvidas. Este problema é retomado, mais à frente, quando do desenvolvimento de algoritmos baseados nestas fórmulas. Por agora, vamos designar por $L_{p,q}$ o índice máximo do conjunto de coeficientes $e_i^{[p/q]}$ a calcular, deixando para mais tarde a determinação do seu valor.

O resultado da proposição anterior é do tipo

$$\begin{array}{c} \bullet \\ \bullet \quad * \\ \bullet \end{array}$$

permitindo progredir na tabela de Frobenius-Padé no sentido da esquerda para a direita. As fórmulas encontram-se explícitas no seguinte corolário.

Corolário 4.4 *Nas condições de normalidade da tabela de Frobenius-Padé, os coeficientes dos aproximantes e do erro satisfazem a relação*

$$\left\{ \begin{array}{l} a_p^{[p/q+1]} = \eta a_p^{[p/q]} + \tau g_p^{[p/q]} + \rho a_p^{[p+1/q]} \\ a_i^{[p/q+1]} = \lambda a_i^{[p-1/q]} + \eta a_i^{[p/q]} + \tau g_i^{[p/q]} + \rho a_i^{[p+1/q]}, \quad i = 0, \dots, p-1 \\ b_q^{[p/q+1]} = \lambda + \eta + \tau h_q^{[p/q]} + \rho \\ b_i^{[p/q+1]} = \lambda b_i^{[p-1/q]} + \eta b_i^{[p/q]} + \tau h_i^{[p/q]} + \rho b_i^{[p+1/q]}, \quad i = 0, \dots, q-1 \\ e_i^{[p/q+1]} = \lambda e_i^{[p-1/q]} + \eta e_i^{[p/q]} + \tau d_i^{[p/q]} + \rho e_i^{[p+1/q]}, \quad i = p+q+2, \dots, L_{p,q+1} \end{array} \right.$$

com

$$\left\{ \begin{array}{l} g_i^{[p/q]} = \alpha_{i-1} a_{i-1}^{[p/q]} + \beta_i a_i^{[p/q]} + \gamma_{i+1} a_{i+1}^{[p/q]}, \quad i = 0, \dots, p \\ h_i^{[p/q]} = \alpha_{i-1} b_{i-1}^{[p/q]} + \beta_i b_i^{[p/q]} + \gamma_{i+1} b_{i+1}^{[p/q]}, \quad i = 0, \dots, q \\ d_i^{[p/q]} = \alpha_{i-1} e_{i-1}^{[p/q]} + \beta_i e_i^{[p/q]} + \gamma_{i+1} e_{i+1}^{[p/q]}, \quad i = p+q+2, \dots, L_{p,q+1} \end{array} \right. .$$

A utilização repetida desta relação de recorrência, permite calcular os elementos da região da tabela

$$\begin{array}{cccc} \bullet & & & \\ \bullet & * & & \\ \bullet & * & & \\ \bullet & * & \dots & * \\ \vdots & & & * \quad * \\ \bullet & * & \dots & * \\ \bullet & * & & \\ \bullet & * & & \\ \bullet & & & \end{array}$$

a partir dos elementos da primeira coluna. A possibilidade de progressão do algoritmo nas colunas da tabela até à coluna $q+1$, depende do número de coeficientes $e_i^{[p-1/q]}$, $e_i^{[p/q]}$ e $e_i^{[p+1/q]}$, calculados na coluna q , isto é, depende dos valores $L_{p-1,q}$, $L_{p,q}$ e $L_{p+1,q}$. Este estudo será realizado posteriormente neste capítulo, juntamente com as fórmulas de progressão dadas pelas proposições seguintes.

Substituindo, no enunciado da proposição, os aproximantes de Frobenius-Padé $[p/q]_f^P(z)$ pelos aproximantes de Padé $[p/q]_f(z)$, com a conseqüente substituição de (4.3) por $z * z^i = z^{i+1}$, obtemos o

resultado da proposição com $\alpha_i = 1$, $\beta_i = \gamma_i = 0$, $i \geq 0$, logo $\lambda = \eta = 0$, $\tau = 1$, $\rho = -a_p^{[p/q]}/a_{p+1}^{[p+1/q]}$ ou

$$[p/q + 1]_f(z) = \frac{a_p^{[p/q]}N^{[p+1/q]}(z) - a_{p+1}^{[p+1/q]}zN^{[p/q]}(z)}{a_p^{[p/q]}D^{[p+1/q]}(z) - a_{p+1}^{[p+1/q]}zD^{[p/q]}(z)} \quad \bullet \quad *$$

que corresponde à relação (3.11) de [5].

Com os mesmos dados da proposição anterior, é possível calcular outros aproximantes, como se mostra nas proposições seguintes. Por serem semelhantes à da proposição anterior, os resultados apresentam-se sem demonstração.

Proposição 4.4 Para $p \geq 1$ e $q \geq 0$, tem-se

$$S^{[p-1/q+1]} = \lambda S^{[p+1/q]} + (\eta + \tau z)S^{[p/q]} + \rho S^{[p-1/q]} \quad \bullet \quad *$$

com

$$\begin{cases} \tau = 1/\alpha_q \\ \lambda = -\frac{\alpha_p}{\alpha_q} \frac{a_p^{[p/q]}}{a_{p+1}^{[p+1/q]}} \\ \eta = \frac{\alpha_p}{\alpha_q} \frac{a_p^{[p+1/q]}}{a_{p+1}^{[p+1/q]}} - \frac{\alpha_{p-1}}{\alpha_q} \frac{a_{p-1}^{[p/q]}}{a_p^{[p/q]}} - \frac{\beta_p}{\alpha_q} \\ \rho = -\frac{\gamma_{p+q+1}}{\alpha_q} \frac{e_{p+q+1}^{[p/q]}}{e_{p+q}^{[p-1/q]}} \end{cases}$$

Corolário 4.5 Nas condições de normalidade da tabela de Frobenius-Padé, os coeficientes dos aproximantes e do erro satisfazem a relação

$$\begin{cases} a_i^{[p-1/q+1]} = \lambda a_i^{[p+1/q]} + \eta a_i^{[p/q]} + \tau g_i^{[p/q]} + \rho a_i^{[p-1/q]}, & i = 0, \dots, p-1 \\ b_q^{[p-1/q+1]} = \lambda + \eta + \frac{1}{\alpha_q} (\alpha_{q-1} b_{q-1}^{[p/q]} + \beta_q) + \rho \\ b_i^{[p-1/q+1]} = \lambda b_i^{[p+1/q]} + \eta b_i^{[p/q]} + \tau h_i^{[p/q]} + \rho b_i^{[p-1/q]}, & i = 0, \dots, q-1 \\ e_{p+q+1}^{[p-1/q+1]} = \eta e_{p+q+1}^{[p/q]} + \tau d_{p+q+1}^{[p/q]} + \rho e_{p+q+1}^{[p-1/q]} \\ e_i^{[p-1/q+1]} = \lambda e_i^{[p+1/q]} + \eta e_i^{[p/q]} + \tau d_i^{[p/q]} + \rho e_i^{[p-1/q]}, & i = p+q+2, \dots, L_{p-1, q+1} \end{cases}$$

Proposição 4.5 Para $p \geq 1$ e $q \geq 0$, tem-se

$$S^{[p+1/q+1]} = \lambda S^{[p-1/q]} + (\eta + \tau z)S^{[p/q]} + \rho S^{[p+1/q]} \quad \bullet \quad *$$

com

$$\begin{cases} \tau = 1/\alpha_q \\ \lambda = -\frac{\gamma_{p+q+1}}{\alpha_q} \frac{e_{p+q+1}^{[p/q]}}{e_{p+q}^{[p-1/q]}} \\ \eta = \frac{\gamma_{p+q+1}}{\alpha_q} \frac{e_{p+q+1}^{[p-1/q]}}{e_{p+q}^{[p-1/q]}} - \frac{\gamma_{p+q+2}}{\alpha_q} \frac{e_{p+q+2}^{[p/q]}}{e_{p+q+1}^{[p/q]}} - \frac{\beta_{p+q+1}}{\alpha_q} \\ \rho = -\frac{1}{e_{p+q+2}^{[p+1/q]}} (e_{p+q+2}^{[p-1/q]} \lambda + e_{p+q+2}^{[p/q]} \eta + \frac{1}{\alpha_q} d_{p+q+2}^{[p/q]}) \end{cases}$$

Corolário 4.6 Nas condições de normalidade da tabela de Frobenius-Padé, os coeficientes dos aproximantes e do erro satisfazem a relação

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{p+1}^{[p+1/q+1]} = \frac{\alpha_p}{\alpha_q} a_p^{[p/q]} + \rho a_{p+1}^{[p+1/q]} \\ a_p^{[p+1/q+1]} = \eta a_p^{[p/q]} + \frac{1}{\alpha_q} (\alpha_{p-1} a_{p-1}^{[p/q]} + \beta_p a_p^{[p/q]}) + \rho a_p^{[p+1/q]} \\ a_i^{[p+1/q+1]} = \lambda a_i^{[p+1/q]} + \eta a_i^{[p/q]} + \frac{1}{\alpha_q} g_i^{[p/q]} + \rho a_i^{[p-1/q]}, \quad i = 0, \dots, p-1 \\ b_q^{[p+1/q+1]} = \lambda + \eta + \frac{1}{\alpha_q} (\alpha_{q-1} b_{q-1}^{[p/q]} + \beta_q) + \rho \\ b_i^{[p+1/q+1]} = \lambda b_i^{[p+1/q]} + \eta b_i^{[p/q]} + \frac{1}{\alpha_q} h_i^{[p/q]} + \rho b_i^{[p-1/q]}, \quad i = 0, \dots, q-1 \\ e_i^{[p+1/q+1]} = \lambda e_i^{[p+1/q]} + \eta e_i^{[p/q]} + \frac{1}{\alpha_q} d_i^{[p/q]} + \rho e_i^{[p-1/q]}, \quad i = p+q+3, \dots, L_{p+1, q+1} \end{array} \right.$$

Com as fórmulas resultantes das relações \bullet \bullet \bullet \bullet * \bullet \bullet * e \bullet \bullet \bullet \bullet * já é possível, no caso normal,

calcular toda a tabela de Frobenius-Padé a partir dos elementos da primeira coluna. A implementação destas fórmulas num algoritmo de cálculo dos aproximantes tem de ter em conta qual o conjunto de coeficientes $e_i^{[p/q]}$, $i = p+q+1, \dots, L_{p,q}$, necessários em cada passo para permitir calcular os

coeficientes envolvidos no passo seguinte. Por exemplo, nas fórmulas \bullet \bullet \bullet \bullet verificamos que para \bullet \bullet *

calcular os coeficientes do numerador e do denominador de $[p+1/q+1]_f^P(z)$ são necessários os valores dos coeficientes $e_{p+q}^{[p-1/q]}$, $e_{p+q+1}^{[p-1/q]}$ e $e_{p+q+2}^{[p-1/q]}$ do aproximante $[p-1/q]_f^P(z)$, os valores dos coeficientes $e_{p+q+1}^{[p/q]}$, $e_{p+q+2}^{[p/q]}$ e $e_{p+q+3}^{[p/q]}$ (este último intervém no cálculo de $d_{p+q+2}^{[p/q]}$) do aproximante $[p/q]_f^P(z)$ e apenas o valor do coeficiente $e_{p+q+2}^{[p+1/q]}$ do aproximante $[p+1/q]_f^P(z)$. Estendendo a análise

às fórmulas \bullet \bullet * \bullet \bullet * e \bullet \bullet verifica-se que estes sete coeficientes são suficientes para calcular os \bullet \bullet

coeficientes dos numeradores e dos denominadores de $[p/q+1]_f^P(z)$ e de $[p-1/q+1]_f^P(z)$. Isto é, verifica-se que para o cálculo dos coeficientes dos numeradores e dos denominadores é necessário conhecer os três primeiros coeficientes da série do erro dos aproximantes $[p-1/q]_f^P(z)$ e $[p/q]_f^P(z)$ e apenas o primeiro do aproximante $[p+1/q]_f^P(z)$. Por outro lado, se se pretender que o cálculo dos aproximantes $[p-1/q]_f^P(z)$, $[p/q]_f^P(z)$ e $[p+1/q]_f^P(z)$ recorra das mesmas fórmulas, verifica-se que para calcular cada um dos valores $e_i^{[p-1/q]}$, $e_i^{[p/q]}$ e $e_i^{[p+1/q]}$ é necessário conhecer $e_i^{[p-1/q-1]}$, $e_{i-1}^{[p/q-1]}$, $e_i^{[p/q-1]}$, $e_{i+1}^{[p/q-1]}$ e $e_i^{[p+1/q-1]}$. Considerando que se pretende calcular os coeficientes dos aproximantes das linhas $p-1$, p e $p+1$ até à coluna $q+1$, na tabela seguinte indica-se o índice máximo $L_{m,n}$ do conjunto de coeficientes $e_i^{[m/n]}$ de cada aproximante, necessário ao prosseguimento dos cálculos:

m	$L_{m,0}$	\dots	$L_{m,q-2}$	$L_{m,q-1}$	$L_{m,q}$
$p-1$	$p+2q+2$		$p+q+4$	$p+q+3$	$p+q+2$
p	$p+2q+3$		$p+q+5$	$p+q+4$	$p+q+3$
$p+1$	$p+2q+2$		$p+q+4$	$p+q+3$	$p+q+2$

Pode concluir-se que para o arranque do algoritmo a partir da primeira coluna, constituída pela sucessão das somas parciais, é necessário conhecer os coeficientes $e_i^{[p/0]} = f_i$ até à ordem $p+2q+3$, valor este coincidente com o número de coeficientes da série necessário para calcular o aproximante $[p+1/q+1]_f^P(z)$ com outros algoritmos, ver [34] e [35].

Procuraremos fórmulas que permitam percorrer outros caminhos na tabela FP.

Proposição 4.6 *Sejam $p \geq 0$ e $q \geq 1$, tais que, $[p+1/q-1]_f^P$, $[p/q-1]_f^P$ e $[p/q]_f^P$ satisfazem as condições de normalidade, então*

$$S^{[p/q+1]} = \lambda S^{[p+1/q-1]} + \eta S^{[p/q-1]} + (\rho + \tau z) S^{[p/q]} \quad \begin{array}{l} \bullet \bullet * \\ \bullet \end{array}$$

com

$$\begin{cases} \tau = 1/\alpha_q \\ \lambda = -\alpha_p \frac{a_p^{[p/q]}}{a_{p+1}^{[p+1/q-1]}} \tau \\ \eta = -\gamma_{p+q+1} \frac{e^{[p/q]}}{e^{[p/q-1]}} \tau \\ \rho = -\frac{1}{e_{p+q+1}^{[p/q]}} (e_{p+q+1}^{[p+1/q-1]} \lambda + e_{p+q+1}^{[p/q-1]} \eta + a_{p+q+1}^{[p/q]} \tau) \end{cases}$$

define o aproximante $[p/q+1]_f^P(z)$.

Demonstração. A verificação de que a normalização dos aproximantes $[p+1/q-1]_f^P$, $[p/q-1]_f^P$ e $[p/q]_f^P$ é suficiente para garantir que τ , λ , η e ρ estão bem definidas é imediata. As condições sobre os graus do numerador e do denominador de $[p/q+1]_f^P$ e sobre a ordem de aproximação, traduzem-se por

$$\begin{cases} a_{p+1}^{[p+1/q-1]} \lambda + g_{p+1}^{[p/q]} \tau = 0 \\ h_{q+1}^{[p/q]} \tau = 1 \\ e_{p+q}^{[p/q-1]} \eta + d_{p+q}^{[p/q]} \tau = 0 \\ e_{p+q+1}^{[p+1/q-1]} \lambda + e_{p+q+1}^{[p/q-1]} \eta + e_{p+q+1}^{[p/q]} \rho + d_{p+q+1}^{[p/q]} \tau = 0 \end{cases}$$

A verificação de que os valores dados constituem a solução do sistema, é imediata utilizando as fórmulas (4.5) e (4.6) ■

Corolário 4.7 *Nas condições de normalidade da tabela de Frobenius-Padé,*

$$\begin{cases} a_i^{[p/q+1]} = \lambda a_i^{[p+1/q-1]} + \eta a_i^{[p/q-1]} + \rho a_i^{[p/q]} + \tau g_i^{[p/q]}, & i = 0, \dots, p \\ b_q^{[p/q+1]} = \rho + \tau h_q^{[p/q]} \\ b_{q-1}^{[p/q+1]} = \lambda + \eta + \rho b_{q-1}^{[p/q]} + \tau h_{q-1}^{[p/q]} \\ b_i^{[p/q+1]} = \lambda b_i^{[p+1/q-1]} + \eta b_i^{[p/q-1]} + \rho b_i^{[p/q]} + \tau h_i^{[p/q]}, & i = 0, \dots, q-2 \\ e_i^{[p/q+1]} = \lambda e_i^{[p+1/q-1]} + \eta e_i^{[p/q-1]} + \rho e_i^{[p/q]} + \tau d_i^{[p/q]}, & i = p+q+2, \dots, L_{p,q+1} \end{cases}$$

com $g_i^{[p/q]}$, $h_i^{[p/q]}$ e $d_i^{[p/q]}$ dados pelas mesmas expressões do corolário 4.4.

Proposição 4.7 *Sejam $p \geq 0$ e $q \geq 1$ tais que $[p/q-1]_f^P$, $[p/q]_f^P$ e $[p+1/q]_f^P$ satisfazem as condições de normalidade, então*

$$S^{[p/q+1]} = \lambda S^{[p/q-1]} + (\rho + \tau z) S^{[p/q]} + \eta S^{[p+1/q]} \quad \begin{array}{l} \bullet \bullet * \\ \bullet \end{array}$$

com

$$\begin{cases} \tau = 1/\alpha_q \\ \eta = -\frac{\alpha_p}{\alpha_q} \frac{a_p^{[p/q]}}{a_{p+1}^{[p+1/q]}} \\ \lambda = -\frac{\gamma_{p+q+1}}{\alpha_q} \frac{e_{p+q+1}^{[p/q]}}{e_{p+q}^{[p/q-1]}} \\ \rho = \frac{1}{\alpha_q} \left(\frac{e_{p+q+1}^{[p/q-1]}}{e_{p+q}^{[p/q-1]}} \gamma_{p+q+1} - \frac{d_{p+q+1}^{[p/q]}}{e_{p+q+1}^{[p/q]}} \right) \end{cases}$$

define o aproximante $[p/q+1]_f^p(z)$.

Demonstração. O resultado fica demonstrado, com os mesmos argumentos da proposição anterior, depois de verificado que as condições sobre os graus do numerador e do denominador, a normalização do aproximante e a ordem de aproximação, se traduzem por

$$\begin{cases} g_{p+1}^{[p/q]} \tau + a_{p+1}^{[p+1/q]} \eta = 0 \\ h_{q+1}^{[p/q]} \tau = 1 \\ e_{p+q}^{[p/q-1]} \lambda + d_{p+q}^{[p/q]} \tau = 0 \\ e_{p+q+1}^{[p/q-1]} \lambda + e_{p+q+1}^{[p/q]} \rho + d_{p+q+1}^{[p/q]} \tau = 0 \end{cases}$$

■

Corolário 4.8 Nas condições de normalidade da tabela de Frobenius-Padé,

$$\begin{cases} a_i^{[p/q+1]} = \lambda a_i^{[p/q-1]} + \rho a_i^{[p/q]} + \tau g_i^{[p/q]} + \eta a_i^{[p+1/q]}, & i = 0, \dots, p \\ b_q^{[p/q+1]} = \rho + \tau h_q^{[p/q]} + \eta \\ b_i^{[p/q+1]} = \lambda b_i^{[p/q-1]} + \rho b_i^{[p/q]} + \tau h_i^{[p/q]} + \eta b_i^{[p+1/q]}, & i = 0, \dots, q-1 \\ e_i^{[p/q+1]} = \lambda e_i^{[p/q-1]} + \rho e_i^{[p/q]} + \tau d_i^{[p/q]} + \eta e_i^{[p+1/q]}, & i = p+q+2, \dots, L_{p,q+1} \end{cases}$$

A utilização combinada das fórmulas

$$\begin{array}{cccc} \bullet & \bullet & * & \bullet & \bullet & * \\ & & & e & & \\ & \bullet & & & \bullet & & * \\ & & & & & & \bullet \end{array}$$

permite obter uma fórmula de progressão em linha.

Proposição 4.8 Sejam $p \geq 0$ e $q \geq 2$ tais que $[p/q-2]_f^p$, $[p/q-1]_f^p$ e $[p/q]_f^p$ satisfazem as condições de normalidade, então o aproximante $[p/q+1]_f^p$ pode definir-se por

$$S^{[p/q+1]} = \lambda S^{[p/q-2]} + (\eta + \tau z) S^{[p/q-1]} + (\rho + \theta z) S^{[p/q]} \quad \bullet \bullet \bullet *$$

com

$$\begin{cases} \theta = 1/\alpha_q \\ \tau = -\frac{1}{\alpha_q} \Lambda \\ \lambda = \frac{\gamma_{p+q}}{\alpha_q} \frac{e_{p+q}^{[p/q-1]}}{e_{p+q-2}^{[p/q-2]}} \Lambda \\ \eta = \frac{\Lambda}{\alpha_q} \left(\frac{d_{p+q}^{[p/q-1]}}{e_{p+q}^{[p/q-1]}} - \gamma_{p+q} \frac{e_{p+q}^{[p/q-2]}}{e_{p+q-2}^{[p/q-2]}} \right) - \frac{\gamma_{p+q+1}}{\alpha_q} \frac{e_{p+q+1}^{[p/q]}}{e_{p+q-1}^{[p/q-1]}} \\ \rho = -\frac{1}{e_{p+q+1}^{[p/q]}} \left(e_{p+q+1}^{[p/q-2]} \lambda + e_{p+q+1}^{[p/q-1]} \eta + d_{p+q+1}^{[p/q-1]} \tau + d_{p+q+1}^{[p/q]} \theta \right) \end{cases}$$

onde $\Lambda = a_p^{[p/q]} / a_p^{[p/q-1]}$ representa a mesma quantidade definida no corolário 4.2.

Demonstração. Sendo $\theta \neq 0$, é imediato que o segundo membro da equação, com S substituído por D , representa um polinómio de grau $q + 1$. Como $b_q^{[p/q]} = 1$ por hipótese, então o coeficiente principal de $zD^{[p/q]}$ é α_q , o que é suficiente para mostrar que $b_{q+1}^{[p/q+1]} = 1$. Para que a equação produza um numerador de grau p é suficiente que

$$\tau g_{p+1}^{[p/q-1]} + \theta g_{p+1}^{[p/q]} = 0$$

As condições a impor para satisfazer a ordem de aproximação $p + q + 2$ para $[p/q + 1]$ são

$$\begin{cases} \lambda e_{p+q-1}^{[p/q-2]} + \tau d_{p+q-1}^{[p/q-1]} = 0 \\ \lambda e_{p+q}^{[p/q-2]} + \eta e_{p+q}^{[p/q-1]} + \tau d_{p+q}^{[p/q-1]} + \theta d_{p+q}^{[p/q]} = 0 \\ \lambda e_{p+q+1}^{[p/q-2]} + \eta e_{p+q+1}^{[p/q-1]} + \tau d_{p+q+1}^{[p/q-1]} + \rho e_{p+q+1}^{[p/q]} + \theta d_{p+q+1}^{[p/q]} = 0 \end{cases}$$

Com a utilização do resultado da proposição 4.1, é imediato verificar que os coeficientes dados constituem a solução destas quatro equações simultâneas. ■

Corolário 4.9 *Nas condições de normalidade da tabela de Frobenius-Padé,*

$$\begin{cases} a_i^{[p/q+1]} = \lambda a_i^{[p/q-2]} + \eta a_i^{[p/q-1]} - \frac{\Lambda}{\alpha_q} g_i^{[p/q-1]} + \rho a_i^{[p/q]} + \frac{1}{\alpha_q} g_i^{[p/q]}, \quad i = 0, \dots, p \\ b_q^{[p/q+1]} = -\frac{\alpha_{q-1}}{\alpha_q} \Lambda + \rho + \frac{1}{\alpha_q} (\alpha_{q-1} b_{q-1}^{[p/q]} + \beta_q) \\ b_{q-1}^{[p/q+1]} = \eta - \frac{\Lambda}{\alpha_q} h_{q-1}^{[p/q-1]} + \rho b_{q-1}^{[p/q]} + \frac{1}{\alpha_q} h_{q-1}^{[p/q]} \\ b_i^{[p/q+1]} = \lambda b_i^{[p/q-2]} + \eta b_i^{[p/q-1]} - \frac{\Lambda}{\alpha_q} h_i^{[p/q-1]} + \rho b_i^{[p/q]} + \frac{1}{\alpha_q} h_i^{[p/q]}, \quad i = 0, \dots, q-2 \\ e_i^{[p/q+1]} = \lambda e_i^{[p/q-2]} + \eta e_i^{[p/q-1]} - \frac{\Lambda}{\alpha_q} d_i^{[p/q-1]} + \rho e_i^{[p/q]} + \frac{1}{\alpha_q} d_i^{[p/q]}, \quad i = p+q+2, \dots, L_{p,q+1} \end{cases}$$

Este resultado permite estabelecer um algoritmo de cálculo dos aproximantes Frobenius-Padé, progredindo nas colunas da tabela, baseado na relação de recorrência entre elementos da mesma linha.

Algoritmo • • • *

Para construir um algoritmo baseado nas fórmulas do corolário 4.9, falta atender aos valores iniciais, isto é, determinar os valores $a_i^{[p/q]}$, $b_i^{[p/q]}$ e $e_i^{[p/q]}$ com $q = 1$ e $q = 2$, uma vez que $a_i^{[p/0]} = f_i$, $i = 0, \dots, p$ são os coeficientes do desenvolvimento em série da função, supostamente dados, $b_0^{[p/0]} = 1$ e $e_i^{[p/0]} = f_i$, $i \geq p+1$ por definição. Com vista ao cálculo das componentes de $[p/1]_f^p(z)$ através de uma fórmula do tipo

$$S^{[p/1]} = \lambda S^{[p/-2]} + (\eta + \tau z) S^{[p/-1]} + (\rho + \theta z) S^{[p/0]}$$

podemos introduzir as definições artificiais $[p/-1]_f^p(z) = \sum_{i=0}^{p+1} f_i P_i(z)$ e $[p/-2]_f^p(z) = \sum_{i=0}^{p+2} f_i P_i(z)$, para satisfazer as condições de ordem de aproximação $D^{[p/-2]}(z)f(z) - N^{[p/-2]}(z) = O(P_{p+3})$ e $D^{[p/-1]}(z)f(z) - N^{[p/-1]}(z) = O(P_{p+2})$. Para que o segundo membro da igualdade acima, defina um numerador de grau p , é necessário que

$$\begin{cases} \lambda a_{p+2}^{[p/-2]} + \tau g_{p+2}^{[p/-1]} = 0 \\ \lambda a_{p+1}^{[p/-2]} + \eta a_{p+1}^{[p/-1]} + \tau g_{p+1}^{[p/-1]} + \theta g_{p+1}^{[p/0]} = 0 \end{cases},$$

para normalizar $[p/1]_f^p(z)$ com $b_1^{[p/1]} = 1$, é necessário que

$$\tau + \theta = 1/\alpha_0$$

e a condição sobre a ordem de aproximação impõem que

$$\begin{cases} \theta = 0 \\ \tau a_{p+1}^{[p/-1]} + \rho e_{p+1}^{[p/0]} = 0 \end{cases} .$$

Após substituições, se $f_{p+1} \neq 0$ e $f_{p+2} \neq 0$, estas cinco equações lineares são equivalentes a

$$\begin{cases} \theta = 0 \\ \tau = \frac{1}{\alpha_0} \\ \lambda = -\frac{\alpha_{p+1} f_{p+1}}{\alpha_0 f_{p+2}} \\ \rho = -\frac{\gamma_{p+2} f_{p+2}}{\alpha_0 f_{p+1}} \\ \eta = \frac{\alpha_{p+1} f_{p+1}}{\alpha_0 f_{p+2}} - \frac{\alpha_p f_p}{\alpha_0 f_{p+1}} - \frac{\beta_{p+1}}{\alpha_0} \end{cases} ,$$

e com estes coeficientes calculados, podemos calcular os coeficientes dos elementos componentes de $[p/1]_f^p(z)$

$$\begin{cases} a_0^{[p/1]} = b_0^{[p/1]} f_0 + \frac{\gamma_1}{\alpha_0} f_1 \\ a_i^{[p/1]} = (\lambda + \eta + \rho) f_i + \tau(\alpha_{i-1} f_{i-1} + \beta_i f_i + \gamma_{i+1} f_{i+1}), \quad i = 1, \dots, p \\ b_0^{[p/1]} = -\frac{1}{\alpha_0 f_{p+1}} (\alpha_p f_p + (\beta_{p+1} - \beta_0) f_{p+1} + \gamma_{p+2} f_{p+2}) \\ e_{p+2}^{[p/1]} = (\eta + \rho) f_{p+2} + \tau(\beta_{p+2} f_{p+2} + \gamma_{p+3} f_{p+3}) \\ e_i^{[p/1]} = (\lambda + \eta + \rho) f_i + \tau(\alpha_{i-1} f_{i-1} + \beta_i f_i + \gamma_{i+1} f_{i+1}), \quad i = p+3, \dots, L_{p,1} \end{cases} .$$

Para calcular $[p/2]_f^p(z)$ podemos proceder analogamente com uma fórmula do tipo

$$S^{[p/2]} = \lambda S^{[p/-1]} + (\eta + \tau z) S^{[p/0]} + (\rho + \theta z) S^{[p/1]}$$

e impor as mesmas condições do caso anterior. Resolvendo as equações obtidas, encontramos

$$\begin{cases} \tau = 0 \\ \theta = \frac{1}{\alpha_1} \\ \lambda = -\frac{\alpha_p a_p^{[p/1]}}{\alpha_1 f_{p+1}^{[p/1]}} \\ \eta = -\frac{\gamma_{p+2} e_{p+2}^{[p/1]}}{\alpha_1 f_{p+1}^{[p/1]}} \\ \rho = -\frac{1}{\alpha_1 e_{p+2}^{[p/1]}} \left(\frac{f_{p+2}}{f_{p+1}^{[p/1]}} (\alpha_p a_p^{[p/1]} + \gamma_{p+2} e_{p+2}^{[p/1]}) + \beta_{p+2} e_{p+2}^{[p/1]} + \gamma_{p+3} e_{p+3}^{[p/1]} \right) \end{cases}$$

e para os coeficientes dos elementos componentes de $[p/2]_f^p$ obtemos

$$\begin{cases} a_0^{[p/2]} = (\lambda + \eta) f_0 + \rho a_0^{[p/1]} + \theta(\beta_0 a_0^{[p/1]} + \gamma_1 a_1^{[p/1]}) \\ a_i^{[p/2]} = (\lambda + \eta) f_i + \rho a_i^{[p/1]} + \theta(\alpha_{i-1} a_{i-1}^{[p/1]} + \beta_i a_i^{[p/1]} + \gamma_{i+1} a_{i+1}^{[p/1]}), \quad i = 1, \dots, p \\ b_0^{[p/2]} = (\lambda + \eta) + \rho b_0^{[p/1]} + \theta(\beta_0 b_0^{[p/1]} + \gamma_1) \\ b_1^{[p/2]} = \rho + \theta(\alpha_0 b_0^{[p/1]} + \beta_1) \\ e_i^{[p/2]} = (\lambda + \eta) f_i + \rho e_i^{[p/1]} + \theta(\alpha_{i-1} e_{i-1}^{[p/1]} + \beta_i e_i^{[p/1]} + \gamma_{i+1} e_{i+1}^{[p/1]}), \quad i = p+3, \dots, L_{p,2} \end{cases}$$

o que completa o conjunto de fórmulas necessárias para construir o algoritmo.

Este algoritmo não pode arrancar se $f_{p+1} = 0$ ou se $f_{p+2} = 0$, casos em que $[p+1/0]_f^p(z)$ não satisfaz as condições de normalidade, e quebra no passo $q+1$ se as condições de normalidade não se verificam para o aproximante $[p/q]_f^p(z)$, isto é, se $e_{p+q+1}^{[p/q]} = 0$ ou se $a_p^{[p/q-1]} = 0$.

Para finalizar, falta averiguar quais as quantidades auxiliares $e_i^{[p/q]}$ e $d_i^{[p/q]}$ necessárias, ou quais os valores dos índices $L_{p,q}$, para completar o cálculo dos coeficientes dos numeradores e dos denominadores dos aproximantes $[p/q]_f^p(z)$, $q = 1, \dots, J$, para um dado valor de J . Uma vez que o cálculo de cada valor $e_i^{[p/q]}$ envolve os valores dos elementos $e_{i\pm 1}^{[p/q-1]}$, $e_{i\pm 1}^{[p/q-2]}$ e $e_i^{[p/q-3]}$, e que o cálculo das componentes de $[p/q+1]_f^p(z)$ envolve valores de $e_i^{[p/q]}$ até $e_{p+q+2}^{[p/q]}$, então para o cálculo de $[p/J]_f^p(z)$ é necessário calcular $e_{p+J+1}^{[p/J-1]}$ e, por recorrência, $e_{p+2J-1}^{[p/1]}$. Logo, em cada coluna $[p/q]_f^p(z)$, necessitamos dos valores $e_i^{[p/q]}$, $i = p+q+1, \dots, L_{p,q} = p+2J-q$. Por análise das expressões anteriores, concluímos que necessitamos dos coeficientes f_i , $i = 0, \dots, L_{p,0} = p+2J$, para completar o cálculo dos aproximantes $[p/q]_f^p(z)$, $q = 1, \dots, J$, isto é o mesmo conjunto de coeficientes necessário para calcular $[p/J]_f^p(z)$ resolvendo o sistema de equações lineares associado aos coeficientes.

Os procedimentos encontram-se esquematizados no algoritmo seguinte.

ALGORITMO • • • *

Dados: $p, J, \in \mathbb{N} \{f_i\}_{i=0}^{p+2J}$

Calcula: $[p/q]_f^p(z) = \frac{N^{[p/q]}(z)}{D^{[p/q]}(z)}$, $q = 1, \dots, J$

Parâmetros: $\{\alpha_i, \beta_i, \gamma_i\}_{i=0}^{p+2J}$

Valores iniciais: $a_{q,-1} = a_{q,p+1} = b_{q,q+1} = 0$, $q = 0, \dots, J$
 $b_{q,q} = 1$, $q = 0, \dots, J$
 $e_{q,i} = 0$, $i = p+1, \dots, p+q$, $q = 0, \dots, J$
 $a_{0,i} = f_i$, $i = 0, \dots, p$
 $e_{0,i} = f_i$, $i = p+1, \dots, p+2J$

Calcular:

$\begin{aligned} \% [p/1]_f^p \\ b_{10} &= -\frac{1}{\alpha_0 f_{p+1}} (\alpha_p f_p + (\beta_{p+1} - \beta_0) f_{p+1} + \gamma_{p+2} f_{p+2}) \\ a_{10} &= b_{10} f_0 + \frac{\gamma_1}{\alpha_0} f_1 \\ a_{1i} &= (b_{10} - \frac{\beta_0}{\alpha_0}) f_i + \frac{1}{\alpha_0} (\alpha_{i-1} f_{i-1} + \beta_i f_i + \gamma_{i+1} f_{i+1}), \quad i = 1, \dots, p \\ e_{1i} &= (b_{10} + \frac{\beta_0}{\alpha_0}) f_i - \frac{1}{\alpha_0} (\alpha_{i-1} f_{i-1} + \beta_i f_i + \gamma_{i+1} f_{i+1}), \quad i = p+2, \dots, p+2J-1 \\ \text{Se } e_{1,p+2} &= 0 \text{ então pára} \end{aligned}$
--

$$\begin{array}{l}
\% [p/2]_f^P \\
d_{1,i} = \alpha_{i-1}e_{1,i-1} + \beta_i e_{1i} + \gamma_{i+1}e_{1,i+1}, \quad i = p+2, \dots, p+2J-2 \\
g_{1,i} = \alpha_{i-1}a_{1,i-1} + \beta_i a_{1i} + \gamma_{i+1}a_{1,i+1}, \quad i = 0, \dots, p \\
h_{10} = \beta_0 b_{10} + \gamma_1 \\
\lambda = -\frac{\alpha_p a_{1p}}{\alpha_1 f_{p+1}} \\
\eta = -\frac{\gamma_{p+2} e_{1,p+2}}{\alpha_1 f_{p+1}} \\
\rho = \frac{-1}{e_{1,p+2}} \left((\lambda + \eta) f_{p+2} + \frac{1}{\alpha_1} d_{1,p+2} \right) \\
a_{20} = (\lambda + \eta) f_0 + \rho a_{10} + \frac{1}{\alpha_1} (\beta_0 a_{10} + \gamma_1 a_{11}) \\
a_{2i} = (\lambda + \eta) f_i + \rho a_{1i} + \frac{1}{\alpha_1} g_{1,i}, \quad i = 1, \dots, p \\
b_{20} = (\lambda + \eta) + \rho b_{10} + \frac{1}{\alpha_1} h_{10} \\
b_{21} = \rho + \frac{1}{\alpha_1} (\alpha_0 b_{10} + \beta_1) \\
e_{2i} = (\lambda + \eta) f_i + \rho e_{1i} + \frac{1}{\alpha_1} d_{1,i}, \quad i = p+3, \dots, p+2J-2 \\
\text{Se } e_{2,p+3} = 0 \text{ então pára}
\end{array}$$

Para $q = 2, \dots, J-1$

$$\begin{array}{l}
\% [p/q+1]_f^P \\
d_{q,i} = \alpha_{i-1}e_{q,i-1} + \beta_i e_{qi} + \gamma_{i+1}e_{q,i+1}, \quad i = p+q+1, \dots, p+2J-q-1 \\
g_{q,i} = \alpha_{i-1}a_{q,i-1} + \beta_i a_{qi} + \gamma_{i+1}a_{q,i+1}, \quad i = 0, \dots, p \\
h_{q,i} = \alpha_{i-1}b_{q,i-1} + \beta_i b_{qi} + \gamma_{i+1}b_{q,i+1}, \quad i = 0, \dots, q-1 \\
\Lambda = \frac{a_{q,p}}{a_{q-1,p}} \\
\lambda = \frac{\gamma_{p+q} e_{q-1,p+q}}{\alpha_q e_{q-2,p+q-1}} \Lambda \\
\eta = \frac{\Lambda}{\alpha_q} \left(\frac{d_{q-1,p+q}}{e_{q-1,p+q}} - \gamma_{p+q} \frac{e_{q-2,p+q}}{e_{q-2,p+q-1}} \right) - \frac{\gamma_{p+q+1} e_{q,p+q+1}}{\alpha_q e_{q-1,p+q}} \\
\rho = \frac{-1}{e_{q,p+q+1}} \left(e_{q-2,p+q+1} \lambda + e_{q-1,p+q+1} \eta + \frac{1}{\alpha_q} (d_{q,p+q+1} - \Lambda d_{q-1,p+q+1}) \right) \\
a_{q+1,i} = \lambda a_{q-2,i} + \eta a_{q-1,i} + \rho a_{q,i} + \frac{1}{\alpha_q} (g_{q,i} - \Lambda g_{q-1,i}), \quad i = 0, \dots, p \\
b_{q+1,q} = \rho + \frac{1}{\alpha_q} (\alpha_{q-1} (b_{q,q-1} - \Lambda) + \beta_q) \\
b_{q+1,q-1} = \eta + \rho b_{q,q-1} + \frac{1}{\alpha_q} (h_{q,q-1} - \Lambda (\alpha_{q-2} b_{q-1,q-2} + \beta_{q-1})) \\
b_{q+1,i} = \lambda b_{q-2,i} + \eta b_{q-1,i} + \rho b_{q,i} + \frac{1}{\alpha_q} (h_{q,i} - \Lambda h_{q-1,i}), \quad i = 0, \dots, q-2 \\
e_{q+1,i} = \lambda e_{q-2,i} + \eta e_{q-1,i} + \rho e_{q,i} + \frac{1}{\alpha_q} (d_{q,i} - \Lambda d_{q-1,i}), \quad i = p+q+2, \dots, p+2J-q-1 \\
\text{Se } e_{q+1,p+q+2} = 0 \text{ então pára}
\end{array}$$

Resultados: $N^{[p/q]} = \sum_{i=0}^p a_{qi} P_i, \quad q = 1, \dots, J$
 $D^{[p/q]} = \sum_{i=0}^{q-1} b_{qi} P_i + P_q, \quad q = 1, \dots, J$
 $D^{[p/q]} f - N^{[p/q]} = \sum_{i=p+q+1}^{p+2J-q} e_{qi} P_i + O(P_{p+2J-q+1}), \quad q = 1, \dots, J-1$

Para além dos coeficientes das componentes dos aproximantes $[p/q]_f^P(z)$, $q = 1, \dots, J$, este algoritmo calcula os coeficientes $e_i^{[p/q]}$, $i = p+q+1, \dots, p+2J-q$, da série $D^{[p/q]}(z)f(z) - N^{[p/q]}(z) = E^{[p/q]}(z) = \sum_{i \geq p+q+1} e_i^{[p/q]} P_i(z)$. Uma vez que, por construção de AFP,

$$f(z) - [p/q]_f^P(z) = \frac{E^{[p/q]}(z)}{D^{[p/q]}(z)}$$

então, com os coeficientes calculados, podemos utilizar

$$\frac{\sum_{i=p+q+1}^{p+2J-q} e_i^{[p/q]} P_i(z)}{D^{[p/q]}(z)}$$

para aproximar o erro com que $[p/q]_f^P(z)$ aproxima $f(z)$.

Contando o número de operações aritméticas em cada passo do processo, concluímos que se podem calcular os coeficientes dos aproximantes $[p/q]_f^P(z)$, $q = 1, \dots, J$ com aproximadamente $12J^2 + 8(p+1)J$ multiplicações. Comparando com o algoritmo 2.2, baseado no cálculo da decomposição LU das matrizes Frobenius-Padé associadas aos aproximantes, apresentado em [35] e reproduzido na secção 2.3, onde o mesmo conjunto de aproximantes se calcula com $O(J^3)$ multiplicações, vemos que o algoritmo aqui apresentado, sob este ponto de vista, é significativamente favorável.

O algoritmo foi programado em Fortran, com aritmética de dupla precisão, e foi testado com duas funções.

Resultados Numéricos

Nos testes numéricos apresentados, utilizam-se funções satisfazendo dois requisitos: os coeficientes do seu desenvolvimento em série de Fourier podem calcular-se, pelo menos teoricamente, até uma ordem tão longe quanto o necessário, com a precisão de cálculo da máquina; a função é descrita por uma fórmula analítica exacta, permitindo calcular o seu valor, pelo menos teoricamente, em cada ponto do intervalo de aproximação, com a precisão de cálculo da máquina. O primeiro destes requisitos, permite calcular as sucessões de aproximantes, tão longe quanto se queira, sem restrições sobre os graus dos numeradores e dos denominadores e, sobretudo, isolar os erros inerentes aos processos de cálculo implementados com o algoritmo, dos erros nos dados ou seja, dos erros nos coeficientes da série. O segundo requisito prende-se com a necessidade de analisar o algoritmo comparando os resultados, tanto quanto possível, com os valores exactos da função.

Exemplo 4.1 *Relativamente à família de polinómios da classe de Laguerre $L_n^\alpha(z)$, referidos no exemplo 2.5, ortogonais no intervalo $z \geq 0$ para $\alpha > -1$ arbitrário, a função $f(z) = z^m$ admite o desenvolvimento em série [27]*

$$f(z) = \sum_{i \geq 0} (-1)^i \frac{\Gamma(m + \alpha + 1) \Gamma(m + 1)}{\Gamma(n + \alpha + 1) \Gamma(m - n + 1)} L_i^\alpha(z), \quad z > 0$$

Para $m > -(1 + \alpha)/2$, é sabido que a série converge para todos os valores de $x > 0$ [27]. Por outro lado, para valores $-(1 + \alpha) < m \leq -(3 + 2\alpha)/4$ esta série é divergente em todos os pontos $z > 0$ [36]. O algoritmo foi testado, com $\alpha = 0$, para duas funções: com $m = -1/4$, temos que

$$f^c(z) = \frac{1}{\sqrt[4]{z}} = \sum_{i \geq 0} (-1)^i \frac{\Gamma(\frac{3}{4})^2}{i! \Gamma(\frac{3}{4} - i)} L_i(z), \quad z > 0$$

constitui uma série convergente, e que a série, com $m = -3/4$,

$$f^d(z) = \frac{1}{\sqrt[4]{z^3}} = \sum_{i \geq 0} (-1)^i \frac{\Gamma(\frac{1}{4})^2}{i! \Gamma(\frac{1}{4} - i)} L_i(z), \quad z > 0$$

diverge em todos os pontos.

Sendo

$$zL_i = -(i+1)L_{i-1} + (2i+1)L_i - iL_{i+1}$$

a relação de recorrência dos polinómios de Laguerre, então $\alpha_i = -(i + 1)$, $\beta_i = 2i + 1$ e $\gamma_i = -i$ são os dados do algoritmo. Para o cálculo dos coeficientes das duas séries, utilizando as propriedades da função Γ podemos concluir que

$$\begin{cases} \Gamma(\frac{3}{4} - n) = -(\frac{1}{4} + n)\Gamma(-\frac{1}{4} - n) \\ \Gamma(\frac{1}{4} - n) = -(\frac{3}{4} + n)\Gamma(-\frac{3}{4} - n) \end{cases}$$

o que permite calcular os coeficientes por recorrência

$$\begin{cases} f^c(z) = \Gamma(\frac{3}{4}) \sum_{i \geq 0} f_i^c L_i(z), z > 0 \\ f_0^c = 1, f_{i+1}^c = \frac{4i+1}{4(i+1)} f_i^c, i \geq 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} f^d(z) = \Gamma(\frac{1}{4}) \sum_{i \geq 0} f_i^d L_i(z), z > 0 \\ f_0^d = 1, f_{i+1}^d = \frac{4i+3}{4(i+1)} f_i^d, i \geq 0 \end{cases}$$

Para testar a qualidade dos aproximantes obtidos com este algoritmo, foram calculadas várias linhas da tabela. Os aproximantes foram calculados em duas abcissas $z = 1$ e $z = 16$ e os valores obtidos foram comparados com os valores exactos $f^c(1) = f^d(1) = 1$ e $f^c(16) = 1/2$, $f^d(16) = 1/8$. Na tabela 4.1 representa-se, em cada posição (p, q) , o número de dígitos decimais do aproximante $[p/q]_f^L(z)$ coincidentes com os valores exactos respectivos. Por razões de facilidade de leitura, apenas são apresentados alguns dos valores de cada sucessão calculada.

		$z=1$			$z=16$			$z=1$			$z=16$																								
P	4	1	4	7	6	7	7	8	4	-2	7	9	10	11	11	11	11	4	0	4	6	6	7	7	7	7	4	-3	7	9	10	11	11	11	12
	8	1	6	7	8	7	8	8	8	-1	9	12	12	12	12	12	13	8	0	6	6	7	7	7	8	8	-3	9	11	11	11	11	12	12	
	12	3	6	7	8	8	8	11	12	-1	10	11	13	12	13	14	12	1	6	7	8	8	8	8	12	-3	10	10	12	13	13	12			
	16	1	9	8	8	8	11	9	16	-1	12	12	13	13	13	14	16	0	6	7	7	8	9	9	16	-3	9	12	13	13	12	13			
	20	1	8	8	8	10	9	9	20	0	10	13	13	13	12	14	20	0	7	7	8	9	9	9	20	-2	10	11	12	11	14	14			
	24	2	7	8	9	9	9	10	24	-1	11	12	13	13	13	13	24	0	7	8	9	9	9	10	24	-2	10	12	13	13	14	13			
		0	5	10	15	20	25	30		0	5	10	15	20	25	30		0	5	10	15	20	25	30		0	5	10	15	20	25	30			
		q						q								q								q											
		$m = -0.25$						$m = -0.75$																											

Tabela 4.1: $-\log_{10}(|f(z) - [p/q]_f^L(z)|)$ arredondado a inteiro, com $f(z) = \frac{1}{\sqrt[4]{z}}$ no caso $m = -0.25$ e $f(z) = \frac{1}{\sqrt[4]{z^3}}$ no caso $m = -0.75$

Destes resultados pode destacar-se a qualidade das aproximações nos pontos observados, e sobretudo o facto de a precisão obtida com estes aproximantes racionais não ser afectada pelo carácter divergente da série para o caso $f(z) = \frac{1}{\sqrt[4]{z^3}}$.

Os mesmos aproximantes calculados, servem para ilustrar o comportamento da aproximação FP num intervalo de valores. Nas figuras 4.1 e 4.2 representa-se, em escala logarítmica, as curvas do erro relativo de aproximantes de duas das sucessões calculadas para cada uma das duas funções utilizadas para teste, com o intervalo de aproximação $z > 0$ restringido, para efeitos de representação gráfica, ao intervalo $z \in [0, 20]$.

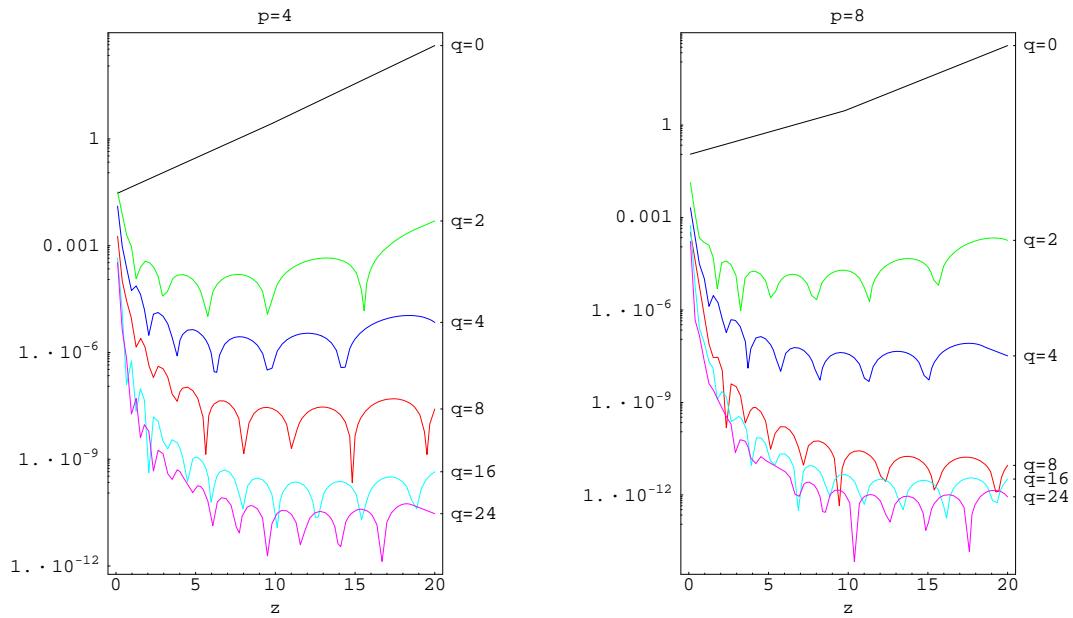


Figura 4.1: $|(f^c(z) - [p/q]_f^L(z))/f^c(z)|$ com $f^c(z) = \frac{1}{\sqrt[4]{z}}$

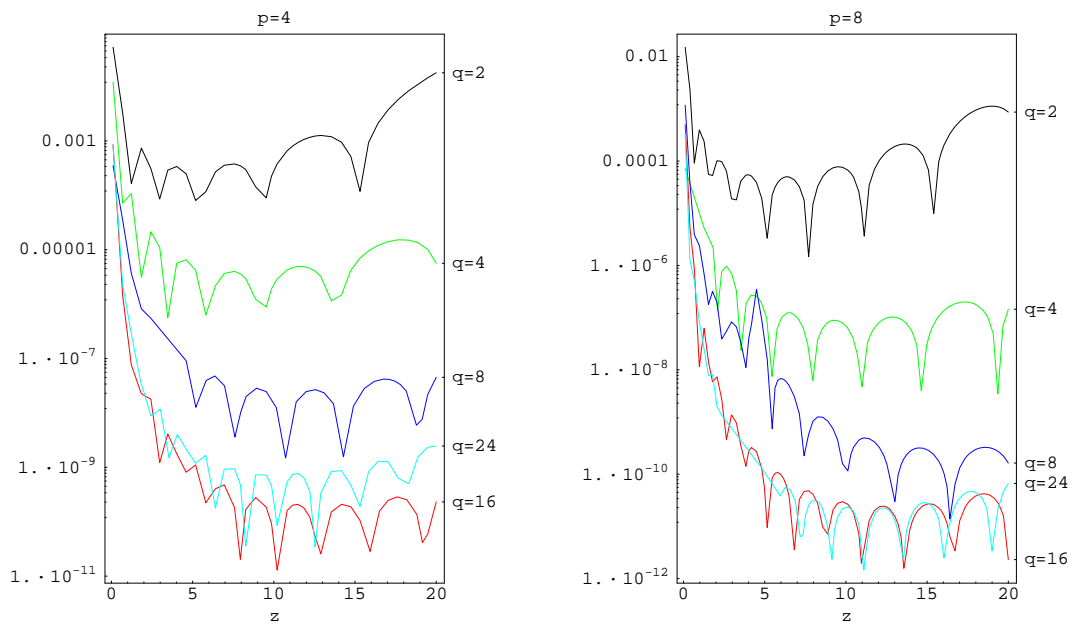


Figura 4.2: $|(f^d(z) - [p/q]_f^L(z))/f^d(z)|$ com $f^d(z) = \frac{1}{\sqrt[4]{z^3}}$

Do conjunto das curvas apresentadas, destaca-se que os erros relativos oscilam, entre valores de amplitudes que decrescem quer com o valor de q quer com o valor de p . No caso da série divergente, os resultados discordantes, obtidos nos dois gráficos com as últimas colunas apresentadas, parecem indicar uma perturbação associada a alguma instabilidade numérica para valores $q > 16$. No caso da série convergente, a instabilidade numérica não se observa, pelo menos de forma a piorar os resultados, até à coluna $q = 24$. A convergência dos resultados da AFP observada na figura 4.1 em dois pontos, quer com a série convergente $f^c(x)$ quer com a série $f^d(x)$ que diverge em todos os pontos, parece poder estender-se a todos os pontos do intervalo observado, como sugerem as figuras 4.1 e 4.2.

Exemplo 4.2 Tomando como exemplo a função, vulgarmente designada por função salto, de suporte compacto e possuindo uma singularidade num ponto interior do intervalo $[-1, 1]$:

$$f(z) = \begin{cases} 0, & -1 \leq z < a \\ 1, & a < z \leq 1 \end{cases}$$

A expansão em série de polinómios de Legendre

$$f(z) = \frac{1}{2}(1-a) - \frac{1}{2} \sum_{n \geq 1} [P_{n+1}(a) - P_{n-1}(a)] P_n(z), \quad -1 < z < 1$$

converge para $f(z)$ em todos os pontos onde a função é contínua e para $\frac{1}{2} = \frac{1}{2}[f(a+0) + f(a-0)]$ na abcissa $z = a$ [27].

Este exemplo foi tratado em [34] com o valor $a = 0.1$. Tomando o mesmo valor de a , temos que $f_0 = 0.45$ e $f_i = -\frac{1}{2}(P_{i+1}(0.1) - P_{i-1}(0.1))$ são os dados e $\alpha_i = \frac{i+1}{2i+1}$, $\beta_i = 0$ e $\gamma_i = \frac{i}{2i+1}$ são os parâmetros para o programa de cálculo dos aproximantes. Na figura 4.3 representa-se o erro absoluto no intervalo de aproximação $-1 < z < 1$, para alguns elementos da tabela FP nas linhas $p = 12$ e $p = 24$.

Destes resultados destaca-se o decréscimo do erro absoluto em cada ponto, com o valor de q em cada uma das sucessões apresentadas. Nos testes numéricos efectuados, a variação do erro com o valor de p não é tão evidente. Para valores de $q > 12$ observa-se que o ganho de precisão deixa de ser aparente, ou até desaparece, provavelmente devido a acumulação de erros de arredondamento. Este facto parece indicar que este algoritmo recursivo é mais robusto do que o utilizado em [34], onde a instabilidade numérica é referida nas colunas $q > 6$.

Na figura 4.4 apresenta-se destacado, o comportamento da aproximação racional perto da singularidade da função, e compara-se com o comportamento da aproximação das somas parciais. O caso apresentado corresponde ao aproximante $[24/12]_f^L(z)$, e é comparado com a soma da série considerando 48 coeficientes, i.e. o mesmo número de coeficientes necessário para o cálculo do aproximante racional. No gráfico da esquerda é notório o carácter oscilatório, ampliado na vizinhança da singularidade, na aproximação das somas parciais. Este fenómeno, que é geral nas séries de Fourier de funções com pontos de descontinuidade, é vulgarmente designado por *fenómeno de Gibbs*. Neste gráfico, sendo o erro muito pequeno na escala utilizada, em quase todos os pontos, a função e o aproximante FP são quase indistinguíveis. A ampliação feita no gráfico da direita, permite distinguir as funções e podemos concluir que a perturbação, introduzida pela singularidade, na aproximação da função, é significativamente amortecida pela aproximação FP relativamente à aproximação das somas parciais, sendo o fenómeno de Gibbs quase imperceptível nesta escala.

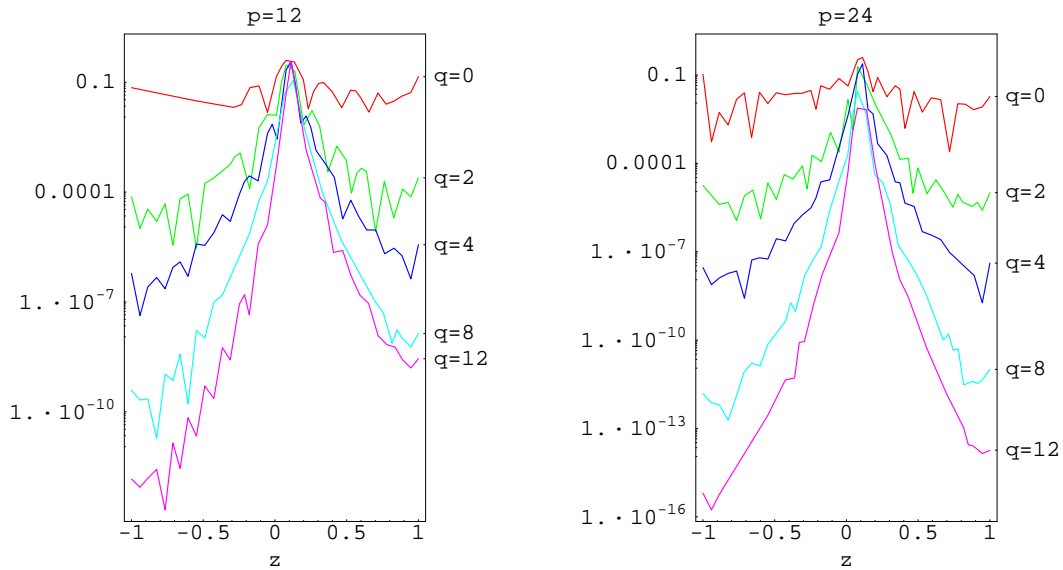


Figura 4.3: $|f(z) - [p/q]_f^p(z)|$, $f(z)$ é a função salto com $a = 0.1$

Os coeficientes $e_i^{[p/q]}$ avaliados no algoritmo, como quantidades auxiliares de cálculo, podem utilizar-se para construir uma estimativa do erro na aproximação FP. Na figura 4.5 comparam-se os erros na aproximação da função

$$f(z) - [p/q]_f^p(z)$$

com a estimativa do erro calculada pelo algoritmo,

$$\frac{\sum_{i=p+q+1}^{p+2q} e_i^{[p/q]} P_i(z)}{D[p/q](z)}.$$

Podemos observar na figura 4.5 que, no intervalo $[-0.7, 0.7]$, as curvas do erro absoluto calculado $|f(z) - [p/q]_f^p(z)|$ seguem de perto as curvas do erro absoluto estimado. Para valores próximos dos extremos do intervalo de aproximação, os valores da estimativa divergem dos valores do erro.

Conclusões Os resultados dos testes apresentados sugerem que o algoritmo é suficientemente robusto para calcular as aproximações racionais com grande precisão. As sucessões de aproximantes calculadas, produzem valores convergentes para os valores exactos. A acumulação de erros perturba esta convergência, impedindo o incremento da aproximação nas colunas $q > 16$ nos exemplos com polinómios de Laguerre e $q > 12$ no exemplo de Legendre.

Para além do incremento da precisão na generalidade dos pontos, relativamente à aproximação das somas parciais, destaca-se dos resultados a vantagem da aproximação FP na vizinhança da singularidade da série de Legendre. O designado fenómeno de Gibbs, traduzido pelo aumento da amplitude das oscilações do erro, perto da descontinuidade da função [9], visível neste exemplo, é significativamente amortecido pela aproximação racional.

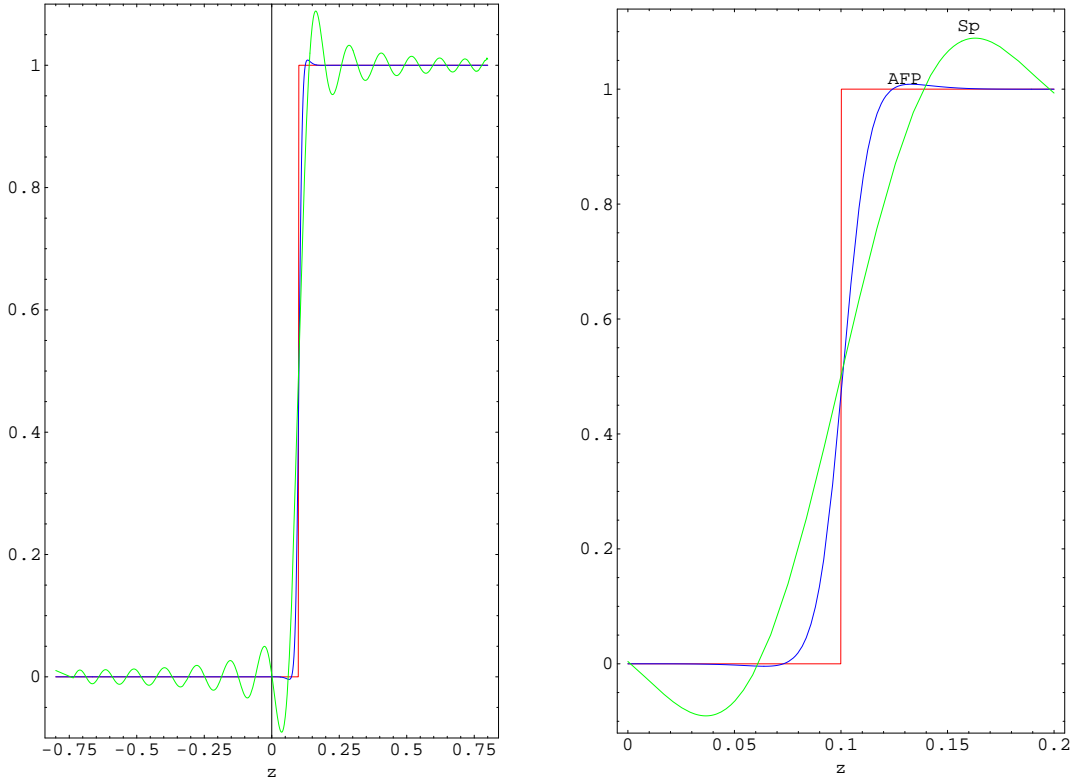


Figura 4.4: Função salto, aproximante $[24/12]_f^P(z)$ e aproximação das somas parciais $S_{48}(z)$

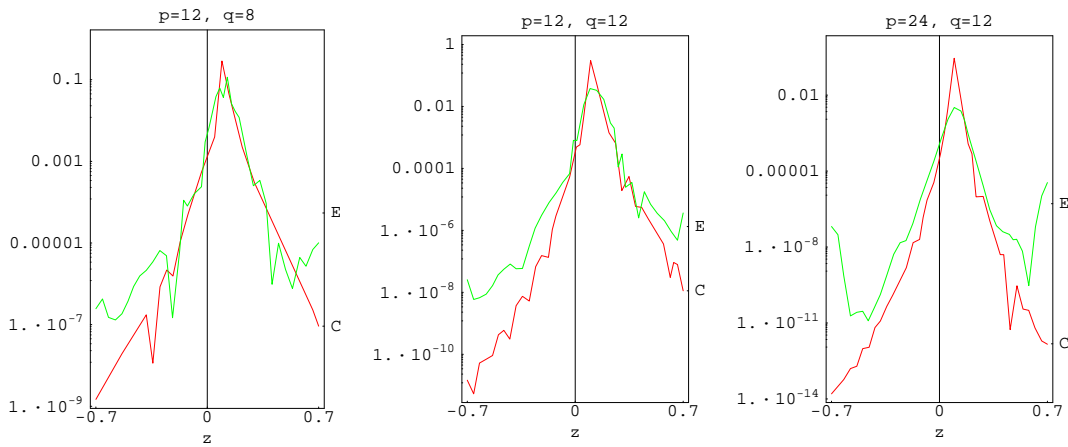


Figura 4.5: Erro absoluto calculado $|f(z) - [p/q]_f^P(z)|$ (C) e erro absoluto estimado $\frac{\sum_{i=p+q+1}^{p+2j-q} e_i^{[p/q]} P_i(z)}{D^{[p/q]}(z)}$ (E)

Os testes revelam ainda a capacidade destes aproximantes de reproduzir, com grande precisão, os valores de uma função a partir dos coeficientes de Fourier de uma série divergente.

No resto deste capítulo mostra-se que é possível calcular por recorrência, outras sucessões de aproximantes de Frobenius-Padé.

4.3.2 Relações de descida na Tabela Frobenius-Padé

Na secção precedente, apresentam-se relações entre elementos adjacentes da tabela Frobenius-Padé, que permitem progredir no sentido da esquerda para a direita. Os resultados seguintes apresentam relações no sentido descendente da tabela. Uma diferença importante entre os resultados da secção precedente e os resultados seguintes reside no facto de que os resultados anteriores permitem calcular os coeficientes de um aproximante à custa dos coeficientes de três aproximantes adjacentes sempre, como vimos, que estes satisfazem as condições de normalidade. Nas proposições seguintes apresentam-se relações entre os elementos de aproximantes adjacentes da tabela de Frobenius-Padé onde, para além das condições de normalidade, a possibilidade de progressão na tabela está dependente dos valores dos coeficientes dos aproximantes envolvidos.

Em todas as proposições que se seguem, é suposto que dos aproximantes que figuram no segundo membro das equações, estão calculados os coeficientes do numerador e do denominador, e dos coeficientes das respectivas séries do erro supomos que estão calculados pelo menos aqueles que intervêm nas fórmulas dadas. Para o estabelecimento de algoritmos baseados nas fórmulas de recorrência estabelecidas nestas proposições, é necessário estudar, à semelhança do exposto no algoritmo da secção precedente, qual o conjunto mínimo das quantidades $e_i^{[p/q]}$ a calcular em cada passo. Este estudo, bem como o estabelecimento do conjunto mínimo dos coeficientes da série que são necessários para cada algoritmo, será feito *a posteriori*, no final do capítulo, para o algoritmo aí estabelecido.

Proposição 4.9 *Sejam $p, q \geq 1$ tais que os aproximantes $[p-1/q-1]_f^p$, $[p-1/q]_f^p$ e $[p/q]_f^p$ existem, satisfazem as condições de normalidade e cujos coeficientes estão calculados, juntamente com os primeiros coeficientes das respectivas séries do erro. Definindo*

$$\begin{cases} N^{[p+1/q]} = \lambda N^{[p-1/q-1]} + (\eta + \tau z) N^{[p-1/q]} + (\rho - \tau z) N^{[p/q]} & \bullet \\ D^{[p+1/q]} = \lambda D^{[p-1/q-1]} + (\eta + \tau z) D^{[p-1/q]} + (\rho - \tau z) D^{[p/q]} & \bullet \\ & * \end{cases}$$

com

$$\begin{cases} \tau = \frac{e^{[p-1/q-1]}}{e^{[p-1/q]} - e^{[p/q]}} \\ \lambda = -\gamma_{p+q} \\ \eta = -\frac{1}{e^{[p-1/q]}} (e^{[p-1/q-1]} \lambda + (d_{p+q}^{[p-1/q]} - d_{p+q}^{[p/q]}) \tau) \\ \rho = -\frac{1}{e^{[p/q]}} (e^{[p-1/q-1]} \lambda + e^{[p-1/q]} \eta + (d_{p+q+1}^{[p-1/q]} - d_{p+q+1}^{[p/q]}) \tau) \end{cases}$$

e

$$\Delta = \eta + \rho - \alpha_{q-1} \Lambda \tau$$

com $\Lambda = b_{q-1}^{[p/q]} - b_{q-1}^{[p-1/q]}$ como no corolário 4.2. Se $\Delta \neq 0$ então

$$\frac{N^{[p+1/q]}(z)}{D^{[p+1/q]}(z)} = [p+1/q]_f^p(z)$$

é o AFP tal que $b_q^{[p+1/q]} = \Delta$. Caso contrário, a tabela Frobenius-Padé é não normal, sendo

$$\frac{N^{[p+1/q]}(z)}{D^{[p+1/q]}(z)} = O(P_{p+q+2})$$

com $\partial(N^{[p+1/q]}) = p+1$ e $\partial(D^{[p+1/q]}) \leq q-1$.

Demonstração. Sendo normais os aproximantes $[p-1/q-1]_f^P(z)$ e $[p-1/q]_f^P(z)$, então τ está bem definido e é não nulo. Da fórmula apresentada para $N^{[p+1/q]}$ resulta que $a_{p+1}^{[p+1/q]} = -\alpha_p a_p^{[p/q]} \tau$, logo $\partial(N^{[p+1/q]}) = p+1$. As condições sobre a ordem de aproximação produzem

$$\begin{aligned} D^{[p+1/q]}f - N^{[p+1/q]} &= \lambda \sum_{i \geq p+q-1} e_i^{[p-1/q-1]} P_i + \eta \sum_{i \geq p+q} e_i^{[p-1/q]} P_i + \tau \sum_{i \geq p+q-1} d_i^{[p-1/q]} P_i \\ &+ \rho \sum_{i \geq p+q+1} e_i^{[p/q]} P_i - \tau \sum_{i \geq p+q} d_i^{[p/q]} P_i \\ &= (\lambda e_{p+q-1}^{[p-1/q-1]} + \tau d_{p+q-1}^{[p-1/q]}) P_{p+q-1} \\ &+ (\lambda e_{p+q}^{[p-1/q-1]} + \eta e_{p+q}^{[p-1/q]} + \tau (d_{p+q}^{[p-1/q]} - d_{p+q}^{[p/q]})) P_{p+q} \\ &+ \sum_{i \geq p+q+1} (\lambda e_i^{[p-1/q-1]} + \eta e_i^{[p-1/q]} + \rho e_i^{[p/q]} + \tau (d_i^{[p-1/q]} - d_i^{[p/q]})) P_i \\ &= O(P_{p+q+2}) \end{aligned}$$

como se pode verificar, uma vez que $d_{p+q-1}^{[p-1/q]} = \gamma_{p+q} e_{p+q}^{[p-1/q]}$. Finalmente, da expressão para $D^{[p+1/q]}$ resulta que $\partial(D^{[p+1/q]}) \leq q$ e que

$$b_q^{[p+1/q]} = \eta + \rho + (h_q^{[p-1/q]} - h_q^{[p/q]}) \tau = \Delta$$

uma vez que $h_q^{[p-1/q]} = \alpha_{q-1} b_{q-1}^{[p-1/q]} + \beta_q$ e que $h_q^{[p/q]} = \alpha_{q-1} b_{q-1}^{[p/q]} + \beta_q$. A consequência de que a condição de normalidade depende do valor de Δ é imediata a partir da definição do aproximante, o que termina a demonstração. ■

Desta proposição resulta um corolário, cuja demonstração é imediata, permitindo calcular os coeficientes do numerador, do denominador e do erro do aproximante $[p+1/q]_f^P(z)$.

Corolário 4.10 *Nas condições da proposição anterior, os coeficientes dos aproximantes, satisfazem a relação*

$$\begin{cases} a_{p+1}^{[p+1/q]} = -\alpha_p \tau a_p^{[p/q]} \\ a_p^{[p+1/q]} = \rho a_p^{[p/q]} + \tau (g_p^{[p-1/q]} - g_p^{[p/q]}) \\ a_i^{[p+1/q]} = \lambda a_i^{[p-1/q-1]} + \eta a_i^{[p-1/q]} + \rho a_i^{[p/q]} + \tau (g_i^{[p-1/q]} - g_i^{[p/q]}), \quad i = 0, \dots, p-1 \\ b_q^{[p+1/q]} = \Delta \\ b_i^{[p+1/q]} = \lambda b_i^{[p-1/q-1]} + \eta b_i^{[p-1/q]} + \rho b_i^{[p/q]} + \tau (h_i^{[p-1/q]} - h_i^{[p/q]}), \quad i = 0, \dots, q-1 \\ e_i^{[p+1/q]} = \lambda e_i^{[p-1/q-1]} + \eta e_i^{[p-1/q]} + \rho e_i^{[p/q]} + \tau (d_i^{[p-1/q]} - d_i^{[p/q]}), \quad i = p+q+2, \dots, L_{p+1,q} \end{cases}$$

onde $L_{p+1,q}$ representa uma constante a determinar e os valores g_i , h_i e d_i são dados pelas fórmulas da proposição 4.1.

A determinação do valor $L_{p+1,q}$ depende do número de coeficientes $e_i^{[p-1/q-1]}$, $e_i^{[p-1/q]}$ e $e_i^{[p/q]}$ calculados, isto é depende de $L_{p-1,q-1}$, $L_{p-1,q}$ e de $L_{p,q}$ e condiciona uma eventual progressão na tabela, utilizando estas ou outras fórmulas dependentes dos coeficientes dos erros. Logo, o estudo deste limite, é condicionado pelo algoritmo de progressão na tabela FP em que estas relações de recorrência possam vir a inserir-se. É necessário notar que, tal como no algoritmo da secção anterior, o número de coeficientes da série que estão calculados também condiciona, como seria de esperar, o valor de $L_{p+1,q}$.

As proposições seguintes representam outras fórmulas de progressão descendente na tabela FP. No seu conjunto, as três fórmulas seguintes permitem, a menos das restrições impostas a cada uma, calcular toda a tabela a partir da primeira linha. Uma vez que os coeficientes dos erros $e_i^{[p/q]}$ intervêm nos segundos membros das equações, é necessário incluí-los no conjunto de dados necessários para um algoritmo. Este facto impede, por exemplo, que se utilize o algoritmo, baseado na decomposição LU das matrizes associadas aos coeficientes dos denominadores, para o cálculo das linhas da tabela, proposto no capítulo anterior, uma vez que aí, tal como o algoritmo está apresentado, apenas se calculam os coeficientes dos numeradores e dos denominadores. Em vez disso, dispondo de um número suficiente de coeficientes da série, para o cálculo da primeira linha da tabela, juntamente com os primeiros coeficientes das respectivas séries dos erros, pode utilizar-se com sucesso o algoritmo (• • • *) apresentado na secção anterior.

Por serem idênticas à demonstração da proposição anterior, as demonstrações das proposições seguintes não se apresentam.

Proposição 4.10 *Sejam $p \geq 0$ e $q \geq 1$ tais que os aproximantes $[p/q - 1]_f^P$, $[p/q]_f^P$ e $[p/q + 1]_f^P$ existem, satisfazem as condições de normalidade e cujos coeficientes estão calculados, juntamente com os primeiros coeficientes das respectivas séries do erro. Definindo*

$$\begin{cases} N^{[p+1/q]} = \lambda N^{[p/q-1]} + (\eta + z)N^{[p/q]} + \rho N^{[p/q+1]} \\ D^{[p+1/q]} = \lambda D^{[p/q-1]} + (\eta + z)D^{[p/q]} + \rho D^{[p/q+1]} \end{cases} \quad \begin{matrix} \bullet & \bullet & \bullet \\ & & * \end{matrix}$$

com

$$\begin{cases} \rho = -\alpha_q \\ \lambda = -\gamma_{p+q+1} \frac{e_{p+q+1}^{[p/q]}}{e_{p+q}^{[p/q-1]}} \\ \eta = -\frac{1}{e_{p+q+1}^{[p/q]}} (e_{p+q+1}^{[p/q-1]} \lambda + d_{p+q+1}^{[p/q]}) \end{cases}$$

e

$$\Delta = \eta + \alpha_{q-1} b_{q-1}^{[p/q]} - \alpha_q b_q^{[p/q+1]} + \beta_q.$$

Se $\Delta \neq 0$ então

$$\frac{N^{[p+1/q]}(z)}{D^{[p+1/q]}(z)} = [p+1/q]_f^P(z)$$

é o AFP tal que $b_q^{[p+1/q]} = \Delta$. Caso contrário, a tabela Frobenius-Padé é não normal, sendo

$$\frac{N^{[p+1/q]}(z)}{D^{[p+1/q]}(z)} = O(P_{p+q+2})$$

com $\partial(N^{[p+1/q]}) = p+1$ e $\partial(D^{[p+1/q]}) \leq q-1$.

Corolário 4.11 *Nas condições da proposição anterior, os coeficientes dos aproximantes, satisfazem a relação*

$$\begin{cases} a_{p+1}^{[p+1/q]} = \alpha_p a_p^{[p/q]} \\ a_i^{[p+1/q]} = \lambda a_i^{[p/q-1]} + \eta a_i^{[p/q]} + g_i^{[p/q]} + \rho a_i^{[p/q+1]}, \quad i = 0, \dots, p \\ b_q^{[p+1/q]} = \Delta \\ b_i^{[p+1/q]} = \lambda b_i^{[p/q-1]} + \eta b_i^{[p/q]} + h_i^{[p/q]} + \rho b_i^{[p/q+1]}, \quad i = 0, \dots, q-1 \\ e_i^{[p+1/q]} = \lambda e_i^{[p/q-1]} + \eta e_i^{[p/q]} + d_i^{[p/q]} + \rho e_i^{[p/q+1]}, \quad i = p+q+2, \dots, L_{p+1,q} \end{cases}$$

onde $L_{p+1,q}$ representa uma constante a determinar e os valores g_i , h_i e d_i são dados pelas fórmulas da proposição 4.1.

Nesta e nas proposições seguintes, é necessário fazer os mesmos comentários acerca da constante $L_{p+1,q}$ feitos na proposição anterior.

Proposição 4.11 *Sejam $p \geq 0$ e $q \geq 1$ tais que os aproximantes $[p/q-1]_f^p$, $[p/q]_f^p$ e $[p/q+1]_f^p$ existem, satisfazem as condições de normalidade e cujos coeficientes estão calculados, juntamente com os primeiros coeficientes das respectivas séries do erro. Definindo*

$$\begin{cases} N^{[p+1/q+1]} = \lambda N^{[p/q-1]} + (\eta + z)N^{[p/q]} + \rho N^{[p/q+1]} & \bullet \bullet \bullet \\ D^{[p+1/q+1]} = \lambda D^{[p/q-1]} + (\eta + z)D^{[p/q]} + \rho D^{[p/q+1]} & * \end{cases}$$

com

$$\begin{cases} \lambda = -\gamma_{p+q+1} \frac{e_{p+q+1}^{[p/q]}}{e_{p+q+1}^{[p/q-1]}} \\ \eta = -\frac{1}{e_{p+q+1}^{[p/q]}} (e_{p+q+1}^{[p/q-1]} \lambda + d_{p+q+1}^{[p/q]}) \\ \rho = -\frac{1}{e_{p+q+2}^{[p/q+1]}} (e_{p+q+2}^{[p/q-1]} \lambda + e_{p+q+2}^{[p/q]} \eta + d_{p+q+2}^{[p/q]}) \end{cases}$$

e

$$\Delta = \rho + \alpha_q.$$

Se $\Delta \neq 0$ então

$$\frac{N^{[p+1/q+1]}}{D^{[p+1/q+1]}} = [p+1/q+1]_f^p$$

é o AFP tal que $b_{q+1}^{[p+1/q+1]} = \Delta$. Caso contrário, a tabela Frobenius-Padé é não normal, sendo

$$\frac{N^{[p+1/q+1]}}{D^{[p+1/q+1]}} = O(P_{p+q+3})$$

com $\partial(N^{[p+1/q+1]}) = p+1$ e $\partial(D^{[p+1/q+1]}) \leq q$.

Desta proposição, à semelhança das proposições anteriores, resulta um corolário estabelecendo relações de recorrência entre coeficientes $a_i^{[p/q]}$, $b_i^{[p/q]}$ e $e_i^{[p/q]}$ dos aproximantes envolvidos. Por ser óbvia a dedução das fórmulas, baseada na proposição acima e nas fórmulas da proposição 4.1, e por ser imediata a demonstração, o corolário não se apresenta. Esta observação abrange igualmente as proposições seguintes.

Proposição 4.12 *Sejam $p \geq 0$ e $q \geq 1$ tais que os aproximantes $[p/q - 1]_f^P$, $[p/q]_f^P$ e $[p/q + 1]_f^P$ existem, satisfazem as condições de normalidade e cujos coeficientes estão calculados, juntamente com os primeiros coeficientes das respectivas séries do erro. Definindo*

$$\begin{cases} N^{[p+1/q-1]} = \lambda N^{[p/q-1]} + (\eta + z)N^{[p/q]} + \rho N^{[p/q+1]} & \bullet \bullet \bullet \\ D^{[p+1/q-1]} = \lambda D^{[p/q-1]} + (\eta + z)D^{[p/q]} + \rho D^{[p/q+1]} & * \end{cases}$$

com

$$\begin{cases} \rho = -\alpha_q \\ \lambda = -\gamma_{p+q+1} \frac{e^{[p/q]}}{e^{[p/q-1]}} \\ \eta = \alpha_q b_q^{[p/q+1]} - \alpha_{q-1} b_{q-1}^{[p/q]} - \beta_q \end{cases}$$

e

$$\Delta = \lambda + \alpha_{q-2} b_{q-2}^{[p/q]} + (\eta + \beta_{q-1}) b_{q-1}^{[p/q]} - \alpha_q b_{q-1}^{[p/q+1]} + \gamma_q.$$

Se $\Delta \neq 0$ então

$$\frac{N^{[p+1/q-1]}}{D^{[p+1/q-1]}} = [p + 1/q - 1]_f^P$$

é o AFP tal que $b_{q-1}^{[p+1/q-1]} = \Delta$. Caso contrário, a tabela Frobenius-Padé é não normal, sendo

$$\frac{N^{[p+1/q-1]}}{D^{[p+1/q-1]}} = O(P_{p+q+1})$$

com $\partial(N^{[p+1/q-1]}) = p + 1$ e $\partial(D^{[p+1/q-1]}) \leq q - 2$.

À semelhança da relação $\bullet \bullet \bullet *$, estabelecendo uma recorrência entre quatro elementos da mesma linha, é possível estabelecer uma recorrência entre quatro elementos da mesma coluna.

Proposição 4.13 *Sejam $p \geq 2$ e $q \geq 0$ tais que os aproximantes $[p - 2/q]_f^P$, $[p - 1/q]_f^P$ e $[p/q]_f^P$ existem, satisfazem as condições de normalidade e cujos coeficientes estão calculados, juntamente com os primeiros coeficientes das respectivas séries do erro. Definindo*

$$\begin{cases} N^{[p+1/q]} = \lambda N^{[p-2/q]} + (\eta + z)N^{[p-1/q]} + (\rho - z)N^{[p/q]} & \bullet \\ D^{[p+1/q]} = \lambda D^{[p-2/q]} + (\eta + z)D^{[p-1/q]} + (\rho - z)D^{[p/q]} & \bullet \\ & \bullet \\ & * \end{cases}$$

com

$$\begin{cases} \lambda = -\gamma_{p+q} \frac{e^{[p-1/q]}}{e^{[p-2/q]}} \\ \eta = -\frac{1}{e^{[p-1/q]}} (\lambda e_{p+q}^{[p-2/q]} + d_{p+q}^{[p-1/q]} - d_{p+q}^{[p/q]}) \\ \rho = -\frac{1}{e^{[p/q]}} (\lambda e_{p+q+1}^{[p-2/q]} + \eta e_{p+q+1}^{[p-1/q]} + d_{p+q+1}^{[p-1/q]} - d_{p+q+1}^{[p/q]}) \end{cases}$$

e

$$\Delta = \lambda + \eta + \rho - \alpha_{q-1} \Lambda$$

com $\Lambda = b_{q-1}^{[p/q]} - b_{q-1}^{[p-1/q]}$ como no corolário 4.2. Se $\Delta \neq 0$ então

$$\frac{N^{[p+1/q]}}{D^{[p+1/q]}} = [p + 1/q]_f^P$$

é o AFP tal que $b_q^{[p+1/q]} = \Delta$. Caso contrário, a tabela Frobenius-Padé é não normal, sendo

$$\frac{N^{[p+1/q]}}{D^{[p+1/q]}} = O(P_{p+q+2})$$

com $\partial(N^{[p+1/q]}) = p + 1$ e $\partial(D^{[p+1/q]}) \leq q - 1$.

A implementação de um algoritmo baseado nestas fórmulas, é semelhante ao efectuado na secção anterior. É necessário atender quer às inicializações necessárias ao arranque do algoritmo, quer ao número de coeficientes da série disponíveis para o cálculo. Em cada iteração do algoritmo, é necessário atender ao limite superior dos índices $L_{p,q}$, dos coeficientes do erro a calcular. Por ser tecnicamente semelhante ao exposto na secção anterior, nesta secção o algoritmo não se apresenta.

Uma diferença, nas fórmulas estabelecidas nesta secção, relativamente à anterior, reside no facto de os aproximantes aqui construídos não satisfazerem, em geral, a normalização $b_q^{[p/q]} = 1$. Esta normalização, para os dados das diversas proposições, está incluída nas hipóteses estabelecidas. Este facto impõem que, para poder incrementar estas relações para o cálculo de uma sucessão de aproximantes, é necessário normalizar os aproximantes, dividindo os coeficientes calculados pela constante Δ .

Na secção seguinte desenvolve-se um algoritmo de cálculo de aproximantes, numa sussecção de elementos pertencentes a duas diagonais adjacentes da tabela de Frobenius-Padé.

4.3.3 Relações de progressão nas diagonais da tabela

Os resultados seguintes permitem progredir em *escada* na tabela FP.

Proposição 4.14 *Sejam $p, q \geq 1$ tais que os aproximantes $[p-1/q-1]_f^P$, $[p/q-1]_f^P$ e $[p/q]_f^P$ existem e satisfazem as condições de normalidade. Definindo*

$$\begin{cases} N^{[p+1/q]} = \lambda N^{[p-1/q-1]} + (\eta + z)N^{[p/q-1]} + \rho N^{[p/q]} & \bullet \\ D^{[p+1/q]} = \lambda D^{[p-1/q-1]} + (\eta + z)D^{[p/q-1]} + \rho D^{[p/q]} & \bullet \\ & \bullet \\ & * \end{cases}$$

com

$$\begin{cases} \lambda = -\gamma_{p+q} \frac{e^{[p/q-1]}}{e^{[p+q]}} \\ \eta = -\frac{1}{e^{[p/q-1]}} (\lambda e_{p+q}^{[p-1/q-1]} + d_{p+q}^{[p/q-1]}) \\ \rho = -\frac{1}{e_{p+q+1}^{[p/q]}} (\lambda e_{p+q+1}^{[p-1/q-1]} + \eta e_{p+q+1}^{[p/q-1]} + d_{p+q+1}^{[p/q-1]}) \end{cases}$$

e

$$\Delta = \alpha_{q-1} + \rho.$$

Se $\Delta \neq 0$ então

$$\frac{N^{[p+1/q]}}{D^{[p+1/q]}} = [p+1/q]_f^P$$

é o AFP tal que $b_q^{[p+1/q]} = \Delta$. Caso contrário, a tabela Frobenius-Padé é não normal, sendo

$$D^{[p+1/q]}_f - N^{[p+1/q]} = O(P_{p+q+2})$$

com $\partial(N^{[p+1/q]}) = p + 1$ e $\partial(D^{[p+1/q]}) \leq q - 1$

Proposição 4.15 *Sejam $p \geq 0$ e $q \geq 1$ tais que os aproximantes $[p/q - 1]_f^p$, $[p/q]_f^p$ e $[p + 1/q]_f^p$ existem e satisfazem as condições de normalidade. Definindo*

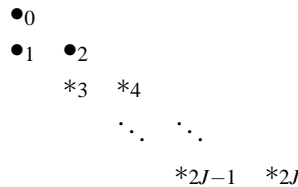
$$\begin{cases} N^{[p+1/q+1]} = \lambda N^{[p/q-1]} + (\eta + \tau z) N^{[p/q]} + \rho N^{[p+1/q]} & \bullet \bullet \\ D^{[p+1/q+1]} = \lambda D^{[p/q-1]} + (\eta + \tau z) D^{[p/q]} + \rho D^{[p+1/q]} & \bullet * \end{cases}$$

com

$$\begin{cases} \tau = 1/\alpha_q \\ \lambda = -\frac{\gamma_{p+q+1}}{\alpha_q} \frac{e^{[p/q]}}{e^{[p/q-1]}} \\ \eta = -\frac{1}{e^{[p/q]}} (e^{[p/q-1]} \lambda + d_{p+q+1}^{[p/q]} \tau) \\ \rho = -\frac{1}{e^{[p+1/q]}} (e^{[p/q-1]} \lambda + e^{[p/q]} \eta + d_{p+q+2}^{[p/q]} \tau) \end{cases},$$

então $N^{[p+1/q+1]}/D^{[p+1/q+1]} = [p + 1/q + 1]_f^p$ é o AFP normalizado com $b_{q+1}^{[p+1/q+1]} = 1$.

Utilizando intercaladamente as duas relações $\bullet \bullet$ e $\bullet \bullet$, podemos calcular uma sucessão de aproximantes dispostos em duas diagonais adjacentes. Sendo $\bullet_0 = [p/0]_f^p$, $\bullet_1 = [p + 1/0]_f^p$ e $\bullet_2 = [p + 1/1]_f^p$, com as fórmulas anteriores, podemos calcular a sucessão de aproximantes $*_3 = [p + 2/1]_f^p$, $*_4 = [p + 2/2]_f^p$, $*_5 = [p + 3/2]_f^p$, $*_6 = [p + 3/3]_f^p, \dots, *_{2i-1} = [p + i/i - 1]_f^p, *_{2i} = [p + i/i]_f^p, \dots$, com a seguinte disposição na tabela



Os procedimentos encontram-se esquematizados no seguinte algoritmo

Algoritmo $\bullet \bullet$
* *

Dados: $p, J, \in \mathbb{N}, \{f_i\}_{i=0}^{p+3J}$

Calcula: $\left\{ [p + q/q - 1]_f^p, [p + q/q]_f^p \right\}_{q=2}^J$

Parâmetros: $\{\alpha_i, \beta_i, \gamma_i\}_{i=0}^{p+3J}$

Valores iniciais:

$$\begin{aligned}
a_{q,-1} &= b_{q,-1} = e_{q,p+q} = 0, & q = 0, \dots, 2J \\
a_{2q,p+q+1} &= b_{2q,q+1} = 0, & b_{2q,q} = 1, & q = 0, \dots, J \\
a_{2q-1,p+q+1} &= b_{2q-1,q} = 0, & b_{2q-1,q-1} = 1, & q = 1, \dots, J \\
e_{q,i} &= 0, & i = 0, \dots, p+q, & q = 0, \dots, 2J \\
a_{0,i} &= f_i, & i = 0, \dots, p \\
a_{1,i} &= f_i, & i = 0, \dots, p+1 \\
e_{0,i} &= f_i, & i = p+1, \dots, p+3J \\
e_{1,i} &= f_i, & i = p+2, \dots, p+3J
\end{aligned}$$

Calcular:

$$\begin{array}{|l}
\% [p+1/1]_f^P \\
\hline
d_{0,i} = \alpha_{i-1}f_{i-1} + \beta_i f_i + \gamma_{i+1}f_{i+1}, \quad i = p+2, \dots, p+3J-1 \\
b_{2,0} = \frac{\beta_0}{\alpha_0} - \frac{1}{\alpha_0 f_{p+2}} d_{0,p+2} \\
a_{2,0} = b_{2,0}f_0 + \frac{\gamma_1}{\alpha_0} f_1 \\
a_{2,i} = (b_{2,0} - \frac{\beta_0}{\alpha_0})f_i + \frac{1}{\alpha_0}(\alpha_{i-1}f_{i-1} + \beta_i f_i + \gamma_{i+1}f_{i+1}), \quad i = 1, \dots, p+1 \\
e_{2,i} = (b_{2,0} - \frac{\beta_0}{\alpha_0})f_i + \frac{1}{\alpha_0}d_{0,i}, \quad i = p+3, \dots, p+3J-1 \\
\text{Se } e_{2,p+3} = 0 \text{ então pára}
\end{array}$$

Para $q = 2, \dots, J$

$$\begin{array}{|l}
\% [p+q/q-1]_f^P \\
\hline
d_{2q-3,i} = \alpha_{i-1}e_{2q-3,i-1} + \beta_i e_{2q-3,i} + \gamma_{i+1}e_{2q-3,i+1}, \quad i = p+2q-2, \dots, p+3J-q \\
g_{2q-3,i} = \alpha_{i-1}a_{2q-3,i-1} + \beta_i a_{2q-3,i} + \gamma_{i+1}a_{2q-3,i+1}, \quad i = 0, \dots, p+q-1 \\
h_{2q-3,i} = \alpha_{i-1}b_{2q-3,i-1} + \beta_i b_{2q-3,i} + \gamma_{i+1}b_{2q-3,i+1}, \quad i = 0, \dots, q-2 \\
\lambda_1 = -\gamma_{p+2q-2} \frac{e_{2q-3,p+2q-2}}{e_{2q-4,p+2q-3}} \\
\eta_1 = \gamma_{p+2q-2} \frac{e_{2q-4,p+2q-2}}{e_{2q-4,p+2q-3}} - \frac{d_{2q-3,p+2q-2}}{e_{2q-3,p+2q-2}} \\
\rho_1 = \frac{-1}{e_{2q-2,p+2q-1}} (e_{2q-4,p+2q-1}\lambda_1 + e_{2q-3,p+2q-1}\eta_1 + d_{2q-3,p+2q-1}) \\
\Delta = \alpha_{q-2} + \rho_1 \\
\text{Se } \Delta = 0 \text{ então pára} \\
a_{2q-1,p+q} = \alpha_{p+q-1}a_{2q-3,p+q-1}/\Delta \\
a_{2q-1,p+q-1} = (\eta_1 a_{2q-3,p+q-1} + g_{2q-3,p+q-1} + \rho_1 a_{2q-2,p+q-1})/\Delta \\
a_{2q-1,i} = (\lambda_1 a_{2q-4,i} + \eta_1 a_{2q-3,i} + g_{2q-3,i} + \rho_1 a_{2q-2,i})/\Delta, \quad i = 0, \dots, p+q-2 \\
b_{2q-1,i} = (\lambda_1 b_{2q-4,i} + \eta_1 b_{2q-3,i} + h_{2q-3,i} + \rho_1 b_{2q-2,i})/\Delta, \quad i = 0, \dots, q-2 \\
e_{2q-1,i} = (\lambda_1 e_{2q-4,i} + \eta_1 e_{2q-3,i} + d_{2q-3,i} + \rho_1 e_{2q-2,i})/\Delta, \quad i = p+2q, \dots, p+3J-q \\
\text{Se } e_{2q-1,p+2q} = 0 \text{ então pára}
\end{array}$$

$$\begin{array}{l}
\% [p+q/q]_f^P \\
\hline
d_{2q-2,i} = \alpha_{i-1}e_{2q-2,i-1} + \beta_i e_{2q-2,i} + \gamma_{i+1}e_{2q-2,i+1}, \quad i = p+2q-1, \dots, p+3J-q \\
g_{2q-2,i} = \alpha_{i-1}a_{2q-2,i-1} + \beta_i a_{2q-2,i} + \gamma_{i+1}a_{2q-2,i+1}, \quad i = 0, \dots, p+q-1 \\
h_{2q-2,i} = \alpha_{i-1}b_{2q-2,i-1} + \beta_i b_{2q-2,i} + \gamma_{i+1}b_{2q-2,i+1}, \quad i = 0, \dots, q-1 \\
\tau_2 = 1/\alpha_{q-1} \\
\lambda_2 = -\frac{\gamma_{p+2q-1}}{\alpha_{q-1}} \frac{e_{2q-2,p+2q-1}}{e_{2q-3,p+2q-2}} \\
\eta_2 = \frac{-1}{e_{2q-2,p+2q-1}} (e_{2q-3,p+2q-1}\lambda_2 + d_{2q-2,p+2q-1}\tau_2) \\
\rho_2 = \frac{-1}{e_{2q-1,p+2q}} (e_{2q-3,p+2q}\lambda_2 + e_{2q-2,p+2q}\eta_2 + d_{2q-2,p+2q}\tau_2) \\
a_{2q,p+q} = \frac{\alpha_{p+q-1}}{\alpha_{q-1}} a_{2q-2,p+q-1} + \rho_2 a_{2q-1,p+q} \\
a_{2q,i} = \lambda_2 a_{2q-3,i} + \eta_2 a_{2q-2,i} + \tau_2 g_{2q-2,i} + \rho_2 a_{2q-1,i}, \quad i = 0, \dots, p+q-1 \\
b_{2q,q-1} = \eta_2 + \tau_2 h_{2q-2,q-1} + \rho_2 \\
b_{2q,i} = \lambda_2 b_{2q-3,i} + \eta_2 b_{2q-2,i} + \tau_2 h_{2q-2,i} + \rho_2 b_{2q-1,i}, \quad i = 0, q-2 \\
e_{2q,i} = \lambda_2 e_{2q-3,i} + \eta_2 e_{2q-2,i} + \tau_2 d_{2q-2,i} + \rho_2 e_{2q-1,i}, \quad i = p+2q+1, \dots, p+3J-q \\
\text{Se } e_{2q,p+2q+1} = 0 \text{ então pára}
\end{array}$$

Resultados:

Para $q = 1, \dots, J$

$$\begin{aligned}
N^{[p+q/q-1]} &= \sum_{i=0}^{p+q} a_{2q-1,i} P_i \\
D^{[p+q/q-1]} &= \sum_{i=0}^{q-2} b_{2q-1,i} P_i + P_{q-1} \\
N^{[p+q/q]} &= \sum_{i=0}^{p+q} a_{2q,i} P_i \\
D^{[p+q/q]} &= \sum_{i=0}^{q-1} b_{2q,i} P_i + P_q \\
D^{[p+q/q-1]} f - N^{[p+q/q-1]} &= \sum_{i=p+2q}^{p+3J-q} e_{2q-1,i} P_i + O(P_{p+3J-q+1}) \\
D^{[p+q/q]} f - N^{[p+q/q]} &= \sum_{i=p+2q+1}^{p+3J-q} e_{2q,i} P_i + O(P_{p+3J-q+1})
\end{aligned}$$

Este algoritmo avalia os coeficientes dos aproximantes $\{[p+q/q-1]_f^P, [p+q/q]_f^P\}$, $q = 1, J$, juntamente com os coeficientes de uma estimativa para o erro em cada aproximante, com cerca de $35J^2 + (14p-11)J$ multiplicações. A comparação com outros algoritmos não é fácil, uma vez que não se conhece outro algoritmo para o cálculo do mesmo conjunto de aproximantes. No entanto, se aceitarmos a comparação com o volume de aritmética envolvido no cálculo dos coeficientes de $[p+J/J]_f^P$, o último dos aproximantes calculado no algoritmo aqui proposto, envolvendo a resolução de um sistema de equações lineares de dimensão J , teremos nesse caso $\frac{1}{3}J(J^2 + J - 1)$ multiplicações para a resolução do sistema, se se utilizar o processo de eliminação de Gauss, ou $11J^2 + (p-5)J + 1$ multiplicações se atendermos à estrutura da matriz e utilizarmos o algoritmo rápido de eliminação de Gauss proposto em [35], e exposto no capítulo anterior. Acresce que, em ambos os casos envolvendo a resolução do sistema, é necessário contar com a aritmética envolvida no cálculo dos $(J+1)^2$ coeficientes do sistema, mais os $(J+p+1)(J+1)$ coeficientes envolvidos no cálculo dos numeradores, o que, seguindo o método proposto em [34], requer cerca de $\frac{15}{2}(J-1)(p+1)$ multiplicações. Pode concluir-se que, sendo embora algoritmos com objectivos distintos, o algoritmo apresentado neste capítulo, com um acréscimo do esforço computacional de aproximadamente $24J^2$ multiplicações, quando comparado com o algoritmo baseado na resolução do sistema, calcula uma sucessão de aproximantes e fornece para cada um deles uma estimativa do erro na aproximação da função.

Resultados Numéricos

O algoritmo foi programado em Fortran, utilizando aritmética de dupla precisão, e testado com duas funções de que se conhece um desenvolvimento de Fourier com coeficientes exactos. Para cada uma das funções tratadas, calcularam-se as sucessões de aproximantes correspondentes aos valores de teste $p = 0$ e $p = 5$. Em ambos os casos calcularam-se os primeiro 40 aproximantes da sucessão, isto é até ao elemento $[p + 20/20]_f^p(z)$.

A primeira função retoma o exemplo 3.2, tratado no capítulo anterior, com o algoritmo rápido de decomposição *LU*, baseado na estrutura de desvio de característica das matrizes associadas ao cálculo dos coeficientes dos denominadores.

Exemplo 4.3 Partindo da função geradora dos polinómios de Legendre [24], definidos com a mesma normalização do exemplo 2.1,

$$f(z) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2az + a^2}} = \sum_{n \geq 0} a^n P_n(z)$$

temos que

$$\{\alpha_i = \frac{i+1}{2i+1}, \beta_i = 0, \gamma_i = \frac{i}{2i+1}\}_{i=0}^{p+3J}$$

são os parâmetros e

$$\{f_i = a^i\}_{i=0}^{p+3J}$$

juntamente com p e com J são os dados do programa.

Este exemplo aparece também tratado em [34]. Tomando o mesmo valor do parâmetro $a = 0.8$ aí considerado, logo com

$$f(z) = \frac{1}{\sqrt{1.64 - 1.6z}}, \quad -1 < z < 1$$

os gráficos da figura 4.6 representam, em escala logarítmica, as curvas do erro absoluto $|f(z) - [m/n]_f^p(z)|$, para uma amostra dos aproximantes $[m/n]_f^p(z)$ calculados.

As curvas do erro sugerem que o comportamento dos aproximantes é perturbado pela singularidade da função $z = 1.64/1.6 = 1.025$. Em [34] os aproximantes são testados em dois pontos do intervalo de aproximação: um perto do extremo do intervalo e da singularidade, $z = 0.9$; o outro pertencente a uma região *bem comportada*, $z = -0.5$. A tabela 4.2 mostra, para cada posição (p, q) , o número de dígitos decimais exactos na aproximação $[p/q]_f^p(z)$, isto é $-\log_{10}(|f(z) - [m/n]_f^p(z)|)$ arredondado a inteiro, para estes dois valores de z .

Tanto quanto se pode comparar, estes resultados coincidem em precisão com os resultados apresentados em [34], para o cálculo de outra sucessão de elementos da tabela FP. Por exemplo, os aproximantes $[10/5]_f^p(z)$ e $[12/6]_f^p(z)$ coincidem nos dois conjuntos de resultados com, respectivamente, 7 e com 8 dígitos decimais exactos na abcissa $z = 0.9$.

Nos gráficos da figura 4.6 e na tabela 4.2, pode observar-se um aumento na precisão ao longo das diagonais, até que, cerca da coluna 8, isto é com 16 aproximantes calculados, devido à acumulação de erros nos cálculos, os erros globais começam a aumentar.

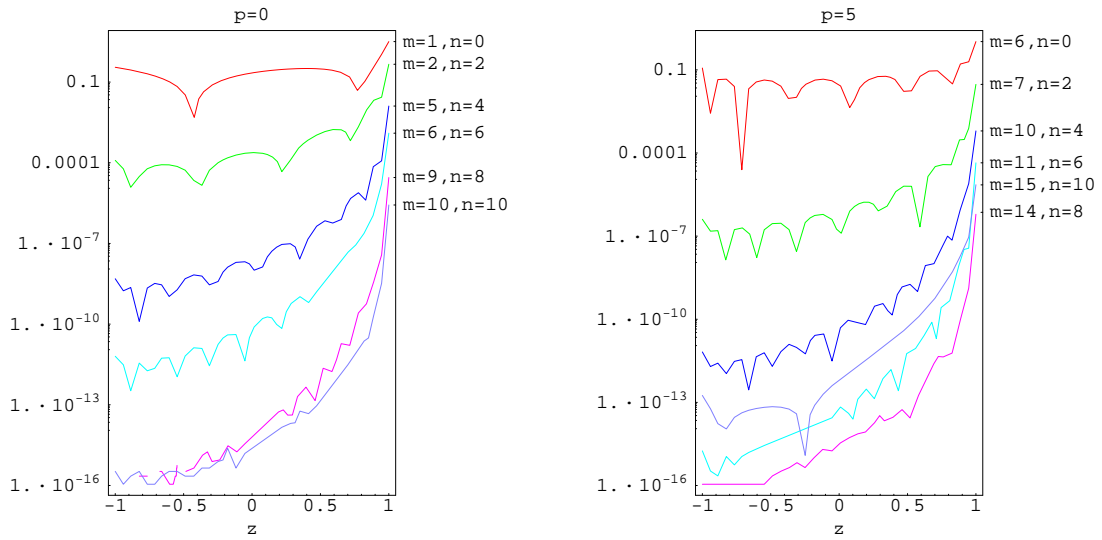


Figura 4.6: $|f(z) - [m/n]_f^p(z)|$, com $f(z) = \frac{1}{\sqrt{1.64-1.6z}}$. O valor de p indicado corresponde ao do aproximante $[p/0]_f^p$ utilizado no arranque do algoritmo.

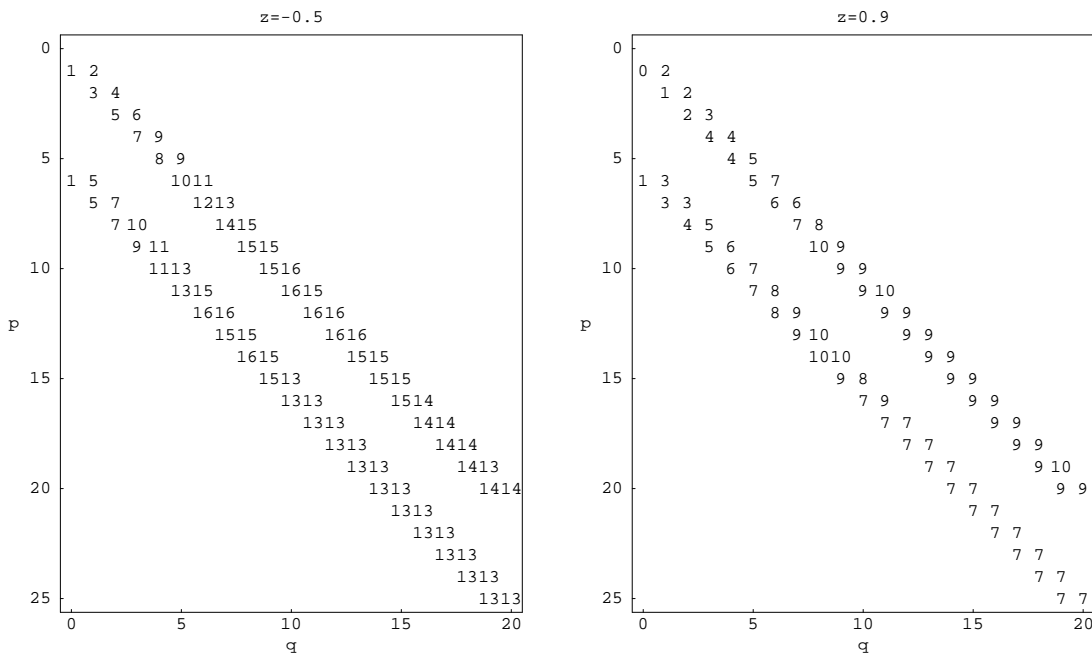


Tabela 4.2: $-\log_{10}(|f(z) - [m/n]_f^p(z)|)$ arredondado a inteiro, com $f(z) = \frac{1}{\sqrt{1.64-1.6z}}$.

Com o objectivo de analisar a propagação de erros no algoritmo, este foi programado em *Fortran* com aritmética de ponto flutuante em precisão dupla e em *Mathematica* com aritmética racional exacta. Os resultados dos dois programas foram comparados, em termos de erros relativos, no cálculo dos coeficientes dos aproximantes. Na figura 4.3 representa-se, para cada uma das sucessões de aproximantes calculados, o número mínimo de algarismos significativos exactos, isto é $-\log_{10}(\|\{|\frac{s_i^{[p/q]} - \tilde{s}_i^{[p/q]}}{s_i^{[p/q]}}|\}_{i=0}^k\|_{\infty})$ arredondado a inteiro, observados nos valores dos coeficientes dos numeradores, com $\tilde{s}_i^{[p/q]} = \tilde{a}_i^{[p/q]}$ e $k = p$ e dos denominadores, com $\tilde{s}_i^{[p/q]} = \tilde{b}_i^{[p/q]}$ e $k = q - 1$, calculados em dupla precisão, relativamente aos valores exactos $s_i^{[p/q]}$ calculados com aritmética racional.

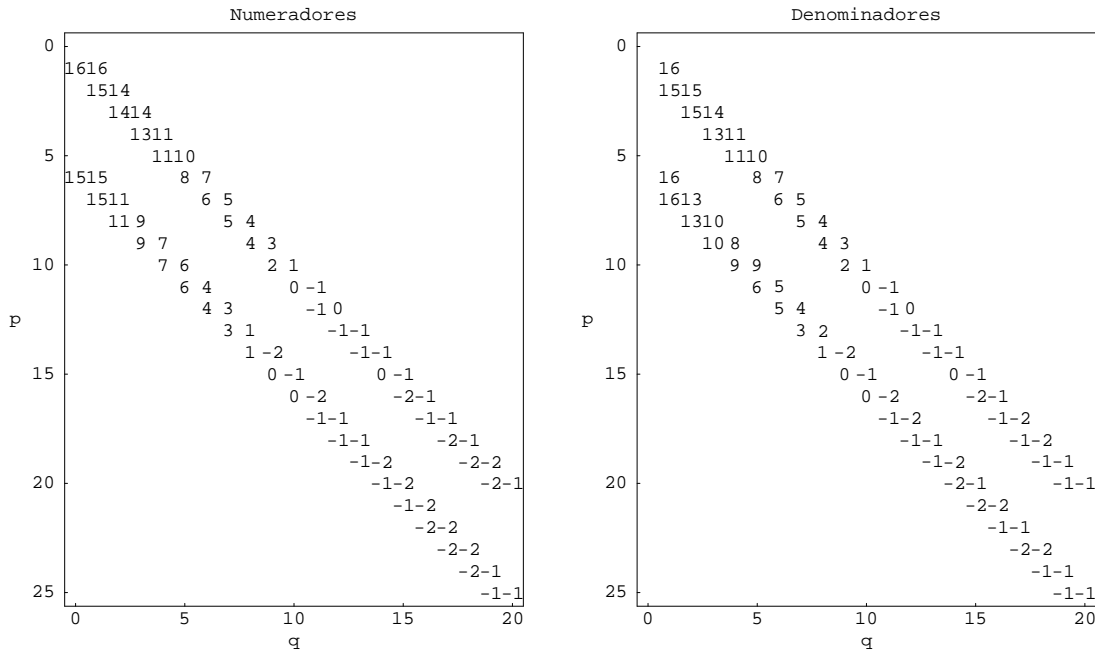


Tabela 4.3: Algarismos significativos exactos: $-\log_{10}(\|\{|\frac{s_i^{[p/q]} - \tilde{s}_i^{[p/q]}}{s_i^{[p/q]}}|\}_{i=0}^k\|_{\infty})$, arredondado a inteiro, com $s_i^{[p/q]} = a_i^{[p/q]}$ e $k = p$ para os numeradores, e com $s_i^{[p/q]} = b_i^{[p/q]}$ e $k = q - 1$ para os denominadores.

Nos casos observados, podemos verificar um aumento significativo dos erros relativos ao longo das sucessões de coeficientes calculados. A partir da coluna $q = 8$, os erros podem considerar-se até muito grandes. Este resultado contrasta com a boa aproximação obtida com estes aproximantes, o que parece indicar que o método da aproximação Frobenius-Padé é suficientemente robusto para minimizar a propagação dos erros no cálculo dos seus coeficientes. Analisando o algoritmo, verifica-se que as operações mais sensíveis, em termos de propagação de erros, consistem no cálculo das quantidades λ , η , ρ e τ . Este facto justifica-se porque estas operações envolvem quocientes em que os coeficientes dos erros e_i , geralmente quantidades pequenas em valor absoluto, pelo menos a partir de certa ordem, figuram em denominador. Sejam \tilde{a}_i , \tilde{b}_i e \tilde{e}_i os coeficientes calculados com os valores aproximados $\tilde{\lambda}$, $\tilde{\eta}$, $\tilde{\rho}$ e $\tilde{\tau}$. O aproximante calculado

$$\widetilde{[p/q]}_f^P = \frac{\widetilde{N}^{[p/q]}}{\widetilde{D}^{[p/q]}} = \frac{\sum_{i=0}^p \tilde{a}_i P_i}{\sum_{i=0}^{q-1} \tilde{b}_i P_i + P_q}$$

satisfaz uma condição de aproximação, perturbada pelos mesmos erros cometidos no cálculo dos coeficientes, isto é

$$\tilde{D}^{[p/q]} f - \tilde{N}^{[p/q]} = \sum_{i \geq 0} \tilde{e}_i P_i$$

com $\tilde{e}_i \approx 0$, $i \leq p + q$. O cálculo dos coeficientes \tilde{e}_i , que podem designar-se por resíduos, pode fazer-se recorrendo aos coeficientes $h_{i,j}$ introduzidos no capítulo 2, utilizando as fórmulas

$$G^{[p/q]} \tilde{b} + g^{[p/q]} - \tilde{a} = (\tilde{e}_0, \dots, \tilde{e}_p)^T$$

e

$$H^{[p/q]} \tilde{b} + h^{[p/q]} = (\tilde{e}_{p+1}, \dots, \tilde{e}_{p+q})^T$$

com as definições (2.6). Na tabela 4.4 apresenta-se, em cada posição (p, q) , o valor mínimo do número de casas decimais nulas nas componentes dos respectivos vectores dos resíduos, isto é os valores $-\log_{10}(\|(\tilde{e}_0, \dots, \tilde{e}_p)\|_\infty)$ e $-\log_{10}(\|(\tilde{e}_{p+1}, \dots, \tilde{e}_{p+q})\|_\infty)$ arredondados a inteiro.

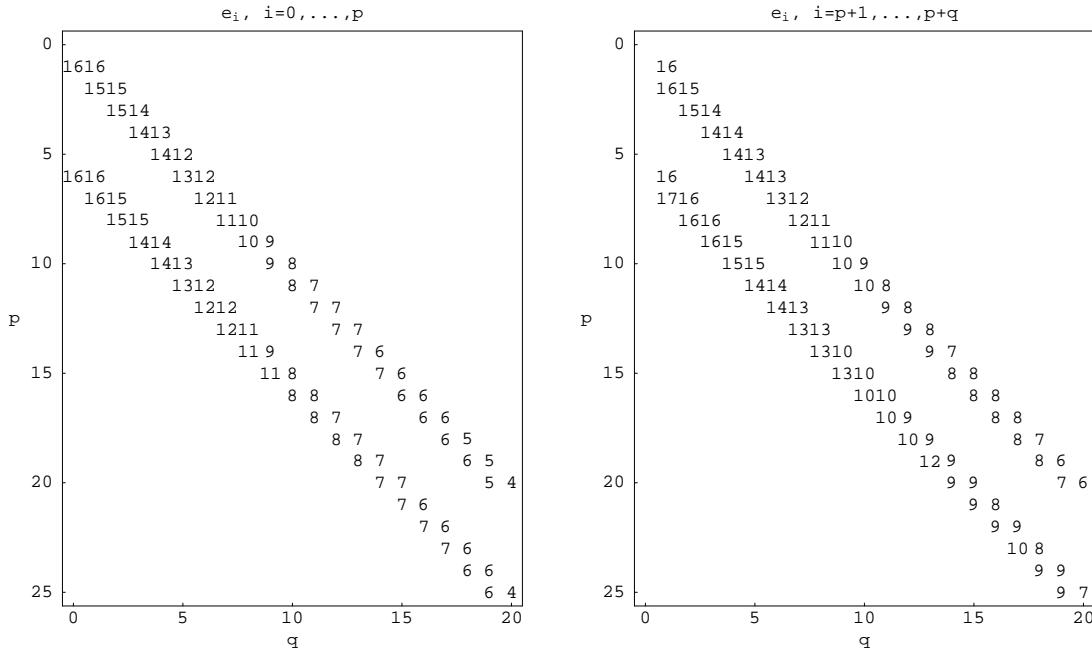


Tabela 4.4: $-\log_{10}(\|\tilde{e}_i\|_\infty)$

Os valores mostram que as componentes dos vectores dos resíduos crescem mais lentamente do que as componentes dos vectores dos erros no cálculo dos coeficientes.

Tal como na secção 4.3.1, também aqui importa comparar os valores do erro na aproximação da função $f(z) - [p/q]_f^P(z)$ com a estimativa do erro $\frac{\sum_{i=p+q+1}^{p+3l-q} \tilde{e}_i^{[p/q]} P_i(z)}{D^{[p/q]}(z)}$ calculada com este algoritmo. Na figura 4.7 representa-se, para cada uma das sucessões calculadas, o valor máximo do erro calculado (+) para as duas diagonais, e o valor máximo do erro estimado (●).

Da figura destaca-se que a estimativa do erro segue de perto os valores do erro calculado, nos primeiros 16 aproximantes calculados, isto é até à coluna $q = 8$. Nas colunas seguintes, coincidindo com o valor de q onde os erros de aproximação param de diminuir, os valores do erro absoluto máximo calculado divergem dos valores do erro absoluto máximo estimado.

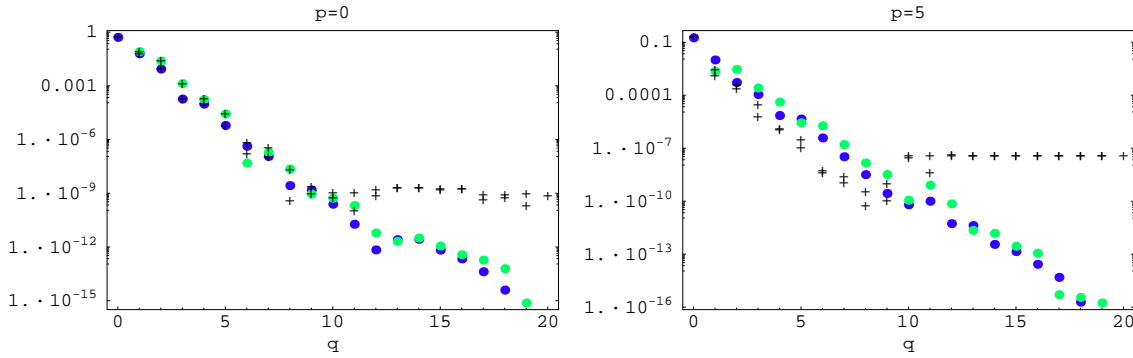


Figura 4.7: $\max_{-1 \leq z \leq 1} |f(z) - [p + q/q]_f^P(z)|$ e $\max_{-1 \leq z \leq 1} |f(z) - [p + q/q - 1]_f^P(z)|$ (+), $\max_{-1 \leq z \leq 1} \left| \frac{\sum_{i=p+2q+1}^{p+3J-q} e_i^{[p+q/q]} P_i(z)}{D^{[p+q/q]}(z)} \right|$ e $\max_{-1 \leq z \leq 1} \left| \frac{\sum_{i=p+2q}^{p+3J-q} e_i^{[p+q/q-1]} P_i(z)}{D^{[p+q/q-1]}(z)} \right|$ (●), com $J = 20$

4.4 Conclusões

Neste capítulo demonstrou-se a existência de relações entre os coeficientes das componentes, isto é dos numeradores, dos denominadores e dos erros, de elementos da tabela de Frobenius-Padé. As demonstrações apresentadas são constructivas, no sentido em que fornecem fórmulas de cálculo dos coeficientes destas relações.

Ficou demonstrado que tais relações, isoladamente ou combinadas entre si, podem utilizar-se para o cálculo dos coeficientes dos aproximantes por recorrência. Esta possibilidade ilustrou-se, com a implementação em dois algoritmos, do cálculo de uma sucessão de aproximantes. Para a construção dos algoritmos, foi determinado o número mínimo de coeficientes da série, necessários para o cálculo daquelas sucessões de aproximantes. Verificou-se que este número coincide com o encontrado para outros algoritmos.

Os algoritmos apresentados foram programados em Fortran, e testados com exemplos de séries com diversos comportamentos, convergentes e divergentes. Os resultados indicam, para além das boas qualidades dos aproximantes de Frobenius-Padé, a capacidade dos algoritmos para as reproduzir. Os algoritmos mostram-se suficientemente estáveis para calcular uma sucessão de valores com precisão crescente, por regra, até valores próximos da precisão dupla utilizada no cálculo dos coeficientes.

Verificou-se, com um exemplo, a possibilidade de obter uma sucessão de aproximantes convergentes, calculados a partir dos coeficientes de Fourier de um desenvolvimento em série divergente. No exemplo apresentado, referido na literatura como divergente em todos os pontos, obtêm-se resultados que não são significativamente piores, em termos do erro relativo máximo observado num intervalo de valores, relativamente a outro exemplo utilizado com uma série de Fourier convergente.

Com recurso a um exemplo, de um desenvolvimento em série de uma função descontínua num ponto, verificou-se que os aproximantes racionais de Frobenius-Padé podem atenuar de forma significativa o designado *fenómeno de Gibbs*. Este fenómeno, presente na aproximação das somas parciais de séries de Fourier, é traduzido pela existência de oscilações acentuadas na vizinhança das singularidades da função. No exemplo estudado, a aproximação racional, não apresenta oscilações do erro que sejam perceptíveis, na mesma escala, das oscilações observadas com a aproximação das

somas parciais, utilizando o mesmo número de coeficientes da série.

O último algoritmo apresentado foi programado num sistema de aritmética de precisão finita, em *Fortran* tal como os algoritmos anteriores, e num sistema de aritmética exacta, no caso em *Mathematica*. Os coeficientes dos aproximantes, calculados com os dois sistemas, foram comparados em termos de erro relativo. Dos resultados obtidos, destaca-se que os erros relativos crescem de forma significativa ao longo das sucessões calculadas. Este resultado, contrastando com os bons resultados obtidos na aproximação das funções, revela que os aproximantes de Frobenius-Padé aproximam a função com uma precisão maior do que a precisão obtida no cálculo dos seus coeficientes.

Os algoritmos programados revelaram ainda, a capacidade de produzir estimativas para os erros na aproximação da função que, em certos casos, se mostraram bastante próximas dos erros calculados. Estas estimativas dos erros, são calculadas utilizando quantidades auxiliares, intervenientes nos algoritmos, não representando por isso, qualquer esforço adicional de cálculo.

Capítulo 5

Generalização a séries de Polinómios d -Ortgonais

A aproximação de Frobenius-Padé, isto é a generalização do conceito de aproximação de Padé ao caso de séries de Fourier, apresenta-se, na introdução deste trabalho, como o objecto primordial desta tese. A pesquisa de novos resultados, conducentes à elaboração de algoritmos de cálculo dos coeficientes destes aproximantes, é o objectivo que percorre os capítulos anteriores. Pretendeu-se, no último capítulo desta tese, reflectir sobre as possibilidades de generalização dos resultados dos capítulos precedentes.

Neste último capítulo verifica-se que parte dos resultados e dos algoritmos anteriores pode generalizar-se a outros conceitos de aproximantes ou a outros tipos de séries. A noção de biortogonalidade é considerada como uma generalização da definição de ortogonalidade para polinómios. No mesmo sentido, uma série de polinómios bi-ortgonais, constitui uma generalização das séries de Fourier, consideradas nos capítulos anteriores. Do caso geral dos polinómios bi-ortgonais, destacam-se os polinómios d -ortgonais, pelo facto de satisfazerem uma relação de recorrência de ordem $d + 1$.

Neste capítulo, apresenta-se como natural a generalização dos resultados dos capítulos anteriores, a séries de polinómios d -ortgonais. Na primeira secção, introduzem-se novos resultados relativos aos coeficientes do desenvolvimento em série de polinómios d -ortgonais de uma função. A noção de aproximação de Frobenius-Padé é generalizada a estas séries, e introduzem-se novas definições relacionadas com esta generalização. Nas secções seguintes, introduzem-se novos resultados relativos a estes aproximantes e apresentam-se diversos algoritmos de cálculo dos seus coeficientes.

Na secção 5.2 é introduzido um resultado novo, relacionando os coeficientes de uma série de polinómios d -ortgonais $f(z)$ com os coeficientes da série $zf(z)$.

Para as matrizes associadas ao cálculo dos aproximantes generalizados, verifica-se que satisfazem uma equação de desvio de característica. Na secção 5.3, explorando esta estrutura de desvio de característica, mostra-se que é possível calcular uma factorização LU das matrizes em $O(dq^2)$ operações aritméticas elementares.

Na secção seguinte, estabelecem-se diversas relações de recorrência envolvendo as componentes, i.e. numerador, denominador e erro, de $d + 3$ aproximantes de ordem consecutiva. Estas relações

permitem estabelecer diversos percursos na tabela de Frobenius-Padé generalizada. Estudadas as respectivas inicializações, as relações de recorrência obtidas, podem implementar-se em algoritmos de cálculo recursivo dos coeficientes dos aproximantes.

Afim de ilustrar a implementação dos algoritmos, e com o intuito de observar propriedades dos aproximantes calculados, programou-se um algoritmo de cálculo recursivo de uma sucessão de aproximantes. Com os resultados obtidos, pode concluir-se que o algoritmo é robusto e estável, permitindo calcular os coeficientes dos aproximantes com precisão suficiente para reproduzir os valores da função.

Na última secção deste capítulo, introduz-se um algoritmo de tipo Kronecker, para calcular sucessões de aproximantes nas anti-diagonais da tabela. À semelhança dos anteriores, este algoritmo produz aproximantes capazes de reproduzir os valores da função com grande precisão.

5.1 Notações e Definições

Um resultado chave, em parte das demonstrações dos resultados dos capítulos anteriores, consiste na relação entre os coeficientes de Fourier de duas séries formais $f(z)$ e $g(z)$ relacionadas por $g(z) = zf(z)$, enunciado e demonstrado na proposição 2.1. A demonstração desta proposição decorre da relação de recorrência de ordem dois, característica dos polinómios ortogonais. Uma questão natural, que surge como consequência desta reflexão, é saber quão particular é este resultado. A questão consiste em averiguar se, para uma família de polinómios satisfazendo uma relação de recorrência mais geral, será possível obter resultados que generalizem esta proposição.

Esta inquietação, conduz naturalmente, a uma família de polinómios satisfazendo uma relação de recorrência de ordem superior a dois. Nas últimas décadas, surgiu na literatura [33] e [37], uma generalização da noção de ortogonalidade, conduzindo aos chamados polinómios d -ortogonais, que satisfazem condições de ortogonalidade repartidas por d formas ou funcionais e que verificam uma relação de recorrência de ordem $d + 1$. Constituindo um caso particular de biortogonalidade, relativamente a estes polinómios, existem alguns resultados generalizando propriedades das séries de Fourier [6]. Estas observações, constituem a motivação para considerar funções definidas formalmente pela soma de séries de polinómios d -ortogonais, e de definir relativamente a estas séries, aproximantes de Frobenius-Padé, tal como se faz para séries ortogonais.

5.1.1 Polinómios d -ortogonais

Seja \mathcal{P} o espaço vectorial dos polinómios com coeficientes em \mathbb{C} e \mathcal{P}' o seu espaço dual, i.e. o espaço vectorial das funcionais lineares actuando em \mathcal{P} . O efeito de $u \in \mathcal{P}'$ em $f \in \mathcal{P}$, representa-se por $\langle u, f \rangle$. Com esta notação, introduz-se a definição de ortogonalidade de dimensão d ou d -ortogonalidade.

Definição 5.1 (Maroni [33], Van Iseghem [37]) *A família de polinómios $\{P_n\}_{n \geq 0}$ diz-se d -ortogonal ($d \in \mathbb{N}$) com respeito às d funcionais lineares u_0, \dots, u_{d-1} sse*

$$\begin{cases} \langle u_{\alpha-1}, P_m P_n \rangle = 0, & n \geq md + \alpha, \quad m \geq 0, \\ \langle u_{\alpha-1}, P_m P_{md+\alpha-1} \rangle \neq 0, & m \geq 0, \end{cases}$$

para cada inteiro $\alpha = 1, \dots, d$.

Para o caso particular $d = 1$, esta definição resulta na definição de ortogonalidade

$$\begin{cases} \langle u, P_m P_n \rangle = \mu_m \delta_{m,n}, & n, m \geq 0, \\ \mu_m \neq 0, & m \geq 0, \end{cases}$$

Esta noção de d -ortogonalidade é referida em [6] e [13], como constituindo um caso particular de biortogonalidade. A noção de biortogonalidade [15], [6] ou, equivalentemente, de sucessão dual [31], [32], corresponde à existência de uma sucessão $\{P_n\}_{n \geq 0}$ de polinómios em \mathcal{P} e de uma sucessão de funcionais lineares, ou de formas, $\{u_n\}_{n \geq 0}$ em \mathcal{P}' tais que

$$\langle u_n, P_m \rangle = \delta_{m,n}, \quad n, m \geq 0,$$

Um resultado fundamental, que é a chave da generalização de resultados efectuada nas secções seguintes, e que constitui uma propriedade de caracterização dos polinómios d -ortogonais, consiste na existência de uma relação de recorrência envolvendo $d + 2$ polinómios de graus consecutivos.

Teorema 5.1 (Maroni [31], Van Iseghem [37]) *A sucessão de polinómios $\{P_n\}_{n \geq 0}$ constitui uma sucessão de polinómios d -ortogonais (d -OPS), com $d \in \mathbb{N}$, se e só se existem $d + 1$ sucessões de coeficientes $\{\beta_n\}_{n \geq 0}$ e $\{\gamma_{n+1}^r\}_{n \geq 0}$, $r = 0, \dots, d - 1$, com $\gamma_{n+1}^0 \neq 0$, $n \geq 0$, tal que os polinómios $P_n(z)$ satisfazem a relação de recorrência de ordem $d + 1$*

$$\begin{cases} P_{n+1}(z) = (z - \beta_n)P_n(z) - \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{n-v}^{d-1-v} P_{n-1-v}(z), & n \geq 0 \\ P_0(z) = 1 \\ P_{-n}(z) = 0, & n = 1, \dots, d \end{cases} \quad (5.1)$$

5.1.2 Série de polinómios d -ortogonais

O resultado seguinte, fornece uma fórmula de cálculo dos coeficientes $\{f_i\}_{i \geq 0}$, do desenvolvimento em série formal de polinómios d -ortogonais, de uma dada função f . Além disso, demonstrando propriedades de projecção das somas parciais da série, permite interpretar uma série d -ortogonal, como uma generalização das séries de Fourier.

Proposição 5.1 ([14]) *Seja $f(z)$ uma função definida num certo domínio do plano complexo, e $\{P_n\}_{n \geq 0}$ uma d -OPS, defina-se formalmente*

$$f_0^* = \langle u_0, f(z)P_0(z) \rangle$$

$$f_{md+\alpha-1}^* = \frac{1}{Z_{md+\alpha-1,m}^\alpha} \left(\langle u_{\alpha-1}, f(z)P_m(z) \rangle - \sum_{i=\lceil \frac{m-\alpha}{d} \rceil}^{md+\alpha-2} f_i^* Z_{i,m}^\alpha \right), \quad m \geq 0, \alpha = 1, \dots, d$$

onde

$$Z_{n,m}^\alpha = \begin{cases} \langle u_{\alpha-1}, P_m(z)P_n(z) \rangle, & n, m \geq 0, \\ 0, & m \leq 0, \text{ ou } n \leq 0, \end{cases}, \quad \alpha = 1, \dots, d$$

e o símbolo $\lceil x \rceil$ representa o menor inteiro não inferior a x . Seja $S_n(z)$ um polinómio

$$S_n(z) = \sum_{i=0}^{n-1} f_i P_i(z)$$

e $R_n(z) = f(z) - S_n(z)$ o 'resíduo' correspondente. Então

$$1. \langle u_{\alpha-1}, R_n(z) P_m(z) \rangle = 0, \quad n \geq md + \alpha, \quad m \geq 0, \quad \alpha = 1, \dots, d \text{ sse } f_i = f_i^*, \quad i = 0, \dots, n-1$$

$$2. \langle u_{\alpha-1}, R_{md+\alpha-1}^*(z) P_m(z) \rangle = f_{md+\alpha-1}^* Z_{md+\alpha-1, m}^\alpha \neq 0 \text{ sse } f_{md+\alpha-1}^* \neq 0, \text{ com}$$

$$R_n^*(z) = f(z) - \sum_{i=0}^{n-1} f_i^* P_i(z)$$

3. Se

$$f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i P_i(z), \quad z \in \mathcal{D}_f, \quad (5.2)$$

$$\text{então } f_i = f_i^*, \quad i \geq 0$$

Antes de iniciar a demonstração, é necessário introduzir dois resultados preliminares, envolvendo as quantidades $Z_{n,m}^\alpha$. Com o primeiro desses resultados concluímos que, se os coeficientes $\{\beta_i\}_{i \geq 0}$ e $\{\gamma_{i+1}\}_{i \geq 0}$, $r = 0, \dots, d-1$ são conhecidos, as quantidades $Z_{n,m}^\alpha$ podem calcular-se por recorrência no índice das colunas, conforme a proposição seguinte.

Proposição 5.2 [14] Para $\alpha = 1, \dots, d$,

$$Z_{n,m+1}^\alpha = Z_{n+1,m}^\alpha + (\beta_n - \beta_m) Z_{n,m}^\alpha + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{n-v}^{d-1-v} Z_{n-v-1,m}^\alpha - \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{m-v}^{d-1-v} Z_{n,m-v-1}^\alpha, \quad n, m \geq 0$$

e

$$Z_{n,m}^\alpha = 0, \quad n, m = -d, \dots, -1,$$

$$Z_{n,0}^\alpha = \delta_{n,\alpha-1}, \quad n \geq 0$$

Demonstração. [14] A partir da relação de recorrência (5.1), multiplicando ambos os membros por P_m , obtemos

$$z P_n P_m = P_{n+1} P_m + \beta_n P_n P_m + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{n-v}^{d-1-v} P_{n-v-1} P_m.$$

Aplicando a mesma relação a $z P_m$

$$P_n P_{m+1} + \beta_m P_n P_m + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{m-v}^{d-1-v} P_n P_{m-v-1} = P_{n+1} P_m + \beta_n P_n P_m + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{n-v}^{d-1-v} P_{n-v-1} P_m$$

e por aplicação de $u_{\alpha-1}$ a ambos os membros, resulta

$$Z_{n,m+1}^\alpha + \beta_m Z_{n,m}^\alpha + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{m-v}^{d-1-v} Z_{n,m-v-1}^\alpha = Z_{n+1,m}^\alpha + \beta_n Z_{n,m}^\alpha + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{n-v}^{d-1-v} Z_{n-v-1,m}^\alpha, \quad n, m \geq 0$$

o que demonstra a primeira igualdade. As outras duas, resultam das condições iniciais em (5.1). ■

O segundo resultado, permite reduzir o esforço de cálculo nos elementos $Z_{n,m}^\alpha$.

Proposição 5.3 [14] Para $\alpha = 1, \dots, d$

1. $Z_{n,m}^\alpha = Z_{m,n}^\alpha$, $n, m \geq 0$
2. $Z_{md+\alpha-1,m}^\alpha \neq 0$, $m \geq 0$
3. $Z_{n,m}^\alpha = 0$, $n \geq md + \alpha$
4. $Z_{n,m}^\alpha = 0$, $n \leq \frac{m-\alpha}{d}$

Demonstração. [14] A primeira propriedade, de simetria relativamente aos índices m e n , resulta trivialmente da definição de $Z_{n,m}^\alpha$; a segunda e a terceira resultam da definição de d -ortogonalidade; para a última, utilizando 1. e 3., temos

$$Z_{n,m}^\alpha = Z_{m,n}^\alpha = 0, \quad m \geq nd + \alpha$$

■

Com o auxílio destes resultados, estamos em condições de demonstrar a proposição 5.1.

Demonstração da Proposição 5.1. [14]

1. Aplicando $u_{\alpha-1}$ a $R_n(z)P_m(z)$, temos

$$\begin{aligned} \langle u_{\alpha-1}, R_n(z)P_m(z) \rangle &= \langle u_{\alpha-1}, f(z)P_m(z) \rangle - \langle u_{\alpha-1}, S_n(z)P_m(z) \rangle \\ &= \langle u_{\alpha-1}, f(z)P_m(z) \rangle - \sum_{i=0}^{n-1} f_i \langle u_{\alpha-1}, P_i(z)P_m(z) \rangle, \end{aligned}$$

logo, $\langle u_{\alpha-1}, R_n(z)P_m(z) \rangle = 0$, $n \geq md + \alpha$ sse

$$\langle u_{\alpha-1}, f(z)P_m(z) \rangle = \sum_{i=0}^{n-1} f_i Z_{i,m}^\alpha, \quad n \geq md + \alpha$$

ou, atendendo a 3. e 4. da proposição anterior,

$$\langle u_{\alpha-1}, f(z)P_m(z) \rangle = \sum_{i=\lceil \frac{m-\alpha}{d} \rceil}^{md+\alpha-2} f_i Z_{i,m}^\alpha + f_{md+\alpha-1} Z_{md+\alpha-1,m}^\alpha, \quad m \leq \frac{n-\alpha}{d}, \quad \alpha = 1, \dots, d$$

que constitui um sistema triangular de equações lineares, regular pelo resultado 2. da proposição anterior, cuja solução é $f_i = f_i^*$, $i = 0, \dots, md + \alpha - 1$.

2. Com o mesmo processo anterior, temos que

$$\langle u_{\alpha-1}, R_{md+\alpha-1}^*(z)P_m(z) \rangle = \langle u_{\alpha-1}, f(z)P_m(z) \rangle - \sum_{i=0}^{md+\alpha-2} f_i^* Z_{i,m}^\alpha.$$

Utilizando o resultado 1. desta proposição e o resultado 2. da proposição anterior, fica demonstrado este ponto.

3. Multiplicando ambos os membros de (5.2) por $P_m(z)$, aplicando $u_{\alpha-1}$ e utilizando a proposição anterior, obtemos

$$\langle u_{\alpha-1}, f(z)P_m(z) \rangle = \sum_{i=\lceil \frac{m-\alpha}{d} \rceil}^{md+\alpha-1} f_i Z_{i,m}^\alpha, \quad m \geq 0, \alpha = 1, \dots, d$$

o que permite demonstrar, por indução sobre i , que $f_i = f_i^*$, $i \geq 0$.

■

5.1.3 Aproximação de Frobenius-Padé d -ortogonal

A definição de aproximação Frobenius-Padé, tratada nos capítulos anteriores para séries de polinômios ortogonais, pode adoptar-se para as séries de polinômios d -ortogonais. Seja f uma função dada pela sucessão dos coeficientes do seu desenvolvimento em série formal

$$f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i P_i(z) \quad (5.3)$$

onde $\{P_i\}$ constitui uma d -OPS. Para estas funções, definem-se os aproximantes racionais:

Definição 5.2 Para cada par de valores $p, q \in \mathbb{N}$, define-se o aproximante de Frobenius-Padé d -ortogonal (d -AFP) de ordem $[p/q]$ de $f(z)$, como a função racional

$${}_d[p/q]_f^P(z) = \frac{N^{[p/q]}(z)}{D^{[p/q]}(z)}$$

tal que $N(z) \in \mathcal{P}_p$, $D(z) \in \mathcal{P}_q$ e

$$D^{[p/q]}(z)f(z) - N^{[p/q]}(z) = O(P_{p+q+1}) \quad (5.4)$$

À semelhança do que se faz com a aproximação de Padé para séries de potências e com a aproximação Frobenius-Padé para séries de polinômios ortogonais, também os d -AFP para séries de polinômios d -ortogonais se podem representar numa tabela de dupla entrada, designada por tabela Frobenius-Padé d -ortogonal (d -TFP), com p a servir de índice das linhas e q a servir de índice das colunas.

Definição 5.3 A tabela Frobenius-Padé d -ortogonal diz-se normal se para cada ${}_d[p/q]_f^P$, o numerador tem grau exactamente p , o denominador tem grau exactamente q e o desenvolvimento em série do erro (5.4) tem ordem exactamente $p+q+1$. Isto é, para cada ${}_d[p/q]_f^P(z) = N^{[p/q]}(z)/D^{[p/q]}(z)$, se

$$\begin{cases} N^{[p/q]} = \sum_{i=0}^p a_i^{[p/q]} P_i, \\ D^{[p/q]} = \sum_{i=0}^q b_i^{[p/q]} P_i, \\ D^{[p/q]} f - N^{[p/q]} = \sum_{i \geq p+q+1} e_i^{[p/q]} P_i, \end{cases}$$

então $a_p^{[p/q]} \neq 0$, $b_q^{[p/q]} \neq 0$ e $e_{p+q+1}^{[p/q]} \neq 0$.

Das definições anteriores resulta que $N^{[p/q]}(z)$ e $D^{[p/q]}(z)$ definem ${}_d[p/q]_f^P(z)$ a menos de uma constante multiplicativa comum não nula, o que permite introduzir uma constante de normalização na definição. Até final deste capítulo, designa-se por d -AFP normalizado um aproximante Frobenius-Padé d -ortogonal tal que $b_q^{[p/q]} = 1$.

5.2 Cálculo dos coeficientes dos aproximantes ${}_d[p/q]_f^P(z)$

Com uma definição análoga e trabalhando com polinómios satisfazendo uma relação de recorrência de ordem $d + 1$ do mesmo tipo, é de esperar que o cálculo dos coeficientes dos aproximantes ${}_d[p/q]_f^P(z)$ possa fazer-se por processos análogos aos do cálculo dos coeficientes dos aproximantes $[p/q]_f^P(z)$.

Começando pelo estabelecimento das fórmulas que relacionam os coeficientes do desenvolvimento em série de polinómios d -ortogonais de uma dada função com os coeficientes do produto da função por um monómio; a proposição seguinte, revela um resultado que para o caso particular $d = 1$ dos polinómios ortogonais, se reduz ao resultado da proposição 2.2.

Proposição 5.4 *Seja $\{P_i\}_{i \geq 0}$ a família de polinómios d -ortogonais que satisfaz a relação de recorrência (5.1). Se, formalmente*

$$f(z) = \sum_{i \geq 0} f_i P_i(z)$$

e

$$g(z) = zf(z) = \sum_{i \geq 0} g_i P_i(z)$$

então

$$\begin{cases} g_0 = \beta_0 f_0 + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_1^{d-1-v} f_{1+v} \\ g_i = f_{i-1} + \beta_i f_i + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} f_{i+1+v}, \quad i \geq 1 \end{cases} \quad (5.5)$$

Demonstração. Substituindo em

$$g(z) = \sum_{i \geq 0} f_i z P_i(z)$$

a expressão para $zP_i(z)$ dada por (5.1), obtemos

$$g(z) = \sum_{i \geq 1} f_{i-1} P_i(z) + \sum_{i \geq 0} \beta_i f_i P_i(z) + \sum_{v=0}^{d-1} \sum_{i \geq 0} \gamma_{i+1}^{d-1-v} f_{i+1+v} P_i(z)$$

e o resultado segue igualando os coeficientes em ambos os membros da igualdade. ■

Definindo, como no capítulo 2, os coeficientes $h_{i,j}$ do desenvolvimento em série, agora de polinómios d -ortogonais, da função $P_j(z)f(z)$, i.e. tal que

$$P_j(z)f(z) = \sum_{i \geq 0} h_{i,j} P_i(z) \quad (5.6)$$

verifica-se que a condição (5.4) conduz à relação entre os coeficientes dos aproximantes

$$\sum_{i \geq 0} \left(\sum_{j=0}^q h_{i,j} b_j \right) P_i(z) - \sum_{j=0}^p a_j P_j(z) = \sum_{j \geq p+q+1} e_j P_j(z)$$

que coincide com a relação (2.3) obtida no caso dos polinómios ortogonais. Logo, o cálculo dos coeficientes dos aproximantes envolve um sistema de equações lineares

$${}_d H^{[p/q]} . b = -{}_d h^{[p/q]} \quad (5.7)$$

com

$${}_dH^{[p/q]} = \begin{bmatrix} h_{p+1,0} & \cdots & h_{p+1,q-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{p+q,0} & \cdots & h_{p+q,q-1} \end{bmatrix}, \quad {}_d h^{[p/q]} = \begin{bmatrix} h_{p+1,q} \\ \vdots \\ h_{p+q,q} \end{bmatrix}$$

e $b = (b_0, \dots, b_{q-1})^T$, análogo ao sistema (2.5), podendo aplicar-se os resultados da proposição 2.1.

O cálculo dos coeficientes $h_{i,j}$, pode fazer-se por recorrência, a partir dos coeficientes f_i da série d -ortogonal, segundo a proposição seguinte. Generalizando o resultado obtido com polinômios ortogonais, nesta proposição, com $d = 1$ recuperamos o enunciado da proposição 2.3.

Proposição 5.5 *Seja $f(z) = f_i P_i(z)$ um desenvolvimento em série formal de polinômios d -ortogonais então, para os coeficientes $h_{i,j}$ da série (5.6) obtemos:*

1. $h_{i,0} = f_i, i \geq 0$
2. $h_{i,1} = f_{i-1} + (\beta_i - \beta_0) f_i + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} f_{i+1+v}, i \geq 0$
3. $h_{i,j+1} = h_{i-1,j} + (\beta_i - \beta_j) h_{i,j} + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} h_{i+1+v,j} - \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{j-v}^{d-1-v} h_{i,j-1-v}, i, j \geq 0$

considerando nulas todas as quantidades envolvendo índices negativos.

Demonstração.

1. Resultado imediato a partir da definição de $h_{i,j}$ e de $P_0(z) = 1$
2. Utilizando a proposição anterior com $P_1(z) = z - \beta_0$
3. Partindo da proposição anterior e da definição (5.6) obtemos

$$zP_j(z)f(z) = \sum_{i \geq 0} \left(h_{i-1,j} + \beta_j h_{i,j} + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} h_{i+1+v,j} \right) P_i(z)$$

Logo, a partir da relação de recorrência (5.1)

$$\begin{aligned} P_{j+1}(z)f(z) &= zP_j(z)f(z) - \beta_j P_j(z)f(z) - \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{j-v}^{d-1-v} P_{j-1-v}(z)f(z) \\ &= \sum_{i \geq 0} \left(h_{i-1,j} + \beta_j h_{i,j} + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} h_{i+1+v,j} \right) P_i(z) - \beta_j \sum_{i \geq 0} h_{i,j} P_i(z) \\ &\quad - \sum_{i \geq 0} \left(\sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{j-v}^{d-1-v} h_{i,j-1-v} \right) P_i(z) \end{aligned}$$

a utilização da definição de $h_{i,j}$ termina a demonstração.

■

Esta relação de recorrência, envolvendo os elementos

$$\begin{array}{ccccccc} & & & & h_{i-1,j} & & \\ & & & & h_{i,j} & h_{i,j+1} & \\ h_{i,j-d} & \cdots & h_{i,j-1} & & h_{i+1,j} & & \\ & & & & \vdots & & \\ & & & & h_{i+d,j} & & \end{array}$$

revela que o cálculo dos coeficientes do aproximante ${}_d[p/q]_f^P(z)$, a partir da resolução do sistema (5.7) que envolve os valores $h_{i,j}$, $i = p+1, \dots, p+q$, $j = 0, \dots, q$, necessita dos valores f_i , $i = 0, \dots, p+(d+1)q$, (com $d = 1$, os $p+2q$ envolvidos no caso ortogonal do capítulo 2).

O algoritmo 2.2 apresentado na página 25, de cálculo recursivo dos coeficientes dos aproximantes por decomposição LU das matrizes, resulta do facto de a última coluna da matriz $H^{[p/q+1]}$ ser constituída pelo vector $h^{[p/q]}$. Uma vez que o sistema de equações lineares (5.7), envolvido no cálculo dos coeficientes do denominador dos aproximantes d -AFP, tem a mesma construção, então o mesmo algoritmo pode utilizar-se para o caso $d > 1$. A única diferença a estabelecer, conforme a observação anterior, reside no número de coeficientes f_i a considerar na rotina de cálculo dos elementos $h_{i,j}$.

Os resultados dos outros capítulos desta tese, não têm generalização tão imediata como este último.

5.3 Desvio de característica nas matrizes ${}_dH^{[p/q]}$

O objectivo desta secção consiste em estudar as condições de aplicabilidade dos resultados do capítulo 3.

Escrevendo a relação de recorrência da proposição anterior, na forma

$$h_{i,j+1} + \beta_j h_{i,j} + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{j-v}^{d-1-v} h_{i,j-1-v} = h_{i-1,j} + \beta_i h_{i,j} + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} h_{i+1+v,j} \quad (5.8)$$

fica claro que o primeiro membro representa uma operação linear nas linhas da matriz $H = {}_dH^{[p/q]}$ e o segundo membro uma operação nas colunas. Estas operações podem representar-se em notação matricial, utilizando a matriz

$$Q^{[i/n]} = \begin{bmatrix} \beta_i & \gamma_{i+1}^{d-1} & \gamma_{i+1}^{d-2} & \cdots & \gamma_{i+1}^0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \beta_{i+1} & \gamma_{i+2}^{d-1} & & \gamma_{i+2}^1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ & 1 & \beta_{i+2} & \ddots & \vdots & & \gamma_{i+n-d-1}^0 & 0 \\ & & 1 & \ddots & \gamma_{i+d}^{d-1} & & \gamma_{i+n-d}^1 & \gamma_{i+n-d}^0 \\ & & & \ddots & \beta_{i+d} & \ddots & \vdots & \gamma_{i+n-d+1}^1 \\ & & & & 1 & \ddots & \gamma_{i+n-2}^{d-1} & \vdots \\ & & & & & \ddots & \beta_{i+n-2} & \gamma_{i+n-1}^{d-1} \\ & & & & & & 1 & \beta_{i+n-1} \end{bmatrix}$$

o que permite demonstrar a proposição seguinte.

Proposição 5.6 *Sejam $R = Q^{[0/q]}$ e $F = Q^{[p+1/q]}$ então*

$$F \cdot H - H \cdot R = G \cdot B \quad (5.9)$$

com

$$G = \begin{bmatrix} -1 & 0 & \cdots & 0 & h_{p+1,q} \\ 0 & \cdots & & 0 & h_{p+2,q} \\ \vdots & & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{p+q-d,q} \\ 0 & -\gamma_{p+q-d+2}^0 & 0 & \vdots & \vdots \\ 0 & -\gamma_{p+q-d+3}^1 & -\gamma_{p+q-d+3}^0 & 0 & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & -\gamma_{p+q+1}^{d-1} & -\gamma_{p+q+1}^{d-2} & \cdots & -\gamma_{p+q+1}^0 & h_{p+q,q} \end{bmatrix}$$

e

$$B = \begin{bmatrix} h_{p,0} & \cdots & h_{p,q-2} & h_{p,q-1} \\ h_{p+q+1,0} & \cdots & h_{p+q+1,q-2} & h_{p+q+1,q-1} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ h_{p+q+d,0} & \cdots & h_{p+q+d,q-2} & h_{p+q+d,q-1} \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Demonstração. Por cálculo directo, verifica-se que

$$H \cdot R = \begin{bmatrix} l_{p+1,0} & \cdots & l_{p+1,q-2} & l_{p+1,q-1} - h_{p+1,q} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ l_{p+q,0} & \cdots & l_{p+q,q-2} & l_{p+q,q-1} - h_{p+q,q} \end{bmatrix}$$

onde $l_{i,j}$ representa o primeiro membro de (5.8), e

$$F \cdot H = \begin{bmatrix} r_{p+1,0} - h_{p,0} & \cdots & r_{p+1,q-1} - h_{p,q-1} \\ r_{p+2,0} & \cdots & r_{p+1,q-1} \\ \vdots & & \vdots \\ r_{p+q-d,0} & \cdots & r_{p+q-d,q-1} \\ r_{p+q-d+1,0} - \gamma_{p+q-d+2}^0 h_{p+q+1,0} & \cdots & r_{p+q-d+1,q-1} - \gamma_{p+q-d+2}^0 h_{p+q+1,q-1} \\ \vdots & & \vdots \\ r_{p+q-1,0} - \sum_{v=1}^{d-1} \gamma_{p+q}^{d-1-v} h_{p+q+v,0} & \cdots & r_{p+q-1,q-1} - \sum_{v=1}^{d-1} \gamma_{p+q}^{d-1-v} h_{p+q+v,q-1} \\ r_{p+q,0} - \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{p+q+1}^{d-1-v} h_{p+q+v+1,0} & \cdots & r_{p+q,q-1} - \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{p+q+1}^{d-1-v} h_{p+q+v+1,q-1} \end{bmatrix}$$

onde $r_{i,j}$ representa o segundo membro de (5.8). Logo

$$F \cdot H - H \cdot R = G \cdot B$$

como se pode verificar utilizando (5.8). ■

Sendo G e B matrizes $q \times (d+2)$ e $(d+2) \times q$ respectivamente, o resultado desta proposição pode traduzir-se pela afirmação de que, relativamente ao operador

$$\nabla_{\{F,R\}}(H) = F \cdot H - H \cdot R,$$

a matriz ${}_dH^{[p/q]}$ tem desvio de característica $d + 2$ e par gerador $\{G, B\}$. O caso particular $d = 1$ nesta proposição resulta na proposição 3.1

Verificado que a matriz $H = {}_dH^{[p/q]}$ satisfaz a equação de desvio de característica (5.9), da proposição 3.2 concluímos que o complemento de Schur de H satisfaz uma equação de desvio de característica da mesma forma e obtemos fórmulas de cálculo do operador $\nabla_{\{F,R\}}$ e do par gerador $\{G, B\}$ envolvidos nesta equação. O primeiro resultado negativo surge na tentativa de calcular as linhas e as colunas da matriz H a partir das matrizes geradoras G e B , uma vez que este operador de desvio de característica não é invertível. À semelhança do operador envolvido com os polinómios ortogonais, também só parcialmente invertível, pode verificar-se que a decomposição LU da matriz se pode fazer a partir da equação de desvio de característica e de alguma informação adicional.

No caso $d = 1$, o facto de as matrizes F e R terem apenas, respectivamente, a primeira diagonal superior e a primeira diagonal inferior não nulas, permitiu reconstruir a matriz H a partir da primeira linha e da primeira coluna, e com isso, calcular as matrizes L e U . No caso das matrizes F e R associadas aos polinómios d -ortogonais, obtemos uma situação análoga, avançando d linhas e colunas na matriz H , i.e. partindo do conhecimento das primeiras d colunas de L e das primeiras d linhas de U . O primeiro passo no processo, consiste em verificar que a proposição 3.2 permanece válida para uma partição das matrizes por blocos. Em seguida, com o escalar a_i substituído por uma matriz $d \times d$ regular A_i , verificar a validade de uma versão do corolário 3.2 para blocos. Com estes resultados e a proposição seguinte, que generaliza a proposição 3.5, pode implementar-se um algoritmo rápido de decomposição LU para as matrizes ${}_dH^{[p/q]}$.

Proposição 5.7 *Seja*

$$H = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix}, H_{11} \in \mathbb{R}^{d \times d}, \det(H_{11}) \neq 0,$$

uma partição da matriz H por blocos e sejam

$$\begin{aligned} F &= \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} \\ F_{21} & F_{22} \end{bmatrix}, e_1^T \cdot F_{12} = f e_1^T, f \neq 0 \\ R &= \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{bmatrix}, R_{21} \cdot e_1 = r e_1, r \neq 0 \\ G &= \begin{bmatrix} G_1 \\ G_2 \end{bmatrix}, B = [B_1 \quad B_2] \end{aligned}$$

partições das matrizes, tais que as operações seguintes estejam bem definidas. Então, a partir da equação de desvio de característica

$$F \cdot H - H \cdot R = G \cdot B \quad (5.10)$$

a primeira linha u^T e a primeira coluna l , do complemento de Schur $S = H_{2,2} - H_{2,1} \cdot H_{1,1}^{-1} \cdot H_{1,2}$, podem calcular-se por

$$\begin{cases} u^T &= \frac{1}{f} e_1^T \cdot (G_1 \cdot B_2 + H_{1,1} \cdot R_{1,2} + H_{1,2} \cdot R_{2,2} - F_{1,1} \cdot H_{1,2}) - l_1^T \cdot U_{1,2} \\ l &= \frac{1}{r} (-G_2 \cdot B_1 + F_{2,1} \cdot H_{1,1} + F_{2,2} \cdot H_{2,1} - H_{2,1} \cdot R_{1,1}) \cdot e_1 - L_{2,1} \cdot u_1 \end{cases}$$

onde $u_1 = U_{1,2} \cdot e_1$ e $l_1^T = e_1^T \cdot L_{2,1}$ constituem, respectivamente, a primeira coluna de $U_{1,2}$ e a primeira linha de $L_{2,1}$ nas matrizes

$$L = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ L_{21} & I \end{bmatrix}, U = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} \\ 0 & S \end{bmatrix}$$

tais que $H = L \cdot U$

Demonstração. Da equação (5.10), igualando blocos correspondentes, obtemos

$$\begin{cases} F_{1,2} \cdot H_{2,2} &= G_1 \cdot B_2 + H_{1,1} \cdot R_{1,2} + H_{1,2} \cdot R_{2,2} - F_{1,1} \cdot H_{1,2} \\ H_{2,2} \cdot R_{2,1} &= -G_2 \cdot B_1 + F_{2,1} \cdot H_{1,1} + F_{2,2} \cdot H_{2,1} - H_{2,1} \cdot R_{1,1} \end{cases}$$

equações matriciais que, com as hipóteses apresentadas sobre as matrizes $F_{1,2}$ e $R_{2,1}$, podem resolver-se em ordem à primeira linha e à primeira coluna de $H_{2,2}$. O resto da demonstração, decorre de fórmulas conhecidas para o complemento de Schur, nomeadamente, como se pode comprovar por verificação directa,

$$\begin{cases} L_{1,1} \cdot U_{1,1} &= H_{1,1} \\ L_{1,1} \cdot U_{1,2} &= H_{1,2} \\ L_{2,1} \cdot U_{1,1} &= H_{2,1} \end{cases}$$

implica que $S = H_{2,2} - L_{2,1} \cdot U_{1,2}$ [22]. A primeira coluna de $U_{1,2}$ e a primeira linha de $L_{2,1}$, fazem o resto. ■

Tal como ficou exposto no capítulo 3, o processo de factorização $H = LU$ por eliminação Gaussiana, envolve o cálculo de sucessivos complementos de Schur. Em termos de volume de aritmética, este processo é caro, conduzindo a algoritmos com complexidade $O(q^3)$ para matrizes $q \times q$. Ao substituir o cálculo dos complementos de Schur da matriz $H \in \mathbb{R}^{q \times q}$, pela factorização LU da matriz $H_{1,1} \in \mathbb{R}^{d \times d}$ e pelas fórmulas da proposição anterior, transferimos operações com vectores de q componentes para vectores de d componentes. Este facto permite obter um algoritmo rápido de decomposição LU , com $O(dq^2)$. Refira-se que, enquanto o valor de q cresce com a progressão nas colunas da tabela, o valor d é uma constante, geralmente com valor pequeno ($d = 2$, nos casos mais estudados), associada à família de polinómios.

5.4 Cálculo recursivo dos aproximantes generalizados

Tal como ficou exposto, os resultados do capítulo 4 foram no essencial, baseados na relação de recorrência característica dos polinómios ortogonais, ou mais concretamente nas fórmulas da proposição 2.2 daí resultantes. Esta observação justifica que se procure generalizar esses resultados ao caso da aproximação de Frobenius-Padé d -ortogonal, utilizando como ferramenta as fórmulas 5.5.

5.4.1 Generalização das relações tipo Frobenius

Neste capítulo pretende-se generalizar ao caso da aproximação de Frobenius-Padé em séries de polinómios d -ortogonais, algumas das relações tipo Frobenius encontradas no capítulo 4. O primeiro passo consiste em verificar em que condições é que as relações tipo Frobenius para séries em polinómios ortogonais são válidas para séries em polinómios d -ortogonais.

Como vamos trabalhar com numeradores de grau p e denominadores de grau q com coeficiente principal unitário, importa considerar como casos particulares de (5.5) os polinómios

$$\begin{cases} N^{[p/q]}(z) &= \sum_{i=0}^p a_i^{[p/q]} P_i(z), \\ D^{[p/q]}(z) &= \sum_{i=0}^{q-1} b_i^{[p/q]} P_i(z) + P_q(z), \end{cases}$$

e nestes casos obtemos

$$zN^{[p/q]}(z) = \sum_{i=0}^{p+1} g_i^{[p/q]} P_i(z), \quad (5.11)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} g_0^{[p/q]} = \beta_0 a_0^{[p/q]} + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_1^{d-1-v} a_{1+v}^{[p/q]} \\ g_i^{[p/q]} = a_{i-1}^{[p/q]} + \beta_i a_i^{[p/q]} + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} a_{i+1+v}^{[p/q]}, \quad i = 1, \dots, p-d \\ g_i^{[p/q]} = a_{i-1}^{[p/q]} + \beta_i a_i^{[p/q]} + \sum_{v=0}^{p-i-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} a_{i+1+v}^{[p/q]}, \quad i = p-d+1, \dots, p-1 \\ g_p^{[p/q]} = a_{p-1}^{[p/q]} + \beta_p a_p^{[p/q]} \\ g_{p+1}^{[p/q]} = a_p^{[p/q]} \end{array} \right.$$

e

$$zD^{[p/q]}(z) = \sum_{i=0}^q h_i^{[p/q]} P_i(z) + P_{q+1}(z), \quad (5.12)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} h_0^{[p/q]} = \beta_0 b_0^{[p/q]} + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_1^{d-1-v} b_{1+v}^{[p/q]} \\ h_i^{[p/q]} = b_{i-1}^{[p/q]} + \beta_i b_i^{[p/q]} + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} b_{i+1+v}^{[p/q]}, \quad i = 1, \dots, q-d \\ h_i^{[p/q]} = b_{i-1}^{[p/q]} + \beta_i b_i^{[p/q]} + \sum_{v=0}^{q-i-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} b_{i+1+v}^{[p/q]}, \quad i = q-d+1, \dots, q-1 \\ h_q^{[p/q]} = b_{q-1}^{[p/q]} + \beta_q \end{array} \right.$$

Uma vez que o erro associado ao aproximante $d[p/q]_f^p$ constitui uma série de ordem $p+q+1$, importa considerar como caso particular de (5.5), a série

$$D^{[p/q]}(z)f(z) - N^{[p/q]}(z) = \sum_{i \geq p+q+1} e_i^{[p/q]} P_i(z),$$

para a qual obtemos

$$z(D^{[p/q]}f - N^{[p/q]})(z) = \sum_{i \geq p+q+1-d} d_i^{[p/q]} P_i(z), \quad (5.13)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} d_{p+q+1-d}^{[p/q]} = \gamma_{p+q+2-d}^0 e_{p+q+1}^{[p/q]} \\ d_i^{[p/q]} = \sum_{v=p+q-i}^{d-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} e_{i+1+v}^{[p/q]}, \quad i = p+q, \dots, p+q+2-d \\ d_{p+q+1}^{[p/q]} = \beta_{p+q+1} e_{p+q+1}^{[p/q]} + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{p+q+2}^{d-1-v} e_{p+q+2+v}^{[p/q]} \\ d_i^{[p/q]} = e_{i-1}^{[p/q]} + \beta_i e_i^{[p/q]} + \sum_{v=0}^{d-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} e_{i+1+v}^{[p/q]}, \quad i \geq p+q+2 \end{array} \right.$$

No capítulo anterior, o processo utilizado para construir as relações de recorrência entre elementos adjacentes da tabela de Frobenius-Padé, decorre do grau dos polinómios e da ordem das séries, obtido multiplicando por z os numeradores, os denominadores e os erros dos aproximantes envolvidos. A análise das fórmulas (5.11)-(5.13), permite concluir que a dimensão d -ortogonal dos polinómios não tem qualquer influência nas fórmulas que envolvem os coeficientes dos numeradores

e dos denominadores, apenas se reflectindo no cálculo dos coeficientes envolvidos nessas fórmulas, que têm d parcelas. A diferença decisiva está nas relações entre elementos de aproximantes adjacentes obtidas impondo condições à série do erro, que no caso generalizado envolvem mais equações do que no caso dos polinómios ortogonais, uma vez que a multiplicação pelo monómio z transforma uma série de ordem n numa série de ordem $n - d$. Para obter solução para estas condições que envolvem mais equações do que no caso precedente, deve adoptar-se a estratégia de introduzir mais parâmetros fazendo intervir mais termos nas relações de recorrência.

Suponhamos que se pretende investigar a possibilidade de obter uma relação de recorrência envolvendo os elementos de $k + 1$, com k a designar, aproximantes da tabela de Frobenius-Padé d -ortogonal, isto é, designando por $S^{[p/q]}$ indistintamente o numerador $N^{[p/q]}$, o denominador $D^{[p/q]}$ e a série do erro $D^{[p/q]}f - N^{[p/q]}$ do aproximante $d^{[p/q]}_f^p$, no sentido de generalizar os resultados do capítulo 4, pretende-se encontrar relações do tipo

$$S^{[p/q]}(z) = \sum_{n=1}^k (\lambda_n + \eta_n z) S^{[p_n/q_n]}(z)$$

A determinação das $2k$ incógnitas $\lambda_n, \eta_n, n = 1, \dots, k$ terá de fazer-se à custa das condições a impor sobre os coeficientes do numerador $N^{[p/q]}$, do denominador $D^{[p/q]}$ e do erro $D^{[p/q]}f - N^{[p/q]}$ de forma que $[p/q]_f^p = N^{[p/q]}/D^{[p/q]}$ defina um d -FPA satisfazendo as condições de normalidade, isto é

$$\sum_{i=0}^p a_i^{[p/q]} P_i(z) = \sum_{n=1}^k \left[\lambda_n \sum_{i=0}^{p_n} a_i^{[p_n/q_n]} P_i(z) + \eta_n \sum_{i=0}^{p_n+1} g_i^{[p_n/q_n]} P_i(z) \right] \quad (5.14)$$

para os coeficientes dos numeradores, com $g_i^{[p_n/q_n]}, i = 0, \dots, p_n + 1$ dados por (5.11),

$$\sum_{i=0}^{q-1} b_i^{[p/q]} P_i(z) + P_q(z) = \sum_{n=1}^k \left[\lambda_n \left(\sum_{i=0}^{q_n-1} b_i^{[p_n/q_n]} P_i(z) + P_{q_n}(z) \right) + \eta_n \left(\sum_{i=0}^{q_n} h_i^{[p_n/q_n]} P_i(z) + P_{q_n+1}(z) \right) \right] \quad (5.15)$$

para os coeficientes dos denominadores, com $h_i^{[p_n/q_n]}, i = 0, \dots, q_n$ dados por (5.12) e

$$\sum_{i \geq p+q+1} e_i^{[p/q]} P_i(z) = \sum_{n=1}^k \left[\lambda_n \sum_{i \geq p_n+q_n+1} e_i^{[p_n/q_n]} P_i(z) + \eta_n \sum_{i \geq p_n+q_n+1-d} d_i^{[p_n/q_n]} P_i(z) \right] \quad (5.16)$$

para os coeficientes do erro, com $d_i^{[p_n/q_n]}, i \geq p_n + q_n + 1 - d$ dados por (5.13). Igualando coeficientes em cada uma das expressões, obtemos um sistema de equações lineares nas incógnitas $\lambda_n, \eta_n, n = 1, \dots, k$.

Estas equações foram utilizadas para construir fórmulas de recorrência que permitem calcular uma sucessão de aproximantes ou uma região da tabela de Frobenius-Padé d -ortogonal.

Progressão da esquerda para a direita na tabela de Frobenius-Padé

No capítulo 4 ficou demonstrado que, para uma tabela normal, conhecidos os coeficientes de três aproximantes consecutivos da mesma coluna, juntamente com um número suficiente de coeficientes das respectivas séries dos erros, podem calcular-se os coeficientes dos três aproximantes das mesmas linhas e da coluna seguinte juntamente com os primeiros coeficientes das suas séries dos erros. Estas

fórmulas, designadas por $\begin{matrix} \bullet & * & \bullet & \bullet \\ \bullet & & \bullet & * & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & * \end{matrix}$, podem generalizar-se ao caso dos polinómios d -ortogonais, verificando-se que com $d + 2$ aproximantes consecutivos da mesma coluna se podem calcular os $d + 2$ aproximantes das mesmas linhas e da coluna seguinte, num conjunto de fórmulas designado por $\begin{matrix} \bullet & * \\ \vdots & \vdots \\ \bullet & * \end{matrix}$.

Proposição 5.8 *Seja $\{P_i\}_{i \geq 0}$ a d -OPS definida por (5.1). Se os aproximantes $d[p + n/q]_f^p$, $n = 0, \dots, d + 1$ existem e satisfazem as condições de normalidade, então para cada valor $k = 0, \dots, d + 1$*

$$S^{[p+k/q+1]} = \sum_{n=0}^{d-1} \lambda_{k,n} S^{[p+n/q]} + (\lambda_{k,d} + z) S^{[p+d/q]} + \lambda_{k,d+1} S^{[p+d+1/q]} \quad \begin{matrix} \bullet & * \\ \vdots & \vdots \\ \bullet & * \end{matrix}$$

com

$$\begin{cases} \lambda_{k,0} = -\frac{d^{[p+d/q]}_{p+q+1}}{e^{[p/q]}_{p+q+1}} \\ \lambda_{k,i} = \frac{-1}{e^{[p+i/q]}_{p+q+i+1}} (d^{[p+d/q]}_{p+q+i+1} + \sum_{n=0}^{i-1} e^{[p+n/q]}_{p+q+i+1} \lambda_{k,n}), \quad i = 1, \dots, k \\ \lambda_{k,d+1} = -\frac{a^{[p+d/q]}_{p+d}}{d^{[p+d+1/q]}_{p+d+1}} \\ \lambda_{k,i} = -\frac{1}{d^{[p+i/q]}_{p+i}} (g^{[p+d/q]}_{p+i} + \sum_{n=i+1}^{d+1} a^{[p+n/q]}_{p+i} \lambda_{k,n}), \quad i = d, d-1, \dots, k+1 \end{cases}$$

define o aproximante $d[p + k/q + 1]_f^p$, satisfazendo as condições de normalidade.

Demonstração. Substituindo S por N , obtemos no segundo membro um polinómio de grau máximo $p + d + 1$ logo, para igualar o grau $p + k$ do primeiro membro, temos de anular os coeficientes dos termos de graus $p + k + 1, \dots, p + d + 1$. Esta condição traduz-se no sistema triangular de $d - k + 1$ equações

$$\begin{cases} a^{[p+d+1/q]}_{p+d+1} \lambda_{k,d+1} + a^{[p+d/q]}_{p+d} = 0 \\ \sum_{n=i}^{d+1} a^{[p+n/q]}_{p+i} \lambda_{k,n} + g^{[p+d/q]}_{p+i} = 0, \quad i = d, d-1, \dots, k+1 \end{cases}$$

Substituindo S por D , verificamos, com a fórmula (5.15), que a hipótese de normalidade é suficiente para garantir que o segundo membro produz um denominador de grau $q + 1$ tal que $b^{[p+k/q+1]}_{q+1} = 1, k = 0, \dots, d + 1$. Por último, substituindo S pelas séries dos erros, obtemos de (5.16),

$$\sum_{i \geq p+q+k+2} e_i^{[p+k/q+1]} = \sum_{n=0}^{d+1} \lambda_{k,n} \sum_{i \geq p+q+n+1} e_i^{[p+n/q]} + \sum_{i \geq p+q+1} d_i^{[p+d/q]}$$

que conduz ao sistema triangular, de $k + 1$ equações

$$\begin{cases} e^{[p/q]}_{p+q+1} \lambda_{k,0} + d^{[p+d/q]}_{p+q+1} = 0 \\ \sum_{n=0}^i e^{[p+n/q]}_{p+q+i+1} \lambda_{k,n} + d^{[p+d/q]}_{p+q+i+1} = 0, \quad i = 1, \dots, k \end{cases}$$

A regularidade do sistema obtido, decorre da hipótese de normalidade dos aproximantes e a verificação de que os coeficientes dados constituem a solução do sistema é directa e termina a demonstração. ■

Naturalmente, como é imediato verificar, com $d = 1$ e fazendo $k = 0, 1, 2$ obtemos as três

fórmulas já referidas $\bullet \cdot \bullet \cdot \bullet$, $\bullet \cdot \bullet \cdot \bullet$ e $\bullet \cdot \bullet \cdot \bullet$. Com $d = 2$ obtemos as quatro fórmulas

$$S^{[p+k/q+1]} = \lambda_{k,0}S^{[p/q]} + \lambda_{k,1}S^{[p+1/q]} + (\lambda_{k,2} + z)S^{[p+2/q]} + \lambda_{k,3}S^{[p+3/q]}, \quad k = 0, \dots, 3$$

que com $k = 0$ resulta em

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{0,0} = -\frac{d_{p+q+1}^{[p+2/q]}}{e_{p+q+1}^{[p/q]}} \\ \lambda_{0,3} = -\frac{a_{p+2}^{[p+2/q]}}{a_{p+3}^{[p+3/q]}} \\ \lambda_{0,2} = \frac{-1}{a_{p+2}^{[p+2/q]}} (g_{p+2}^{[p+2/q]} + a_{p+2}^{[p+3/q]}\lambda_{0,3}) \\ \lambda_{0,1} = \frac{-1}{a_{p+1}^{[p+1/q]}} (g_{p+1}^{[p+2/q]} + a_{p+1}^{[p+2/q]}\lambda_{0,2} + a_{p+1}^{[p+3/q]}\lambda_{0,3}) \end{array} \right. \quad \bullet \cdot \bullet \cdot \bullet$$

com $k = 1$

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{1,0} = \lambda_{0,0} \\ \lambda_{1,1} = \frac{-1}{e_{p+q+2}^{[p+1/q]}} (d_{p+q+2}^{[p+2/q]} + e_{p+q+2}^{[p/q]}\lambda_{1,0}) \\ \lambda_{1,3} = \lambda_{0,3}, \quad \lambda_{1,2} = \lambda_{0,2} \end{array} \right. \quad \bullet \cdot \bullet \cdot \bullet$$

com $k = 2$

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{2,0} = \lambda_{0,0}, \quad \lambda_{2,1} = \lambda_{1,1} \\ \lambda_{2,2} = \frac{-1}{e_{p+q+3}^{[p+2/q]}} (d_{p+q+3}^{[p+2/q]} + e_{p+q+3}^{[p/q]}\lambda_{2,0} + e_{p+q+3}^{[p+1/q]}\lambda_{2,1}) \\ \lambda_{2,3} = \lambda_{0,3} \end{array} \right. \quad \bullet \cdot \bullet \cdot \bullet$$

e com $k = 3$

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{3,0} = \lambda_{0,0}, \quad \lambda_{3,1} = \lambda_{1,1}, \quad \lambda_{3,2} = \lambda_{2,2} \\ \lambda_{3,3} = \frac{-1}{e_{p+q+4}^{[p+3/q]}} (d_{p+q+4}^{[p+2/q]} + \sum_{n=0}^2 e_{p+q+4}^{[p+n/q]}\lambda_{3,n}) \end{array} \right. \quad \bullet \cdot \bullet \cdot \bullet$$

Fórmulas estas que permitem calcular os coeficientes dos aproximantes \bullet , desde que os aproximantes \bullet sejam conhecidos juntamente com um número suficientes de coeficientes do erro $e_i^{[p+n/q]}$.

Também a fórmula $\bullet \cdot \bullet \cdot \bullet$ obtida no capítulo 4, estabelecendo uma relação de recorrência entre AFP em séries de polinómios ortogonais, se pode generalizar para séries de polinómios d -ortogonais, como se verifica na proposição seguinte.

Proposição 5.9 *Seja $\{P_i\}_{i \geq 0}$ a d -OPS definida por (5.1). Se os aproximantes $d[p/q - n]_f^p$, $n = 0, \dots, d + 1$ existem e satisfazem as condições de normalidade, então*

$$S^{[p/q+1]} = (\lambda_0 + z)S^{[p/q]} + (\lambda_1 + \eta z)S^{[p/q-1]} + \sum_{n=2}^{d+1} \lambda_n S^{[p/q-n]} \quad \bullet \cdots_d \bullet \cdot \bullet$$

com

$$\begin{cases} \eta = -\frac{d_p^{[p/q]}}{d_p^{[p/q-1]}} \\ \lambda_{d+1} = -\gamma_{p+q+1-d}^0 \frac{e^{[p/q-1]}}{e^{[p/q-d-1]}} \eta \\ \lambda_n = -\frac{1}{e_{p+q+1-n}^{[p/q-n]}} \left(\sum_{i=n+1}^{d+1} \lambda_i e^{[p/q-i]} + d_{p+q+1-n}^{[p/q]} + \eta d_{p+q+1-n}^{[p/q-1]} \right), \quad n = d, \dots, 0 \end{cases}$$

define o aproximante $d[p/q+1]_f^P$, satisfazendo as condições de normalidade.

A demonstração, desta e das proposições seguintes, resulta das condições (5.14)-(5.16), e por ser semelhante à demonstração da proposição anterior, não se apresenta.

Progressão descendente na tabela de Frobenius-Padé

Também as fórmulas de progressão no sentido descendente da tabela de Frobenius-Padé, se podem generalizar para séries de polinómios d-ortogonais. A proposição seguinte generaliza a proposição (4.9) e, tal como no caso particular $d = 1$, a possibilidade de progressão na tabela está condicionada por uma quantidade discriminante Δ , que depende dos valores dos coeficientes dos aproximantes envolvidos, como se explicita a seguir.

Proposição 5.10 *Seja $\{P_i\}_{i \geq 0}$ a d-OPS definida por (5.1) e sejam $p \geq d+1$ e $q \geq 0$ tais que os aproximantes $d[p-n/q]_f^P$, $n = 0, \dots, d+1$ existem e satisfazem as condições de normalidade. Definindo*

$$S^{[p+1/q]} = (\lambda_0 + z)S^{[p/q]} + (\lambda_1 - z)S^{[p-1/q]} + \sum_{n=2}^{d+1} \lambda_n S^{[p-n/q]} \quad \begin{matrix} \bullet \\ \vdots \\ d \\ \bullet \\ * \end{matrix}$$

com

$$\begin{cases} \lambda_{d+1} = \frac{d_{p+q-d}^{[p-1/q]}}{e_{p+q-d}^{[p-d-1/q]}} \\ \lambda_n = \frac{1}{e_{p+q+1-n}^{[p-n/q]}} \left(d_{p+q+1-n}^{[p-1/q]} - d_{p+q+1-n}^{[p/q]} - \sum_{i=n+1}^{d+1} e_{p+q+1-n}^{[p-i/q]} \lambda_i \right), \quad n = d, d-1, \dots, 0 \end{cases}$$

e

$$\Delta = \sum_{n=0}^{d+1} \lambda_n + b_{q-1}^{[p/q]} - b_{q-1}^{[p-1/q]}.$$

Se $\Delta \neq 0$, então

$$\frac{N^{[p+1/q]}}{D^{[p+1/q]}} = d[p+1/q]_f^P$$

define o d-AFP tal que $b_q^{[p+1/q]} = \Delta$. Caso contrário, a tabela d-TFP é não normal, sendo

$$\frac{N^{[p+1/q]}}{D^{[p+1/q]}} = O(P_{p+q+2})$$

com $\partial(N^{[p+1/q]}) = p+1$ e $\partial(D^{[p+1/q]}) \leq q-1$.

Fórmulas de progressão nas diagonais da tabela

As proposições seguintes, generalizando as fórmulas $\begin{matrix} \bullet \\ \bullet \\ * \end{matrix}$ obtidas no caso dos polinómios ortogonais, permitem calcular os coeficientes de uma sucessão de aproximantes ocupando duas diagonais adjacentes da tabela d -TFP.

Proposição 5.11 *Seja $\{P_i\}_{i \geq 0}$ a d -OPS definida por (5.1) e*

$$k = \lfloor \frac{d+1}{2} \rfloor$$

onde o símbolo $\lfloor x \rfloor$ representa a parte inteira do número real x . Se os aproximantes $d[p-n/q-n]_f^P$ e $d[p+1-n/q-n]_f^P$, $n = 0, \dots, k$, existem e satisfazem as condições de normalidade, então

$$S^{[p+1/q+1]} = (\lambda_0 + z)S^{[p/q]} + \sum_{n=0}^k \eta_n S^{[p+1-n/q-n]} + \sum_{n=1}^k \lambda_n S^{[p-n/q-n]}$$

com

$$\begin{cases} \lambda_k = -\frac{d^{[p/q]}_{p+q+1-d}}{e^{p+q+1-2k}_{p-k/q-k}} \\ \eta_k = \frac{-1}{e^{p+q+2-2k}_{p+1-k/q-k}} (d^{[p/q]}_{p+q+2-d} + e^{[p-k/q-k]} \lambda_k) \\ \left\{ \begin{array}{l} \lambda_n = \frac{-1}{e^{p+q+1-2n}_{p-n/q-n}} (d^{[p/q]}_{p+q+1-2n} + \sum_{i=n+1}^k (e^{[p-i/q-i]} \lambda_i + e^{[p+1-i/q-i]} \eta_i)) \\ \eta_n = \frac{-1}{e^{p+q+2-2n}_{p+1-n/q-n}} (d^{[p/q]}_{p+q+2-2n} + \sum_{i=n}^k e^{[p-i/q-i]} \lambda_i + \sum_{i=n+1}^k e^{[p+1-i/q-i]} \eta_i) \end{array} \right. , n = k-1, \dots, 0 \end{cases}$$

se d é par e

$$\begin{cases} \lambda_k = 0 \\ \eta_k = -\frac{d^{[p/q]}_{p+q+1-d}}{e^{p+q+2-2k}_{p+1-k/q-k}} \\ \left\{ \begin{array}{l} \lambda_n = \frac{-1}{e^{p+q+1-2n}_{p-n/q-n}} (d^{[p/q]}_{p+q+1-2n} + \sum_{i=n+1}^{k-1} e^{[p-i/q-i]} \lambda_i + \sum_{i=n+1}^k e^{[p+1-i/q-i]} \eta_i) \\ \eta_n = \frac{-1}{e^{p+q+2-2n}_{p+1-n/q-n}} (d^{[p/q]}_{p+q+2-2n} + \sum_{i=n}^{k-1} e^{[p-i/q-i]} \lambda_i + \sum_{i=n+1}^k e^{[p+1-i/q-i]} \eta_i) \end{array} \right. , n = k-1, \dots, 0 \end{cases}$$

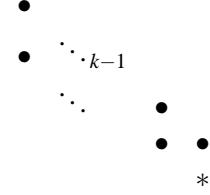
se d é ímpar, define o aproximante $d[p+1/q+1]_f^P$, satisfazendo as condições de normalidade.

Proposição 5.12 *Seja $\{P_i\}_{i \geq 0}$ a d -OPS definida por (5.1) e*

$$k = \lceil \frac{d-1}{2} \rceil$$

onde o símbolo $[x]$ representa o menor inteiro não inferior a x . Sejam $p, q \geq k$ tais que os aproximantes $d[p-n/q-n]_f^P$, $n = -1, \dots, k$, e $d[p+1-n/q-n]_f^P$, $n = 0, \dots, k$, existem e satisfazem as condições de normalidade. Definindo

$$S^{[p+2/q+1]} = (\eta_0 + z)S^{[p+1/q]} + \sum_{n=-1}^k \lambda_n S^{[p-n/q-n]} + \sum_{n=1}^k \eta_n S^{[p+1-n/q-n]}$$



com

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_k = -\frac{d^{[p+1/q]}}{e^{[p+q+2-d]}} \\ \eta_k = \frac{-1}{e^{[p+q+3-d]}} (d^{[p+1/q]} + e^{[p-k/q-k]} \lambda_k) \\ \left\{ \begin{array}{l} \lambda_n = \frac{-1}{e^{[p-n/q-n]}} (d^{[p+1/q]} + \sum_{i=n+1}^k (e^{[p-i/q-i]} \lambda_i + e^{[p+1-i/q-i]} \eta_i)) \\ \eta_n = \frac{-1}{e^{[p+q+2-2n]}} (d^{[p+1/q]} + \sum_{i=n}^k e^{[p-i/q-i]} \lambda_i + \sum_{i=n+1}^k e^{[p+1-i/q-i]} \eta_i) \end{array} \right. , \quad n = k-1, \dots, 0 \\ \lambda_{-1} = \frac{-1}{e^{[p+q+3]}} (d^{[p+1/q]} + \sum_{i=0}^k (e^{[p-i/q-i]} \lambda_i + e^{[p+1-i/q-i]} \eta_i)) \end{array} \right.$$

se d é ímpar e

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_k = 0 \\ \eta_k = -\frac{d^{[p+1/q]}}{e^{[p+q+2-d]}} \\ \left\{ \begin{array}{l} \lambda_n = \frac{-1}{e^{[p-n/q-n]}} (d^{[p+1/q]} + \sum_{i=n+1}^{k-1} e^{[p-i/q-i]} \lambda_i + \sum_{i=n+1}^k e^{[p+1-i/q-i]} \eta_i) \\ \eta_n = \frac{-1}{e^{[p+q+2-2n]}} (d^{[p+1/q]} + \sum_{i=n}^{k-1} e^{[p-i/q-i]} \lambda_i + \sum_{i=n+1}^k e^{[p+1-i/q-i]} \eta_i) \end{array} \right. , \quad n = k-1, \dots, 0 \\ \lambda_{-1} = \frac{-1}{e^{[p+q+3]}} (d^{[p+1/q]} + \sum_{i=0}^{k-1} e^{[p-i/q-i]} \lambda_i + \sum_{i=0}^k e^{[p+1-i/q-i]} \eta_i) \end{array} \right.$$

se d é par, e

$$\Delta = \lambda_{-1} + 1$$

Se $\Delta \neq 0$, então

$$d[p+2/q+1]_f^P = \frac{N^{[p+2/q+1]}}{D^{[p+2/q+1]}}$$

define o d -AFP, tal que $b_{q+1}^{[p+2/q+1]} = \Delta$. Caso contrário, a tabela d -TFP é não normal, sendo $\partial(N^{[p+2/q+1]}) = p+2$, $\partial(D^{[p+2/q+1]}) \leq q$ e $D^{[p+2/q+1]} f - N^{[p+2/q+1]} = O(P_{p+q+4})$.

Naturalmente, como se pode verificar, o caso $d = 1$ resulta nas fórmulas obtidas no capítulo 4. Para ilustrar o resultado destas duas proposições com fórmulas novas, concretizou-se o caso particular $d = 2$.

Polinômios 2-ortogonais Sendo $\{P_i\}_{i \geq 0}$ uma 2-OPS então a relação de recorrência resultante de (5.1) é

$$\begin{aligned} P_{i+1}(z) &= (z - \beta_i)P_i(z) - \gamma_i^1 P_{i-1}(z) - \gamma_{i-1}^0 P_{i-2}(z), \quad i \geq 0 \\ P_0(z) &= 1, \\ P_{-2}(z) &= P_{-1}(z) = 0. \end{aligned}$$

e $\gamma_i^0 \neq 0$, $i \geq 0$. As fórmulas de recorrência obtidas reduzem-se a

$$S^{[p+1/q+1]} = (\lambda_{1,0} + z)S^{[p/q]} + \eta_{1,0}S^{[p+1/q]} + \eta_{1,1}S^{[p/q-1]} + \lambda_{1,1}S^{[p-1/q-1]} \quad \begin{array}{c} \bullet \\ \bullet \bullet \\ \bullet * \end{array}$$

com

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{1,1} = -\frac{d_{p+q-1}^{[p/q]}}{e_{p+q-1}^{[p-1/q-1]}} \\ \eta_{1,1} = \frac{-1}{e_{p+q}^{[p/q-1]}} (d_{p+q}^{[p/q]} + e_{p+q}^{[p-1/q-1]} \lambda_{1,1}) \\ \lambda_{1,0} = \frac{-1}{e_{p+q+1}^{[p/q]}} (d_{p+q+1}^{[p/q]} + e_{p+q+1}^{[p-1/q-1]} \lambda_{1,1} + e_{p+q+1}^{[p/q-1]} \eta_{1,1}) \\ \eta_{1,0} = \frac{-1}{e_{p+q+2}^{[p+1/q]}} (d_{p+q+2}^{[p/q]} + e_{p+q+2}^{[p/q]} \lambda_{1,0} + e_{p+q+2}^{[p-1/q-1]} \lambda_{1,1} + e_{p+q+2}^{[p/q-1]} \eta_{1,1}) \end{array} \right.$$

e

$$S^{[p+2/q+1]} = (\eta_{2,0} + z)S^{[p+1/q]} + \lambda_{2,-1}S^{[p+1/q+1]} + \lambda_{2,0}S^{[p/q]} + \eta_{2,1}S^{[p/q-1]} \quad \begin{array}{c} \bullet \bullet \\ \bullet \bullet \\ * \end{array}$$

com

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta_{2,1} = -\frac{d_{p+q}^{[p+1/q]}}{e_{p+q}^{[p/q-1]}} \\ \lambda_{2,0} = \frac{-1}{e_{p+q+1}^{[p/q]}} (d_{p+q+1}^{[p+1/q]} + e_{p+q+1}^{[p/q-1]} \eta_{2,1}) \\ \eta_{2,0} = \frac{-1}{e_{p+q+2}^{[p+1/q]}} (d_{p+q+2}^{[p+1/q]} + e_{p+q+2}^{[p/q]} \lambda_{2,0} + e_{p+q+2}^{[p/q-1]} \eta_{2,1}) \\ \lambda_{2,-1} = \frac{-1}{e_{p+q+3}^{[p+1/q+1]}} (d_{p+q+3}^{[p+1/q]} + e_{p+q+3}^{[p/q]} \lambda_{2,1} + e_{p+q+3}^{[p+1/q]} \eta_{2,0} + e_{p+q+3}^{[p/q-1]} \eta_{2,1}) \end{array} \right.$$

Com estas duas fórmulas, e com as relações de recorrência para os coeficientes dos aproximantes que permitem obter, pode implementar-se um algoritmo para calcular uma sucessão de elementos pertencentes a duas diagonais adjacentes da tabela $\left\{ {}_2[p+i/q+i]_f^p, {}_2[p+1+i/q+i]_f^p \right\}_{i=0}^J$, para algum $J > 0$ dado. Tomando $q = 0$, as inicializações deste algoritmo consistem dos aproximantes ${}_2[p/0]_f^p$, ${}_2[p+1/0]_f^p$ que constituem somas parciais da série, e os aproximantes ${}_2[p+1/1]_f^p$, ${}_2[p+2/1]_f^p$, que podem calcular-se utilizando as fórmulas da página 5.7.

Atendendo ao conjunto de coeficientes $e_i^{[p/q]}$ da série do erro de cada aproximante que é necessário calcular para se poder progredir no algoritmo, verifica-se que em cada coluna são necessários mais quatro coeficientes do que na coluna precedente. Na tabela 5.1 representa-se o conjunto de coeficientes $e_i^{[p/q]}$ que é necessário calcular em cada passo para poder alcançar o cálculo do aproximante ${}_2[p+1+J/q+J]_f^p$ com estas fórmulas. O símbolo $\boxed{\begin{array}{c} i/j \\ k \dots l \end{array}}$ significa que os

	$q+i$	\dots	$q+J-1$	$q+J$
$p+i$	$\frac{i/i}{2i+1 \dots 4J+1-2i}$			
$p+i+1$	$\frac{i+1/i}{2i+2 \dots 4J+1-2i}$			
\vdots		\ddots		
$p+J-1$			$\frac{J-1/J-1}{2J-1 \dots 2J+3}$	
$p+J$			$\frac{J/J-1}{2J \dots 2J+3}$	$\frac{J/J}{2J+1}$
$p+J+1$				$J+1/J$

Tabela 5.1: Conjunto de coeficientes $e_{p+q+n}^{[p+i/q+j]}$, $n = k, \dots, l$ a calcular

coeficientes do aproximante ${}_2[p+i/q+j]_f^p$ devem calcular-se juntamente com os coeficientes do erro $e_{p+q+n}^{[p+i/q+j]}$, $n = k, \dots, l$.

Uma conclusão dos valores desta tabela é que, se se pretende preparar um algoritmo para calcular uma sucessão de aproximantes a partir de aproximantes da primeira coluna da tabela, isto é tomando $q=0$ para calcular a sucessão $\left\{ {}_2[p+i/i]_f^p, {}_2[p+1+i/i]_f^p \right\}_{i=0}^J$, é necessário conhecer os coeficientes da série até à ordem $p+4J+1$. Este valor é coincidente com o número de coeficientes da série necessários para calcular o último destes aproximantes ${}_2[p+J+1/J]_f^p$, utilizando o processo de resolução do sistema de equações associado aos denominadores, conforme o resultado apresentado na página 113.

Um algoritmo baseado nestas fórmulas foi programado e testado com exemplos numéricos. Os resultados apresentam-se na secção seguinte.

5.4.2 Exemplos

Para testar os algoritmos, à semelhança dos capítulos precedentes, procuraram-se exemplos satisfazendo dois requisitos: os coeficientes da série podem calcular-se, pelo menos teoricamente, até uma ordem tão longe quanto se queira, com a mesma precisão de cálculo da máquina; a função é descrita por uma fórmula analítica exacta, permitindo calcular o seu valor, pelo menos teoricamente, em cada ponto do intervalo de aproximação, com a mesma precisão de cálculo da máquina. O primeiro destes requisitos, permite calcular as sucessões de aproximantes sem restrições sobre os graus dos numeradores e dos denominadores e, sobretudo, isolar os erros nos cálculos dos erros nos dados. O segundo requisito prende-se com a necessidade de analisar o algoritmo comparando os resultados, tanto quanto possível, com os valores exactos da função.

Na literatura sobre polinómios d -ortogonais, não se tratam problemas de aproximação nem se invocam séries d -ortogonais. Essa abordagem é apresentada nesta tese pela primeira vez.

Polinômios 2-ortogonais de tipo Jacobi Seja $\{P_n\}_{n \geq 0}$ uma família de polinômios definida pela relação de recorrência de ordem três

$$\begin{cases} P_{n+3}(z) = zP_{n+2}(z) - \alpha \frac{(n+2)(n+2\nu+1)}{(n+\nu+1)(n+\nu+2)} P_{n+1}(z) - \gamma \frac{(n+1)(n+2)(n+3\nu)}{(n+\nu)(n+\nu+1)(n+\nu+2)} P_n(z), n \geq 0, \\ P_0(z) = 1, \quad P_1(z) = z, \quad P_2(z) = z^2 - \frac{2\alpha}{\nu+1}. \end{cases}$$

É sabido que [33] estes polinômios satisfazem algumas propriedades relacionadas com a classe de polinômios de Jacobi e, para esta família de polinômios 2-ortogonais, é conhecida uma função geradora

$$G_\nu(z, t) = (1 - zt + \alpha t^2 + \gamma t^3)^{-\nu} = \sum_{n \geq 0} \frac{\Gamma(n+\nu)}{\Gamma(\nu)} P_n(z) \frac{t^n}{n!}, \nu \notin -\mathbb{N}.$$

Fixando valores de t , ν , α e γ , obtemos

$$f(z) = \sum_{n \geq 0} f_n P_n(z)$$

com

$$f_n = \frac{t^n \nu(\nu+1) \cdots (\nu+n-1)}{n!}, n \geq 0$$

uma vez que $\Gamma(n+\nu) = \nu(\nu+1) \cdots (\nu+n-1)\Gamma(\nu)$ [24], ou

$$\begin{cases} f_0 = 1 \\ f_n = \frac{(\nu+n-1)t}{n} f_{n-1}, \quad n \geq 1 \end{cases}$$

Para o caso particular $\nu = \frac{1}{2}$, $\alpha = 0$, estes polinômios são referidos como associados ao nome de Pincherle e considerados como uma generalização dos polinômios de Legendre e de Gegenbauer [17]. Neste caso a função geradora e a relação de recorrência dos coeficientes da série, são respectivamente

$$G(z, t) = \frac{1}{\sqrt{1 - zt + \gamma t^3}} = \sum_{n \geq 0} f_n P_n(z),$$

com

$$\begin{cases} f_0 = 1 \\ f_n = \frac{(2n-1)t}{2n} f_{n-1}, \quad n \geq 1 \end{cases}$$

O algoritmo foi testado com a mesma função

$$f(z) \equiv \frac{5}{\sqrt{41 - 40z}} = 1 + P_1(z) + \frac{4}{5}P_2(z) + \frac{24}{25}P_3(z) + \frac{32}{25}P_4(z) + \cdots$$

utilizada no exemplo 4.3 para testar o algoritmo de cálculo das diagonais da tabela no caso $d = 1$. Esta função corresponde aos valores $\gamma = 5/32$ e $t = 8/5$, para os quais

$$\begin{cases} P_0 = 1, \quad P_1 = z, \quad P_2 = z^2, \\ P_n = zP_{n-1} - \frac{5(n-1)(n-2)}{8(2n-1)(2n-5)} P_{n-3}, \quad n \geq 3 \end{cases}$$

Na figura 5.1 apresentam-se as curvas do erro relativo $|(f(z) - {}_2[p/q]_f^p(z))/f(z)|$, em escala logarítmica, na aproximação da função com elementos das sucessões $\left\{ {}_2[p+q/q]_f^p, {}_2[p+1+q/q]_f^p \right\}_{q \geq 0}$, com $p = 0$ e com $p = 5$. Os resultados revelam que as sucessões de aproximantes calculados com este algoritmo, exibem o mesmo comportamento descrito com os aproximantes da figura 4.6. Nas duas

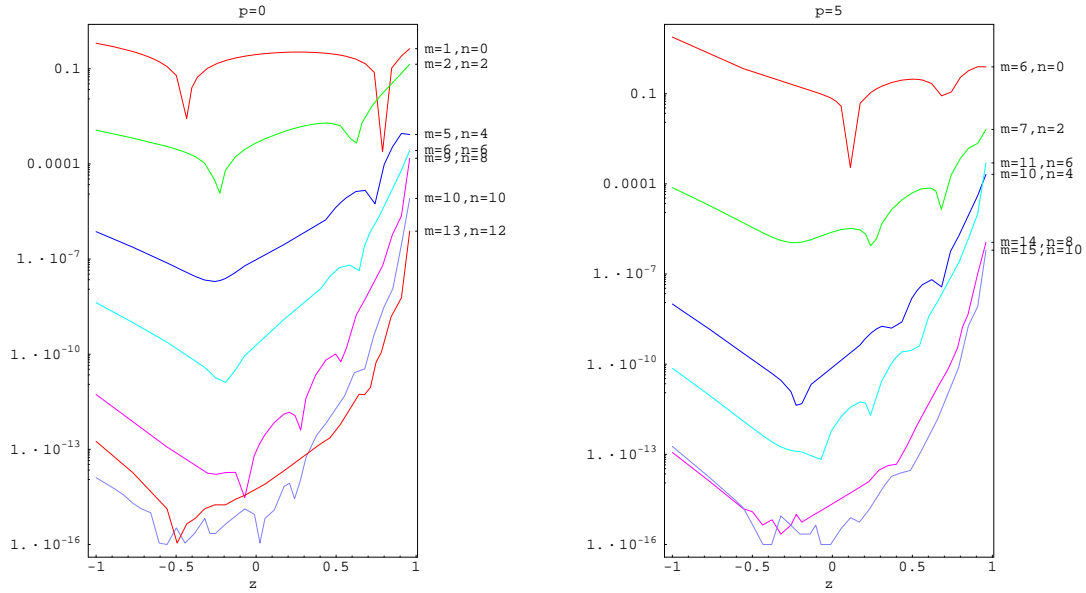


Figura 5.1: Erro relativo $|(f(z) - 2[m/n]_f^P(z))/f(z)|$, com os valores m e n indicados ao lado das curvas, na aproximação da função $f(z) = 1/\sqrt{1.64 - 1.6z}$ com elementos da sucessão $\{2[q/q]_f^P, 2[q+1/q]_f^P\}_{q \geq 0}$.

figuras, observa-se que as curvas do erro vão alcançando valores sucessivamente menores à medida que q aumenta. No caso dos aproximantes 2-ortogonais, a perturbação dos resultados provocada pela propagação dos erros, só se torna aparente cerca da coluna 10, i.e. com 20 aproximantes calculados.

Na figura 5.2 comparam-se, em termos do erro relativo, alguns dos 2-AFP calculados com este algoritmo com os AFP, para a mesma função, calculados com o algoritmo correspondente do capítulo anterior. Nos resultados obtidos, com este exemplo, podemos observar sistematicamente que, quando comparados aproximantes com os mesmos graus de numerador e de denominador, i.e. aproximantes com a mesma ordem de aproximação, os erros não diferem muito em ordem de grandeza. Globalmente, podemos observar que os AFP são melhores, na generalidade dos pontos, para graus pequenos e que com o aumento dos graus, a situação inverte-se. Deve destacar-se desta comparação, que o cálculo dos coeficientes do aproximante $[p/q]_f^P(z)$ necessita dos primeiros $p+q+1$ coeficientes da série de $f(z)$, enquanto que para o cálculo dos coeficientes do aproximante $2[p/q]_f^P(z)$ são necessários os primeiros $p+2q+1$ coeficientes da série.

Polinómios 2-ortogonais de tipo Laguerre Define-se esta família de polinómios pela relação de recorrência de ordem 3 [16]

$$\begin{cases} P_{n+3}^{(v)}(z) = (z - \beta_{n+2})P_{n+2}^{(v)}(z) - \gamma_{n+2}^1 P_{n+1}^{(v)}(z) - \gamma_{n+1}^0 P_n^{(v)}(z), & n \geq 0, \\ P_0^{(v)}(z) = 1, & P_1^{(v)}(z) = z - \beta_0, & P_2^{(v)}(z) = (z - \beta_1)P_1^{(v)}(z) - \gamma_1^1. \end{cases} \quad (5.17)$$

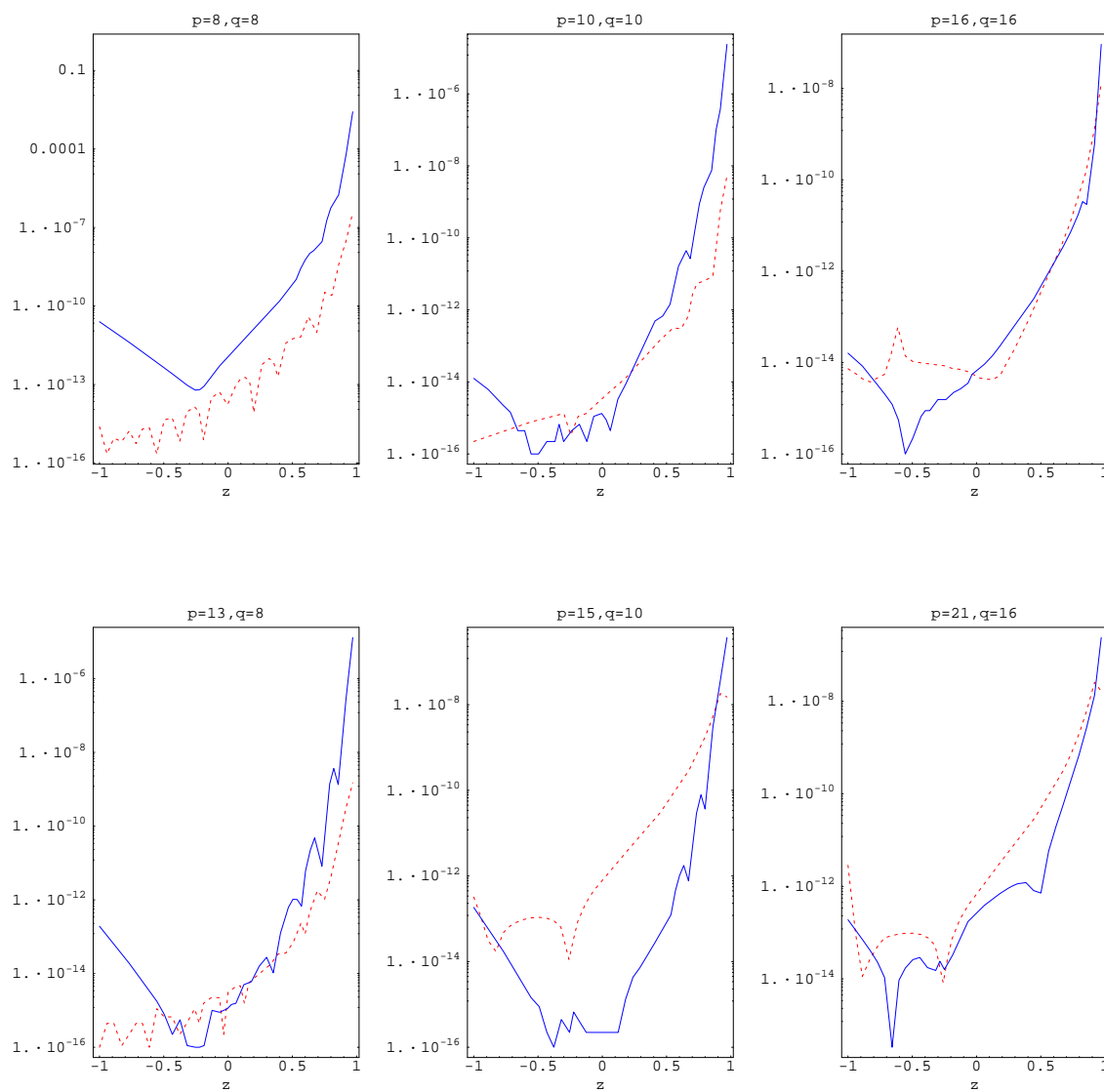


Figura 5.2: $|(f(z) - {}_2[p/q]_f^P(z))/f(z)|$ (a cheio) e $|(f(z) - [p/q]_f^P(z))/f(z)|$ (tracejado), com $f(z) = 1/\sqrt{1.64 - 1.6z}$.

com

$$\begin{cases} \beta_n = \nu + 2 + 2n, & n \geq 0 \\ \gamma_n^1 = n(n + \nu + 2), & n \geq 1 \\ \gamma_n^0 = n(n + 1), & n \geq 1 \end{cases} \quad (5.18)$$

Em [16], obteve-se a representação integral das funcionais lineares relativamente às quais estes polinómios são 2-ortogonais, i.e. mostra-se que esta família de polinómios é 2-ortogonal relativamente às funcionais lineares

$$\langle u_0, f(z) \rangle = \int_0^\infty \mathcal{W}_0(x) f(x) dx$$

$$\langle u_1, f(z) \rangle = \int_0^\infty \mathcal{W}_1(x) f(x) dx$$

com as funções peso \mathcal{W}_0 e \mathcal{W}_1 dadas por

$$\mathcal{W}_0(x) = x^{\nu/2} e^{-x-1} I_\nu(2\sqrt{x})$$

onde $I_\nu(z)$ representa a função de Bessel modificada de primeira espécie, definida por

$$I_\nu(z) = \sum_{k \geq 0} \frac{(z/2)^{\nu+2k}}{k! \Gamma(k + \nu + 1)}, \quad |z| < \infty, \quad |\arg z| < \pi$$

e

$$\mathcal{W}_1(x) = x \mathcal{W}_0'(x) + (x - \nu - 1) \mathcal{W}_0(x) = x^{(\nu+1)/2} e^{-x-1} I_{\nu+1}(2\sqrt{x}) - \mathcal{W}_0(x)$$

Para esta família de polinómios, conhece-se a função geradora [16]

$$G(x, t) = e^{-t} (1+t)^{-(\nu+1)} e^{\frac{xt}{1+t}} = \sum_{n \geq 0} P_n^{(\nu)}(x) \frac{t^n}{n!},$$

O programa foi testado com diferentes valores dos parâmetros ν e t . Nos casos observados, as sucessões de aproximantes calculadas revelaram possuir boas qualidades de aproximação, nomeadamente a capacidade de aproximar a função num intervalo de valores com um erro máximo consideravelmente pequeno, para valores de $t \in]-1, 0[$ e com todos os valores reais testados para ν . Em todas as experiências feitas com valores $t \notin]-1, 0[$, as funções racionais calculadas não produzem qualquer aproximação para a função dada. Os resultados obtidos ilustram-se com os valores $\nu = 0$ e $t = -1/2$, para os quais a função a aproximar é

$$f(z) = 2e^{\frac{1}{2}-z} = P_0(z) - \frac{1}{2}P_1(z) + \frac{1}{8}P_2(z) - \frac{1}{48}P_3(z) + \dots$$

Na figura 5.3 apresentam-se as curvas do erro relativo $|(f(z) - {}_2[p/q]_f^P(z))/f(z)|$ na aproximação da função por elementos das sucessões $\left\{ {}_2[p+q/q]_f^P, {}_2[p+1+q/q]_f^P \right\}_{q \geq 0}$, com $p = 0$ e com $p = 5$. Nestes gráficos, podemos observar uma diminuição dos erros relativos máximos, ao longo das duas sucessões diagonais calculadas. A instabilidade numérica, neste exemplo só se faz notar a partir da coluna $q = 20$, quando os resultados de aproximação atingem os mesmos 16 algarismos exactos da precisão de cálculo dos coeficientes.

Na tabela 5.2 representa-se na posição (p/q) , o número de algarismos significativos exactos na aproximação ${}_2[p/q]_f^P(z)$, para os valores $z = 1$ e $z = 10$, com os aproximantes das sucessões diagonais calculadas, juntamente com o número de algarismos significativos exactos na aproximação das somas

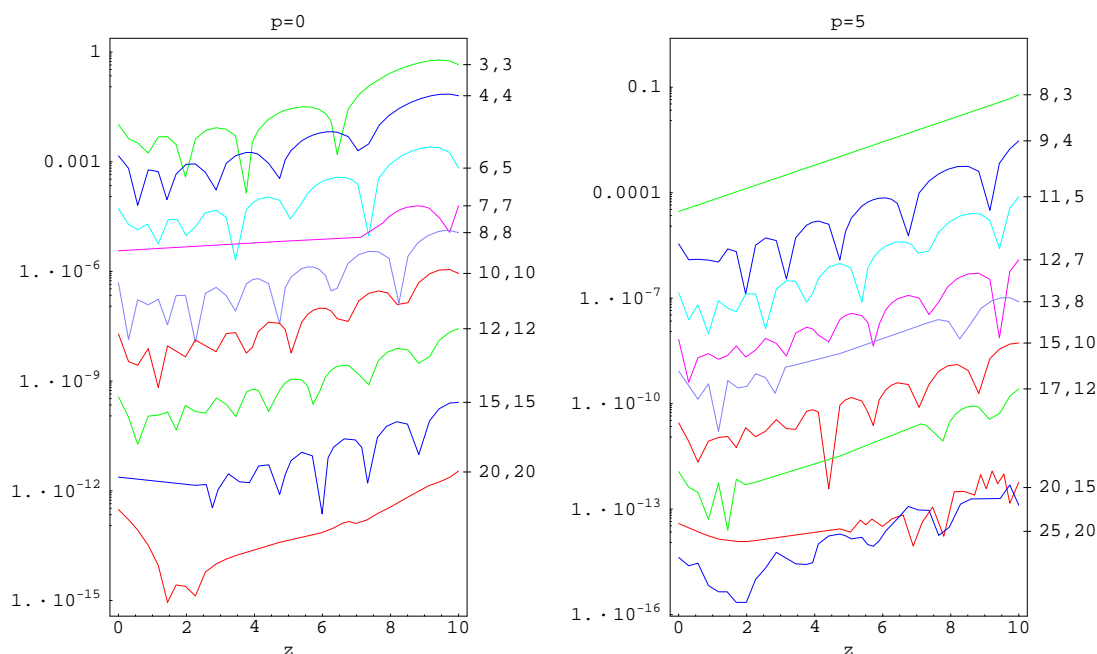


Figura 5.3: Erro relativo $|(f(z) - {}_2[p/q]_f^p(z))/f(z)|$ na aproximação da função $f(z) = 2e^{\frac{1}{2}-z}$ por elementos da sucessão $\left\{ {}_2[q/q]_f^p, {}_2[q+1/q]_f^p \right\}_{q \geq 0}$.

parciais, que constituem os aproximantes da coluna $q = 0$. Podemos observar nestes resultados, que a precisão dos aproximantes aumenta quer ao longo da sucessão das somas parciais, quer ao longo das sucessões diagonais. Entre as colunas 15 e 20, este comportamento é interrompido devido à acumulação de erros.

A mesma família de polinómios, serviu para testar o algoritmo com outras funções. Os coeficientes $Z_{n,m}^\alpha$, necessários para calcular os coeficientes $\{f_i\}_{i \geq 0}$ do desenvolvimento em série de polinómios d -ortogonais, utilizando a proposição 5.1, podem calcular-se com a relação de recorrência da proposição 5.2 e os coeficientes 5.18. Nas matrizes Z^1 e Z^2 apresenta-se, afim de ilustrar a estrutura destas matrizes $Z^\alpha = [z_{m,n}^\alpha]_{m,n \geq 0}$, $\alpha = 1, \dots, d$, os primeiros coeficientes obtidos para este caso,

$$Z^1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & & & & & & & & \\ 0 & 3 & 2 & 0 & \dots & & & & & & \\ \vdots & 2 & 28 & 48 & 24 & 0 & \dots & & & & \\ 0 & 48 & 552 & 1584 & 1800 & 720 & 0 & \dots & & & \\ \vdots & 24 & 1584 & \ddots & & & & & & & \\ & 0 & 1800 & & & & & & & & \\ & \vdots & 720 & & & & & & & & \\ & & 0 & & & & & & & & \\ & & \vdots & & & & & & & & \\ & & & & & & & & & & \end{bmatrix}, Z^2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & & & & & & & \\ 1 & 2 & 8 & 6 & 0 & \dots & & & & & \\ 0 & 8 & 40 & 156 & 240 & 120 & 0 & \dots & & & \\ \vdots & 6 & 156 & \ddots & & & & & & & \\ 0 & 240 & & & & & & & & & \\ \vdots & 120 & & & & & & & & & \\ & 0 & & & & & & & & & \\ & \vdots & & & & & & & & & \end{bmatrix}$$

Os valores

$$\langle u_0, f(x)P_i(x) \rangle = \int_0^\infty f(x)P_i(x)W_0(x)dx$$

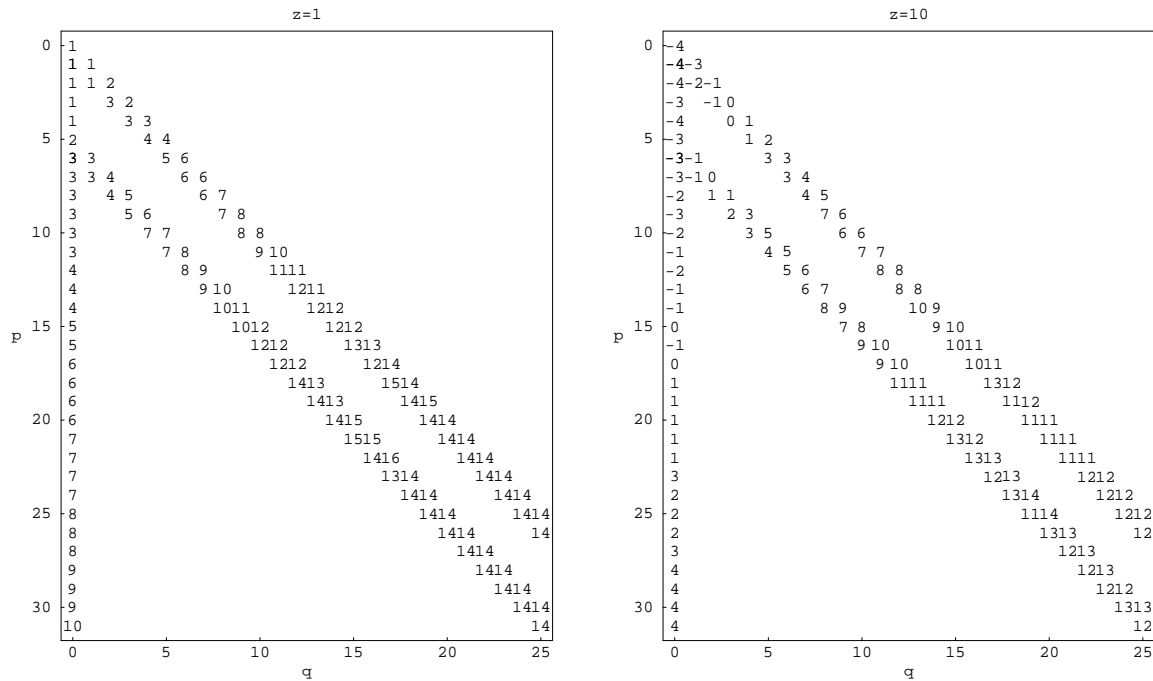


Tabela 5.2: Número de algoritmos significativos exactos na aproximação ${}_2[p/q]_f^P(z)$, isto é $-\log_{10}(|(f(z) - {}_2[p/q]_f^P(z))/f(z)|)$ com $f(z) = 2e^{\frac{1}{2}-z}$.

e

$$\langle u_1, f(x)P_i(x) \rangle = \int_0^\infty f(x)P_i(x)W_1(x)dx$$

necessários, juntamente com os valores $z_{m,n}^\alpha$, para calcular os coeficientes f_i com as fórmulas da proposição 5.1, foram calculados numericamente, com o comando *NIntegrate* do *Mathematica*. Este processo foi testado com funções de decaimento rápido, para obter integrais calculáveis numericamente.

Afim de testar os aproximantes com uma função descontínua, e de decaimento rápido, considerou-se

$$f(z) = e^{-|z|}.$$

Com os valores calculados, após arredondamento, obtemos

$$f(z) = 0.470588P_0(z) - 0.213223P_1(z) + 0.0432717P_2(z) - 0.00422829P_3(z) - 0.000129329P_4(z) + 0.000136661P_5(z) + \dots$$

Dos resultados obtidos com estes dados, apresenta-se na figura 5.4, os gráficos de uma selecção dos aproximantes calculados, sobrepostos ao gráfico de $f(z)$.

Com o aumento da ordem de aproximação, verifica-se que os aproximantes aderem à função com maior exactidão num intervalo de valores cada vez maior. Logo, as sucessões de aproximantes calculadas, aparentam convergir para a função.

Outra função testada, constitui a função de Airy. Define-se esta função como uma solução da equação $f''(z) - zf(z) = 0$ e pode representar-se, em termos de funções de Bessel modificadas de

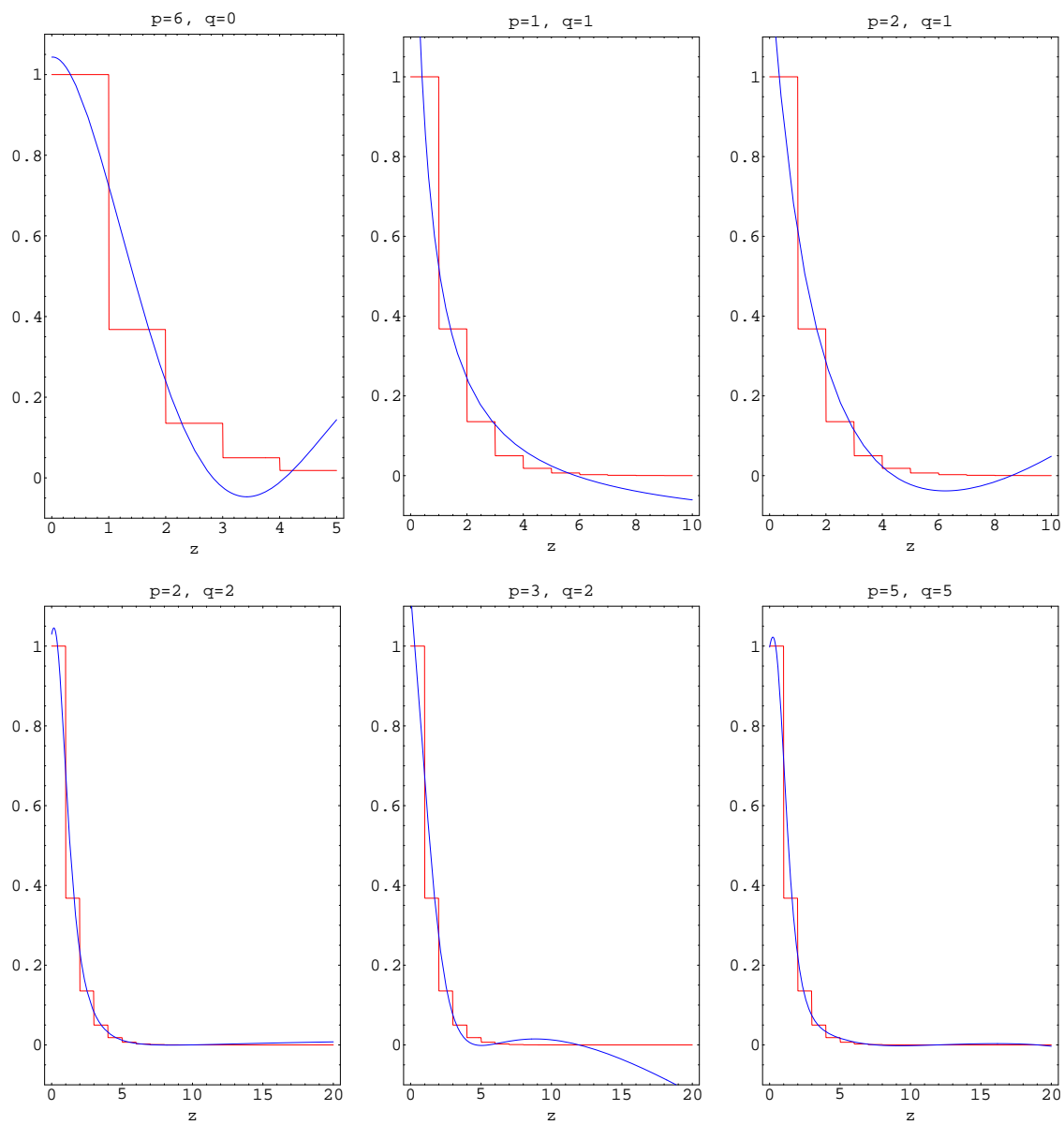


Figura 5.4: $f(z) = e^{-[z]} e_2[p/q]_f(z)$.

primeira espécie, por [24]

$$Ai(z) = \frac{1}{3} \sqrt{z} (I_{-1/3}(\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}) - I_{1/3}(\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}))$$

Em termos dos polinómios 2-ortogonais de tipo Laguerre (5.17)-(5.18), o processo numérico descrito, produz a seguinte representação

$$Ai(z) = 1.069 \times 10^{-1} P_0(z) - 5.778 \times 10^{-2} P_1(z) + 1.497 \times 10^{-2} P_2(z) - 2.435 \times 10^{-3} P_3(z) \\ + 2.698 \times 10^{-4} P_4(z) - 1.976 \times 10^{-5} P_5(z) + 6.339 \times 10^{-7} P_6(z) + \dots$$

Para esta função, utilizou-se o mesmo processo numérico para calcular os coeficientes da representação em série de polinómios ortogonais de Laguerre, i.e. utilizou-se o comando *NIntegrate* do *Mathematica* para calcular os primeiros coeficientes

$$f_i = \int_0^{\infty} Ai(x) L_i(x) e^{-x}, \quad i \geq 0,$$

de que resultou

$$Ai(z) = 0.1824L_0(z) + 0.09621L_1(z) + 0.04820L_2(z) + 0.02233L_3(z) \\ + 0.008994L_4(z) + 0.002552L_5(z) - 0.0002387L_6(z) - 0.001199L_7(z) + \dots$$

Com estas duas representações da função, utilizou-se este algoritmo de cálculo recursivo dos aproximantes 2-AFP juntamente com o seu congénere, de cálculo de sucessões diagonais de AFP, apresentado no capítulo anterior. Os resultados, em termos de erro relativo, apresentam-se nas figuras 5.5 e 5.6. Na figura 5.5, em cada caso, os gráficos dos erros relativos de aproximantes com os mesmos graus, $[p/q]_f^L(z)$ e ${}_2[p/q]_f^P(z)$, logo com a mesma ordem de aproximação $p+q+1$.

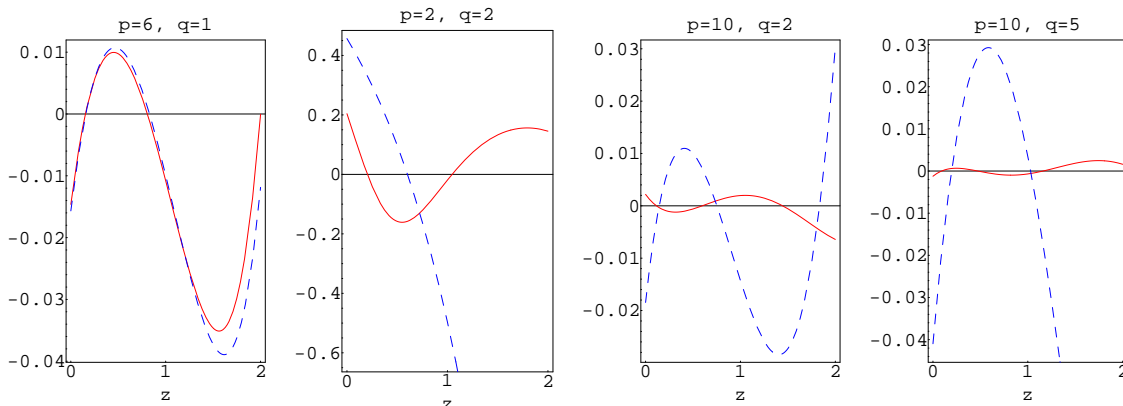


Figura 5.5: $|(f(z) - {}_2[p/q]_f^P(z))/f(z)|$ (a cheio) e $|(f(z) - [p/q]_f^L(z))/f(z)|$ (tracejado), com $f(z) = Ai(z)$.

Uma vez que o número de coeficientes das séries, envolvidos no cálculos destes aproximantes não é o mesmo para os dois casos, na figura 5.6 confrontam-se as curvas do erro relativo dos

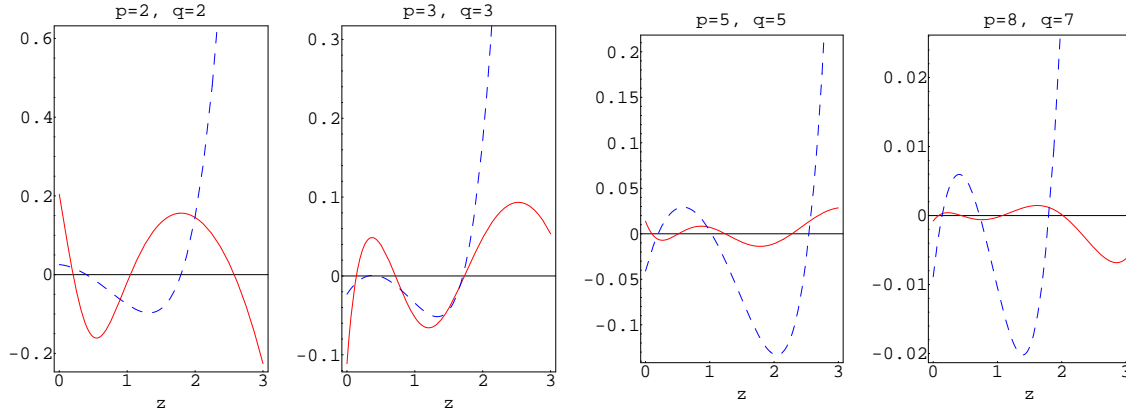


Figura 5.6: $|(f(z) - {}_2[p/q]_f^P(z))/f(z)|$ (a cheio) e $|(f(z) - [p+q/q]_f^L(z))/f(z)|$ (tracejado), com $f(z) = Ai(z)$.

aproximantes $[p+q/q]_f^L(z)$ e ${}_2[p/q]_f^P(z)$, uns e outros calculados com $p+3q+1$ coeficientes das séries respectivas.

Os resultados indicam que, neste caso, os aproximantes 2-ortogonais são sistematicamente melhores, quer quando se comparam aproximantes com a mesma ordem de aproximação, quer quando se comparam aproximantes calculados com o mesmo número de termos da série.

Contando o número de multiplicações necessárias para calcular os coeficientes λ_n e η_n e para calcular os valores a_i , b_i e e_i , com as fórmulas das proposições 5.11 e 5.12; contando o número de coeficientes a_i , b_i e e_i a calcular em cada passo de iteração; contando o número de multiplicações necessárias para calcular as quantidades auxiliares d_i , g_i e h_i com as fórmulas (5.11)-(5.13); concluímos que, um algoritmo baseado nestas fórmulas, calcula os coeficientes dos aproximantes $\{ {}_d[p+q/q]_f^P(z), {}_d[p+q+1/q]_f^J(z) \}_{q=0}^J$, para p, J inteiros positivos dados, juntamente com os coeficientes $\{ e_i^{[p+q/q]} \}_{i=p+2q+1}^{p+(d+2)J-dq+d-1}$ e $\{ e_i^{[p+q+1/q]} \}_{i=p+2q+2}^{p+(d+2)J-dq+d-1}$ com $q = 0, \dots, J$, com cerca de $2((d+3)J)^2$ multiplicações.

5.5 Algoritmos de tipo Kronecker

Para terminar este capítulo, generaliza-se o algoritmo apresentado em [34] para o caso da aproximação Frobenius-Padé em séries de polinômios de Legendre. Este por sua vez, generaliza o algoritmo de Kronecker para o cálculo da sucessão de aproximantes de uma anti-diagonal da tabela de Padé [2]. À semelhança do exposto na secção anterior, a generalização do algoritmo ao caso da aproximação de séries de polinômios d -ortogonais envolve uma relação a $d+3$ aproximantes.

A notação utilizada segue de perto a notação de [34].

Seja

$$\frac{p_j(z)}{q_j(z)} = {}_d[M-j/j]_f^P(z), \quad 0 \leq j \leq M$$

um aproximante de Frobenius-Padé d -ortogonal, i.e.

$$\begin{cases} p_j(z) = \sum_{i=0}^{M-j} a_{j,i} P_i(z), \\ q_j(z) = \sum_{i=0}^j b_{j,i} P_i(z), \\ q_j(z)f(z) - p_j(z) = \sum_{i \geq M+1} e_{j,i} P_i(z) \end{cases}$$

conforme a definição 5.2. As condições de normalidade traduzem-se por $a_{j,M-j} \neq 0$, $b_{j,j} \neq 0$ e $e_{j,M+1} \neq 0$.

O resultado principal desta secção, encontra-se expresso na proposição seguinte.

Proposição 5.13 *Seja $\{P_i\}_{i \geq 0}$ uma d -OPS, se a tabela d -TFP é normal, então existem coeficientes $\lambda_{i,j}$, $\eta_{i,j}$, $i = 0, \dots, d$, $j = 0, \dots, M$ tais que a relação de recorrência*

$$\begin{cases} p_{j+1}(z) = \sum_{i=0}^d (\lambda_{i,j} + \eta_{i,j}z) p_{j-i}(z) + p_{j-d-1}(z) \\ q_{j+1}(z) = \sum_{i=0}^d (\lambda_{i,j} + \eta_{i,j}z) q_{j-i}(z) + q_{j-d-1}(z) \end{cases}$$

com os valores iniciais

$$\begin{cases} p_0(z) = \sum_{i=0}^M f_i P_i(z), & q_0(z) = 1, \\ p_{-j}(z) = P_{M+j}(z), & q_{-j}(z) = 0, \quad j = 1, \dots, d+1 \end{cases}$$

permite calcular a anti-diagonal da tabela $_d[M-j/j](z) = p_j(z)/q_j(z)$, $j = 1, \dots, M$, para $M \geq 1$ fixo.

Demonstração. A partir das condições $q_j f - p_j = \sum_{i \geq M+1} e_{j,i} P_i$ e de

$$q_{j+1} f - p_{j+1} = \sum_{k=0}^d (\lambda_{k,j} + \eta_{k,j}z) (q_{j-k} f - p_{j-k}) + (q_{j-d-1} f - p_{j-d-1})$$

obtemos

$$\sum_{i \geq M+1} (e_{j+1,i} - \sum_{k=0}^d \lambda_{k,j} e_{j-k,i} - e_{j-d-1,i}) P_i = \sum_{k=0}^d \eta_{k,j} \sum_{i \geq M+1} e_{j-k,i} z P_i.$$

Esta condição pode traduzir-se por

$$O(P_{M+1}) = z \sum_{i \geq M+1} \tau_i P_i, \quad \tau_i = \sum_{k=0}^d \eta_{k,j} e_{j-k,i}, \quad i \geq M+1$$

Utilizando (5.13) com $p+q = M$ e os coeficientes $e_i^{[p/q]}$ substituídos por τ_i , obtemos

$$z \sum_{i \geq M+1} \tau_i P_i = \gamma_{M-d+2}^0 \tau_{M+1} P_{M+1-d} + \sum_{i=M+2-d}^M \left(\sum_{v=M-i}^{d-1} \gamma_{i+1}^{d-1-v} \tau_{i+1+v} \right) P_i + O(P_{M+1}).$$

A condição de o segundo membro constituir uma série de ordem $M+1$, conduz ao sistema triangular homogéneo, de d equações nas d incógnitas $\tau_i, i = M+1, \dots, M+d$

$$\begin{cases} \gamma_{M-d+2}^0 \tau_{M+1} = 0 \\ \gamma_{M-d+3}^1 \tau_{M+1} + \gamma_{M-d+3}^0 \tau_{M+2} = 0 \\ \dots \\ \gamma_{M+1}^{d-1} \tau_{M+1} + \gamma_{M+1}^{d-2} \tau_{M+2} + \dots + \gamma_{M+1}^0 \tau_{M+d} = 0 \end{cases}$$

Sendo $\gamma_i^0 \neq 0, i \geq 0$ conforme o teorema 5.1, este sistema é regular, logo admite a solução única $\tau_i = 0, i = M+1, \dots, M+d$, i.e.

$$\sum_{k=0}^d e_{j-k,i} \eta_{k,j} = 0, \quad i = M+1, \dots, M+d \quad (5.19)$$

As restantes $d+2$ condições, para a determinação das $2d+2$ incógnitas $\{\lambda_{i,j}, \eta_{i,j}\}_{i=0, \dots, d}$, resultam da condição sobre os graus dos numeradores, $\partial(p_j) = M-j, j = 0, \dots, M$, que se traduzem por:

$$a_{j-d,p+d} \eta_{d,j} + a_{j-d-1,p+d+1} = 0 \quad (5.20)$$

$$\sum_{k=i}^d a_{j-k,p+i} \lambda_{k,j} + \sum_{k=i-1}^d g_{j-k,p+i} \eta_{k,j} + a_{j-d,p+i} = 0, \quad i = 0, \dots, d \quad (5.21)$$

onde $p = M-j$ e $g_{j,i}$ são os coeficientes de $zp_j(z)$ dados pelas fórmulas (5.11).

Para terminar a demonstração, falta verificar que o conjunto de equações (5.19)-(5.21) constitui um sistema regular. Como facilmente se verifica, calculados os valores $\eta_{i,j}, i = 0, \dots, d$, as equações (5.21) constituem um sistema triangular, regular porque $a_{j-i,p+i} \neq 0, i = 0, \dots, d$ por hipótese de normalidade, cuja solução é

$$\lambda_{i,j} = -\frac{1}{a_{j-i,p+i}} (a_{j-d,p+i} + \sum_{k=i+1}^d \lambda_{k,j} a_{j-k,p+i} + \sum_{k=i-1}^d \eta_{k,j} g_{j-k,p+i}), \quad i = d, d-1, \dots, 0$$

Suponhamos por absurdo que o sistema (5.19)-(5.20) é singular, logo o sistema homogéneo associado admite pelo menos uma solução não trivial, o que produz uma função racional $p_{j+1}(z)/p_{j+1}(z)$ em que $p_{j+1}(z)$ é um polinómio de grau $< M-j-1$, $q_{j+1}(z)$ é um polinómio de grau $j+1$ e $q_{j+1}f - p_{j+1} = O(P_{M+1})$ o que contraria a hipótese de normalidade. ■

Como seria de esperar, o caso particular $d = 1$ nesta proposição, constitui uma generalização dos resultados apresentados em [34] para a aproximação Padé-Legendre.

Com as fórmulas desta proposição, podemos construir uma relação de recorrência para os coeficientes dos numeradores, dos denominadores e do desenvolvimento em série do erro. Por questões de facilidade de leitura, e porque os exemplos de aplicação apresentados a seguir assim o justificam, no corolário seguinte apresentam-se os resultados obtidos para o caso particular $d = 2$.

Corolário 5.1 *Nas condições da proposição anterior, se $d = 2$ então os coeficientes dos numerado-*

res, dos denominadores e do erro satisfazem a relação de recorrência

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{j+1,i} = \sum_{k=0}^2 (\lambda_{k,j} a_{j-k,i} + \eta_{k,j} g_{j-k,i}) + a_{j-3,i}, \quad i = 0, \dots, M-j-1 \\ b_{j+1,j+1} = \eta_{0,j} h_{j,j+1} \\ b_{j+1,j-i} = \sum_{k=0}^i \lambda_{k,j} b_{j-k,j-i} + \sum_{k=0}^{i+1} \eta_{k,j} h_{j-k,j-i}, \quad i = 0, 1 \\ b_{j+1,j-2} = \sum_{k=0}^2 (\lambda_{k,j} b_{j-k,j-2} + \eta_{k,j} h_{j-k,j-2}) \\ b_{j+1,i} = \sum_{k=0}^2 (\lambda_{k,j} b_{j-k,i} + \eta_{k,j} h_{j-k,i}) + b_{j-3,i}, \quad i = 0, \dots, j-3 \\ e_{j+1,i} = \sum_{k=0}^2 (\lambda_{k,j} e_{j-k,i} + \eta_{k,j} d_{j-k,i}) + e_{j-3,i}, \quad i \geq M+1 \end{array} \right.$$

onde

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta_{2,j} = -\frac{a_{j-3,M-j+3}}{a_{j-2,M-j+2}} \\ \eta_{0,j} = (e_{j-2,M+2} e_{j-1,M+1} - e_{j-2,M+1} e_{j-1,M+2}) \frac{\eta_{2,j}}{\Delta} \\ \eta_{1,j} = (e_{j,M+2} e_{j-2,M+1} - e_{j,M+1} e_{j-2,M+2}) \frac{\eta_{2,j}}{\Delta} \\ \lambda_{2,j} = -\frac{1}{a_{j-2,M-j+2}} (a_{j-3,M-j+2} + \sum_{k=1}^2 \eta_{k,j} g_{j-k,M-j+2}) \\ \lambda_{1,j} = -\frac{1}{a_{j-1,M-j+1}} (a_{j-3,M-j+1} + \lambda_{2,j} a_{j-2,M-j+1} + \sum_{k=0}^2 \eta_{k,j} g_{j-k,M-j+1}) \\ \lambda_{0,j} = -\frac{1}{a_{j,M-j}} (a_{j-3,M-j} + \sum_{k=1}^2 \lambda_{k,j} a_{j-k,M-j} + \sum_{k=0}^2 \eta_{k,j} g_{j-k,M-j}) \end{array} \right.$$

com

$$\Delta = e_{j,M+1} e_{j-1,M+2} - e_{j,M+2} e_{j-1,M+1}$$

e os valores $g_{j,k}$, $h_{j,k}$ e $d_{j,k}$, dados pelas expressões (5.11)-(5.13)

Estas fórmulas foram programadas de forma a calcular a sucessão $\left\{ {}_2[M-j/j]_f^P(z) \right\}_{j=0}^M$, dados o valor de $M \in \mathbb{N}$, e os coeficientes da série $\{f_i\}_{i=0}^{3M}$. Os mesmos dois exemplos do capítulo anterior foram utilizados para ilustrar resultados.

Resultados numéricos

Seja $\{P_n\}_{n \geq 0}$ a família de polinómios 2-ortogonais de tipo Jacobi referida no primeiro exemplo da secção anterior. Para a mesma função aí considerada

$$f(z) \equiv \frac{5}{\sqrt{41-40z}} = 1 + P_1(z) + \frac{4}{5} P_2(z) + \frac{24}{25} P_3(z) + \frac{32}{25} P_4(z) + \dots$$

os resultados obtidos com este algoritmo apresentam-se nos gráficos da figura 5.7 e na tabela 5.3.

Nos gráficos e nas tabelas observa-se que os erros alcançam valores mínimos, em cada sucessão, para q próximo do valor $M/2$ e que aumentam depois deste valor. Este comportamento, observado nestas sucessões de aproximantes 2-ortogonais, é análogo ao comportamento observado para sucessões de aproximantes no caso ortogonal onde, como se refere nos comentários aos resultados apresentados na página 56, é frequente, para um conjunto de aproximantes calculados com o mesmo

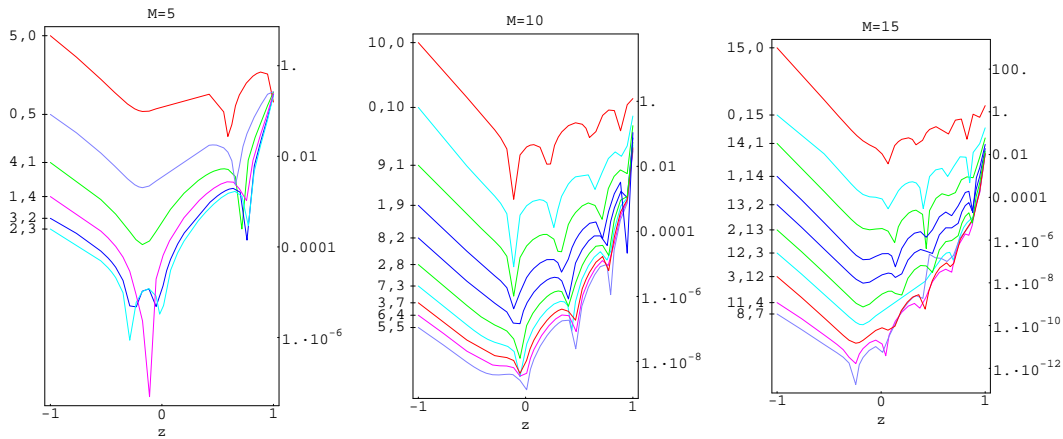


Figura 5.7: Erro relativo $|(f(z) - {}_2[p/q]_f^P(z))/f(z)|$ na aproximação da função $f(z) = 5/\sqrt{41 - 40z}$ por elementos da sucessão $\left\{ {}_2[M - q/q]_f^P(z) \right\}_{q=0}^M$. Os valores representados ao lado de cada curva, correspondem aos graus p, q do numerador e do denominador do aproximante

número de termos da série, verificar-se que os melhores resultados são obtidos com aproximantes localizados na vizinhança da diagonal principal da tabela.

Na tabela 5.3 representa-se na posição (p, q) , o número de dígitos exactos na aproximação ${}_2[p/q]_f^P(z)$, para cada um dos três valores de z indicados, para as sucessões anti-diagonais calculadas com este algoritmo. Estes resultados concordam com as observações feitas às curvas do erro absoluto num intervalo de valores. Em qualquer uma das três abcissas consideradas, e para cada anti-diagonal, podemos observar que os resultados melhoram até se atingir o meio da tabela, isto é para aproximantes localizados perto da diagonal principal da tabela, e depois pioram até à primeira linha da tabela.

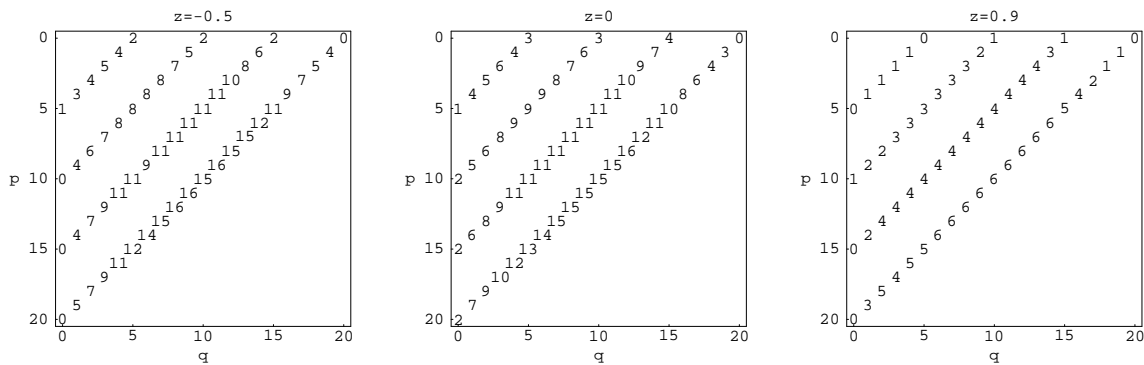


Tabela 5.3: Número de dígitos decimais exactos na aproximação ${}_2[p/q]_f^P(x)$, isto é $-\log_{10}(|f(z) - {}_2[p/q]_f^P(z)|)$ com $f(x) = 5/\sqrt{41 - 40x}$.

Dos valores obtidos, destaca-se o incremento significativo na precisão, entre 3 e 5 casas decimais

na abscissa $z = 0$, quando se passa da coluna $q = 0$, constituída pelas somas parciais da série, para os aproximantes da coluna $q = 1$. Os resultados também sugerem, em analogia com os resultados da secção anterior, que a progressão nas linhas e nas colunas da tabela, em qualquer uma das abscissas, produz sucessões convergentes para os valores da função.

Tomando como segundo exemplo a série de polinómios 2-ortogonais de tipo Laguerre da secção 5.4.2, para aproximar a função $f(z) = 2e^{\frac{1}{2}-z}$. Os resultados obtidos com este algoritmo apresentam-se nos gráficos das figuras 5.8 e na tabela da figura 5.4.

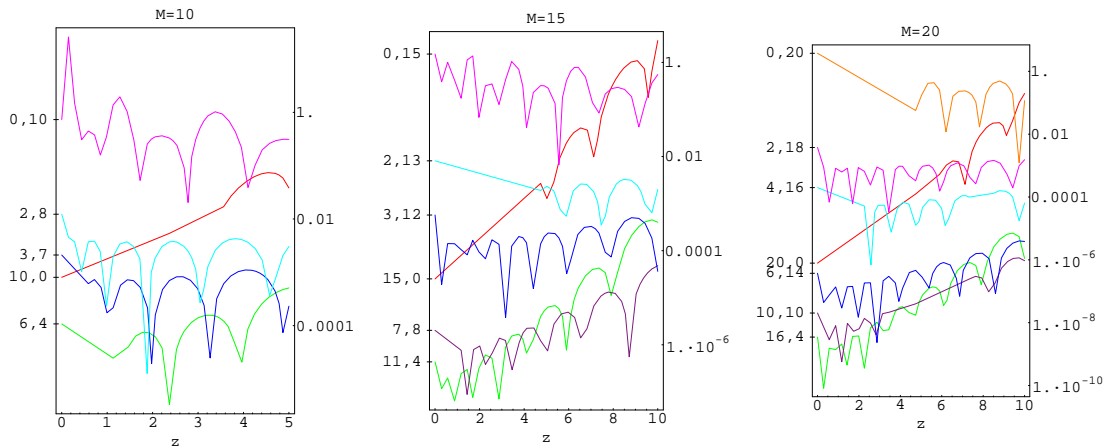


Figura 5.8: Erro relativo $|(f(z) - {}_2[p/q]_f^P(z))/f(z)|$ na aproximação da função $f(z) = 2e^{\frac{1}{2}-z}$ por elementos da sucessão $\{{}_2[M - q/q]_f^P(z)\}_{q=0}^M$. Os valores representados ao lado de cada curva, correspondem aos graus p, q do numerador e do denominador do aproximante

As somas parciais desta série, tanto quanto podemos observar, convergem para os valores da função, nas abscissas $z \geq 0$, ou pelo menos num sub-intervalo. Da observação dos gráficos do erro relativo, constatamos que em cada abscissa considerada, o erro diminui com o número de termos considerados nas somas parciais e que, para o mesmo número de termos, o erro relativo cresce exponencialmente com o valor de z . Nos resultados obtidos com este algoritmo, podemos observar que os aproximantes 2-AFP com graus pequenos no denominador têm um comportamento qualitativamente semelhante às somas parciais, i.e. em cada abscissa o erro diminui em cada coluna da tabela e cresce exponencialmente com o valor de z . Em cada uma das sucessões, os últimos aproximantes calculados apresentam o erro relativo com oscilações quase uniformes ao longo dos intervalos considerados.

5.6 Conclusões

Neste capítulo, mostrou-se a possibilidade de generalização dos resultados dos capítulos anteriores, no sentido de obter aproximantes racionais para séries de polinómios d -ortogonais. A possibilidade de estender esta generalização, considerando outros tipos de séries, é um problema que se deixa em aberto. Outra possibilidade de generalização que se deixa para estudo posterior, consiste na aplicação dos resultados desta tese a outras classes de aproximantes.

Demonstrados novos resultados, relativos aos coeficientes do desenvolvimento em série de po-

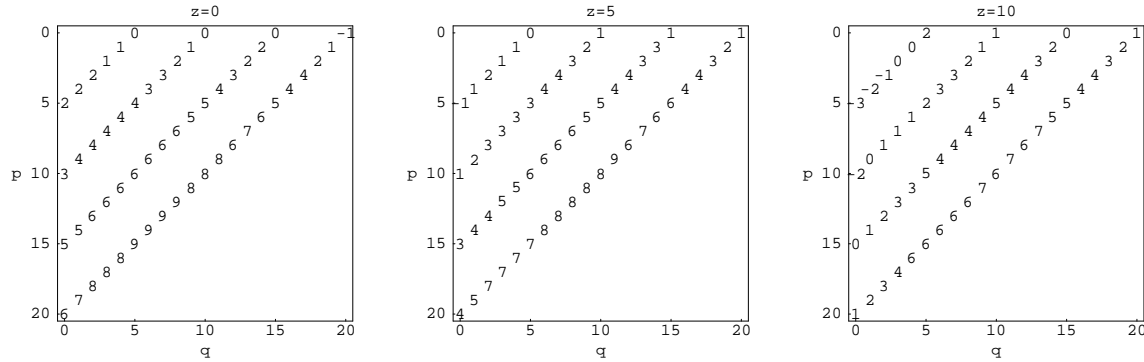


Tabela 5.4: Número de algoritmos significativos exactos na aproximação ${}_2[p/q]_f^P(z)$, isto é $-\log_{10}(|(f(z) - {}_2[p/q]_f^P(z))/f(z)|)$ com $f(z) = 2e^{\frac{1}{2}-z}$.

linómios d -ortogonais de uma função, mostrou-se que as somas parciais destas séries possuem propriedades de projecção, permitindo interpretá-las como uma generalização das séries de Fourier.

Com o estudo apresentado ao longo deste capítulo, podemos concluir que a generalidade dos processos de cálculo dos coeficientes dos aproximantes de Frobenius-Padé, ou têm aplicação directa ao caso dos aproximantes de Frobenius-Padé d -ortogonais, ou podem generalizar-se sem dificuldades.

Os resultados numéricos obtidos, revelam que os algoritmos apresentados possuem as mesmas qualidades de estabilidade dos seus congéneres dos capítulos anteriores.

Os aproximantes generalizados, calculados com os algoritmos deste último capítulo, revelaram propriedades semelhantes às dos aproximantes de Frobenius-Padé. Nomeadamente, as sucessões de aproximantes calculadas, quando fixada uma abcissa, com a progressão nas linhas e nas colunas da tabela, produzem valores convergentes para o valor exacto da função. Na generalidade dos casos observados, os aproximantes interpolam a função, produzindo um erro oscilando com sucessivas mudanças de sinal.

Diversas sucessões de aproximantes para série de polinómios 2-ortogonais, foram calculadas e os resultados comparados com AFP, obtidos para as mesmas funções. Esta comparação não se mostrou conclusiva, no sentido de revelar qual a classe de aproximantes que produz resultados mais exactos. Tendo-se verificado que para algumas funções tomadas como exemplo, os aproximantes 2-AFP são mais exactos do que os AFP, e que o contrário também acontece para outras funções, fica em aberto o estudo das propriedades das séries que produzem uns e outros resultados. Em particular, fica para análise posterior, o estudo das propriedades das séries para as quais o aumento de precisão dos resultados, compensa o aumento do volume de aritmética presente nos algoritmos dos aproximantes d -ortogonais.

Referências

- [1] R. Askey. *Orthogonal polynomials and special functions*, volume 21 of *Regional Conferences Series in Applied Mathematics*. SIAM, Philadelphia, 1975.
- [2] G. A. Baker, Jr. and P. Graves-Morris. Padé approximants. In G.-C. Rota, editor, *Encyclopedia of Mathematics and its Applications*, volume 59. Cambridge University Press, 1996.
- [3] S. Barnett. Congenial matrices. *Linear Algebra and its Applications*, 41:277–298, 1981.
- [4] A. Björck and T. Elfving. Algorithms for confluent Vandermonde systems. *Numer. Math.*, 21:130–137, 1973.
- [5] C. Brezinski. *Padé-Type Approximation and General Orthogonal Polynomials*. Birkhäuser, Basel, 1980.
- [6] C. Brezinski. *Biorthogonality and its Applications to Numerical Analysis*. Marcel Bekker, New York, 1992.
- [7] C. Brezinski and J. Van Iseghem. Padé approximations. In P. Ciarlet and J. Lions, editors, *Handbook of Numerical Analysis*, volume III. North-Holland, Amsterdam, 1994.
- [8] D. Calvetti and L. Reichel. Fast inversion of Vandermonde-like matrices involving orthogonal polynomials. *Bit*, (33):473–484, 1993.
- [9] H. Carslaw. *An Introduction to the Theory of Fourier's Series and Integrals*. Dover Publications, New York, 3 edition, 1950.
- [10] E. Cheney. *Introduction to Approximation Theory*. International Series in Pure and Applied Mathematics. McGraw-Hill, New York, 1966.
- [11] T. Chihara. *An Introduction to Orthogonal Polynomials*, volume 13 of *Mathematics and Its Applications*. Gordon and Breach, N.Y., 1978.
- [12] C. W. Clenshaw and K. Lord. Rational approximations from Chebyshev series. In B. K. P. Scaife, editor, *Studies in numerical analysis*, pages 95–113. Academic press, London, 1974.
- [13] Z. da Rocha. QD-algorithms and recurrence relations for biorthogonal polynomials. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, (107):53–72, 1999.
- [14] Z. da Rocha and J. M. Matos. Frobenius-padé approximants to d -ortogonal series. em preparação.
- [15] P. J. Davis. *Interpolation and Approximation*. Dover, New York, 1975.

- [16] K. Douak. On 2-orthogonal polynomials of Laguerre type. *Internat. J. of Math. and Math. Sci.*, 22(1):29–48, 1999.
- [17] K. Douak and P. Maroni. On d -orthogonal Tchebychev polynomials, I. *Applied Numerical Mathematics*, 24:23–53, 1997.
- [18] W. Gautschi. The condition of vandermonde-like matrices involving orthogonal polynomials. *Linear Algebra and its Applications*, 52/53:293–300, 1983.
- [19] L. Gemignani. A fast algorithm for generalized Hankel matrices in finite-moment problems. *Linear Algebra and its Applications*, 267:41–52, 1997.
- [20] I. Gohberg, T. Kailath, and V. Olshevsky. Fast gaussian elimination with partial pivoting for matrices with displacement structure. *Mathematics of Computation*, 64(212):1557–1576, 1995.
- [21] G. Golub and V. Olshevsky. Pivoting for structured matrices with applications. <http://www-isl.stanford.edu/olshevsk>, 1999.
- [22] G. H. Golub and C. F. Van Loan. *Matrix Computations*. Johns Hopkins, Baltimore, Maryland, third edition, 1996.
- [23] G. Heinig and V. Olshevsky. The schur algorithm for matrices with hessenberg displacement structure. In V. Olshevsky, editor, *Structured Matrices in Mathematics, Computer Science, and Engineering II*, volume 281 of *Contemporary mathematics*. AMS publications, 2001.
- [24] U. W. Hochstrasser. Orthogonal polynomials. In M. Abramowitz and I. A. Stegun, editors, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, pages 771–802. Dover, N. Y., 1970.
- [25] J. T. Holdeman, Jr. A method for the approximation of functions defined by formal series expansions in orthogonal polynomials. *Mathematics of Computation*, 23:275–287, 1969.
- [26] T. Kailath and A. H. Sayed. Displacement structure: Theory and applications. *SIAM Review*, 37(3):297–386, September 1995.
- [27] N. Lebedev. *Special Functions and their applications*. Prentice-Hall, Inc, 1965.
- [28] S. Lewanowicz. Second-order recurrence relation for linearization coefficients of the classical orthogonal polynomials. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 69:159–170, 1996.
- [29] H. Lu. Solution of Vandermonde-like systems and confluent Vandermonde-like systems. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 17(1):127–138, January 1996.
- [30] Y. L. Luke. The special functions and their approximations. In R. Bellman, editor, *Mathematics in Science and Engineering*, volume 53-I. Academic Press, 1969.
- [31] P. Maroni. L’orthogonalité et les recurrences de polynômes d’ordre supérieure à deux. *Ann. Fac. Sci. Toulouse*, 10(1):105–139, 1989.
- [32] P. Maroni. *Une Théorie Algébrique des polynômes orthogonaux. Application aux polynômes orthogonaux semi-classiques*, pages 95–130. IMACS. J.C. Baltzer AG, Scientific Publishing Co, 1991.

- [33] P. Maroni. Two-dimensional orthogonal polynomials, their associated sets and the co-recursive sets. *Numerical Algorithms*, 3:299–312, 1992.
- [34] A. C. Matos. Recursive computation of Padé-Legendre approximants and some acceleration properties. *Numerische Mathematik*, 89(3):535–560, 2001.
- [35] J. M. Matos. Displacement structure in Frobenius-Padé matrices. *em preparação*, 2002.
- [36] K. Stempak. Divergent Laguerre series. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 129(4):1123–1126, 2000.
- [37] J. Van Iseghem. Vector orthogonal relations. vector qd-algorithm. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 19:141–150, 1987.