

Integração Numérica

Prof. Doherty Andrade- DMA/UEM¹

Sumário

Resumo: Nestas notas vamos introduzir de modo rápido as principais técnicas de integração numérica. São elas: Regra dos trapézios, Regra de Simpson e quadratura de Gauss.

1 Preliminares

Nestas notas o nosso interesse é calcular numericamente integrais

$$\int_a^b f(x)dx.$$

A idéia da integração numérica reside na aproximação da função integranda f por um polinômio. A escolha deste polinômio e dos pontos usados na sua determinação vai resultar nos diversos métodos numéricos de integração.

As fórmulas de integração numéricas são somatórios cujas parcelas são valores de $f(x)$ calculados em pontos escolhidos e multiplicados por pesos convenientes:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i), \quad (1.1)$$

onde $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ são pontos de integração e os ω_i são os pesos.

2 Fórmulas de Newton-Cotes

Nesta seção vamos considerar apenas as chamadas fórmulas fechadas, isto é, os extremos de integração coincidem com x_0 e x_n . Nas fórmulas abertas não há esta exigência, portanto se um dos extremos não coincide com estes pontos, a fórmula de integração é chamada aberta.

Dada $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, seja n um número natural e $h = \frac{b-a}{n}$. Os pontos $x_j = x_0 + jh$, $j = 0, 1, \dots, n$ são igualmente espaçados.

Seja $P_n(x)$ o polinômio de grau n que interpola os pontos $(x_i, f(x_i))$, $i = 0, 1, \dots, n$. Por Lagrange, sabemos que

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i(x),$$

e o erro

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\alpha)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n).$$

¹doherty@uem.br

Integrando em (a, b) , obtemos

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b L_i(x)dx + \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\alpha)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)dx,$$

onde $\alpha = \alpha(x)$ é um ponto em (a, b) .

Chamando

$$\omega_i = \int_a^b L_i(x)dx$$

obtemos uma expressão para $\int_a^b f(x)dx$ do tipo (1.1) (a menos do erro):

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i) + \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\alpha)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)dx.$$

Como caso particular, na seções §3 e §4, obtemos as fórmulas dos Trapézios e de Simpson, que são estabelecidas com polinômios de graus baixos, grau 1 e grau 2, respectivamente.

3 Regra dos Trapézios

Esta fórmula corresponde à interpolação da função a ser integrada por um polinômio de grau 1.

A interpolação linear necessita de dois pontos, vamos usar os extremos do intervalo de integração, isto é, $a = x_0$ e $b = x_1$. Logo,

$$\begin{aligned}\omega_0 &= \int_{x_0}^{x_1} \frac{x-x_1}{x_0-x_1} dx = \frac{h}{2}, \\ \omega_1 &= \int_{x_0}^{x_1} \frac{x-x_0}{x_1-x_0} dx = \frac{h}{2}.\end{aligned}$$

Segue que

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}f(x_0) + \frac{h}{2}f(x_1) + \text{erro},$$

onde o erro é dado por

$$E_{Trap} = \frac{1}{2} \int_{x_0}^{x_1} f''(\alpha)(x-x_0)(x-x_1)dx \quad (3.1)$$

$$= \frac{f''(\beta)}{2} \int_{x_0}^{x_1} (x-x_0)(x-x_1)dx \quad (3.2)$$

$$= -\frac{f''(\beta)h^3}{12}. \quad (3.3)$$

Logo,

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] - \frac{f''(\beta)h^3}{12}}, \quad (3.4)$$

onde $\beta \in (a, b)$ não é conhecido.

Na secção §5 veremos como fica a regra dos trapézios se for aplicada repetidas vezes sobre subintervalos de um intervalo $[a, b]$.

4 Regra de Simpson

Neste caso vamos interpolar $f(x)$ usando um polinômio de grau 2 que coincide com esta função em $a = x_0$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ e $b = x_2$.

Integrando os polinômios de Lagrange de grau 2, obtemos os pesos da fórmula de Simpson,

$$\omega_0 = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} dx = \frac{h}{3},$$

$$\omega_1 = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} dx = \frac{4h}{3},$$

$$\omega_2 = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} dx = \frac{h}{3}.$$

Segue que

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] + \text{erro},$$

onde o erro é dado por (aqui os argumentos não são simples)

$$E_{Simp} = \frac{1}{3!} \int_{x_0}^{x_2} f^{(3)}(\alpha)(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) dx = - \left[\frac{h^5}{90} \right] f^{(4)}(\beta), \quad (4.1)$$

para algum $\beta \in (x_0, x_2)$

Logo, a fórmula de Simpson é

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \left[\frac{h^5}{90} \right] f^{(4)}(\beta).} \quad (4.2)$$

Na secção §5 veremos como fica a regra de Simpson se for aplicada repetidas vezes sobre subintervalos de um intervalo $[a, b]$.

Para informação, apresentamos as fórmulas obtidas quando $n = 3$ e $n = 4$, obtidas usando polinômios de grau 3 e 4, respectivamente. Observe que elas são mais precisas que as anteriores, embora exijam mais cálculos.

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x) dx = \frac{3h}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] - \left(\frac{3h^5}{80} \right) f^{(4)}(\beta), \quad \beta \in [x_0, x_3].$$

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x) dx = \frac{2h}{45} [7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)] - \left(\frac{8h^7}{945} \right) f^{(6)}(\beta), \quad \beta \in [x_0, x_4].$$

5 Fórmulas compostas: Trapézios e Simpson

Quando o intervalo de integração é grande, pode não ser conveniente aumentar o grau do polinômio interpolador para obter fórmulas mais precisas. A alternativa mais usada é subdividir o intervalo de integração e aplicar fórmulas simples repetidas vezes, obtendo-se as fórmulas compostas.

No caso da **REGRA DOS TRAPÉZIOS**, dado o intervalo $[a, b]$ dividindo-o em n subintervalos de comprimento $h = \frac{b-a}{n}$ e portanto $x_0 = a, x_i = x_0 + ih, i = 0, 1, \dots, n$ e $x_n = b$, temos que

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \\ &= \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx \\ &\approx \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] + \frac{h}{2} [f(x_1) + f(x_2)] + \cdots + \frac{h}{2} [f(x_{n-1}) + f(x_n)] \\ &= \frac{h}{2} \{f(x_0) + 2[f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{n-1})] + f(x_n)\}. \end{aligned}$$

O erro final de uma fórmula repetida pode ser obtido pela soma dos erros parciais. Na regra dos trapézios, cada um dos subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$ contribui com um erro parcial dado por

$$-\frac{h^3}{12} f^{(2)}(\beta_i).$$

Somando os erros parciais obtemos

$$E_{Trap} = -\frac{h^3}{12} [f^{(2)}(\beta_1) + f^{(2)}(\beta_2) + \cdots + f^{(2)}(\beta_n)].$$

Supondo que f possua derivada segunda contínua em $[a, b]$, existem constantes $m_2, M_2 \geq 0$ tais que

$$m_2 \leq |f^{(2)}(x)| \leq M_2.$$

Assim, obtemos uma estimativa para o erro total

$|E_{Trap}| \leq n \frac{h^3}{12} M_2 = (b-a) \frac{h^2}{12} M_2.$

(5.1)

No caso da **REGRA DE SIMPSON**, dado o intervalo $[a, b]$ dividindo-o em n (par, pois a parábola necessita de 3 pontos) subintervalos de comprimento $h = \frac{b-a}{n}$ e portanto $x_0 = a, x_i = x_0 + ih, i = 0, 1, \dots, n$ e $x_n = b$, temos que

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)dx \\ &\approx \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] + \frac{h}{3} [f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)] + \cdots \\ &\quad + \frac{h}{3} [f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)] \\ &= \frac{h}{3} \{f(x_0) + 4[f(x_1) + f(x_3) + \cdots + f(x_{n-1})]\} \\ &\quad + \frac{h}{3} \{2[f(x_2) + f(x_4) + \cdots + f(x_{n-2})] + f(x_n)\}. \end{aligned}$$

O erro final pode ser obtido pela soma dos erros parciais. Na regra de Simpson, cada um dos subintervalos contribui com um erro parcial dado por (**aqui usamos $\frac{n}{2}$ parábolas e portanto $\frac{n}{2}$ parcelas de erro**):

$$-\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\beta_i).$$

Somando os erros parciais obtemos uma estimativa para o erro total

$$|E_{Simp}| \leq (b-a) \frac{h^4}{180} \max\{|f^{(4)}(x)|; x \in [a, b]\}. \quad (5.2)$$

Note que se $f(x)$ é um polinômio de grau ≤ 3 então o erro $|E_{Simp}|$ é nulo, isto é, a regra de Simpson é exata para polinômios de grau ≤ 3 .

Exercício 5.1 Quantos intervalos devemos usar para calcular a integral $\int_0^1 \exp(-x^2)dx$ usando a Regra dos Trapézios e a Regra de Simpson, com erro menor do que 10^{-4} ?

Primeiramente, a regra dos trapézios. O erro total é dado por

$$|E_{Trap}| \leq \frac{b-a}{12} h^2 \max |f^{(2)}(x)| \leq \frac{2}{12} h^2 \leq 10^{-4}.$$

Segue que $h \leq 2.44 \times 10^{-2}$ e portanto $n \geq 40.8$. Assim, tomamos 41 intervalos.

Para a regra de Simpson,

$$|E_{Simp}| \leq \frac{b-a}{180} h^4 \max |f^{(4)}(x)| = \frac{12h^4}{180} \leq 10^{-4}.$$

Segue que $h \leq 1.96 \times 10^{-1}$ e assim $n = \frac{1}{h} \geq 5.08$. Assim, tomamos $n = 6$ intervalos.

6 Quadraturas de Gauss

A integração numérica baseada nas fórmulas de Newton-Cotes considera pontos fixos igualmente espaçados. Gauss observou que a precisão poderia ser melhorada se as abscissas e os pesos não tiverem restrição.

Assim,

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i),$$

onde agora os pesos $\omega_0, \omega_1, \dots, \omega_n$ e os argumentos x_0, x_1, \dots, x_n são determinados para obter a melhor precisão possível. “Melhor precisão possível” significa que a fórmula é exata para polinômios de grau tão grande quanto possível.

Observe que existem $(2n+2)$ parâmetros: $(n+1)$ pesos e $(n+1)$ abscissas, logo é de esperar que a fórmula deve ser exata para polinômios de grau menor do que ou igual a $(2n+1)$.

Para simplificar, vamos considerar apenas integrais sobre o intervalo $[-1, 1]$. Para calcular $\int_a^b f(x)dx$ fazemos a mudança de variáveis $x = \frac{(b-a)}{2}t + \frac{(b+a)}{2}, t \in [-1, 1]$.

Assim,

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 \underbrace{f\left(\frac{(b-a)}{2}t + \frac{(b+a)}{2}\right)}_{=F(t)} dt = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 F(t)dt.$$

Como o método de quadratura de Gauss é baseado em polinômios ortogonais, vamos precisar de alguma teoria sobre estes polinômios.

7 Polinômios Ortogonais

Dizemos que uma família de polinômios não nulos $p_0(x), p_1(x), \dots, p_n(x), \dots$ é uma família de polinômios ortogonais, relativamente ao produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$, se verifica o seguinte

$$\langle p_i(x), p_j(x) \rangle = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ C_i \neq 0, & i = j. \end{cases}$$

No estudo dos polinômios, utiliza-se produtos internos da forma

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx,$$

onde $\omega(x) \geq 0$ integrável em $[a, b]$ é chamada de função peso.

Os seguintes produtos internos são os mais comumente utilizados na determinação de polinômios ortogonais.

(1i) $\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 f(x) g(x) dx$, isto é, $\omega(x) \equiv 1$ e $a = -1, b = 1$. Este produto interno dará origem aos polinômios de Legendre.

(2i) $\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) g(x) dx$, isto é, $\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ e $a = -1, b = 1$. Este produto interno dará origem aos polinômios de Tchebycheff.

(3i) $\langle f, g \rangle = \int_0^\infty e^{-x} f(x) g(x) dx$, isto é, $\omega(x) = e^{-x}$ e $a = 0, b = \infty$. Este produto interno dará origem aos polinômios de Laguerre.

(4i) $\langle f, g \rangle = \int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} f(x) g(x) dx$, isto é, $\omega(x) = e^{-x^2}$ e $a = -\infty, b = \infty$. Este produto interno dará origem aos polinômios de Hermite.

A seguir veremos como o processo de ortogonalização de Gram-Schmidt pode ser usado para construir polinômios ortogonais.

Teorema 7.1 Consideremos o espaço vetorial $C[a, b]$ munido do produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx.$$

O conjunto de funções polinomiais $\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n, \dots\}$ construídas como se segue, é ortogonal em $C[a, b]$,

$$\varphi_0(x) = 1, \quad \varphi_1(x) = x - B_1, \quad \forall x \in [a, b]$$

onde

$$B_1 = \frac{\int_a^b x \omega(x) |\varphi_0(x)|^2 dx}{\int_a^b \omega(x) |\varphi_0(x)|^2 dx},$$

e para $k \geq 2$

$$\varphi_k(x) = (x - B_k) \varphi_{k-1}(x) - C_k \varphi_{k-2}(x), \quad x \in [a, b],$$

onde

$$B_k = \frac{\int_a^b x \omega(x) |\varphi_{k-1}(x)|^2 dx}{\int_a^b \omega(x) |\varphi_{k-1}(x)|^2 dx}$$

e

$$C_k = \frac{\int_a^b x\omega(x)\varphi_{k-1}(x)\varphi_{k-2}(x)dx}{\int_a^b \omega(x)|\varphi_{k-2}(x)|^2dx}.$$

Exemplo 7.2 (Polinômios de Legendre)

Tomando $\omega(x) = 1$, $a = -1$ e $b = 1$, os polinômios ortogonais construídos usando o Teorema 7.1 são

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}, \quad P_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x,$$

$$P_4(x) = x^4 - \frac{6}{7}x^2 + \frac{3}{35}, \quad P_5(x) = x^5 - \frac{10}{9}x^3 + \frac{5}{21}x.$$

Exemplo 7.3 (Polinômios de Tchebycheff)

Os polinômios de Tchebycheff $\{T_n(x)\}$ são ortogonais em $(-1, 1)$ com relação ao produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 \omega(x)f(x)g(x)dx,$$

onde a função peso é $\omega(x) = (1 - x^2)^{-\frac{1}{2}}$.

Eles podem ser deduzidos pelo método de ortogonalização dado pelo Teorema 7.1, mas esta não é a maneira mais simples de obtê-los.

Exemplo 7.4 (Polinômios de Laguerre)

Os polinômios de Laguerre $L_0(x), L_1(x), L_2(x), \dots$, são obtidos usando o Teorema 7.1, com o produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_0^\infty e^{-x}f(x)g(x)dx,$$

onde a função peso é $\omega(x) = e^{-x}$, $a = 0$ e $b = +\infty$.

Exemplo 7.5 (Polinômios de Hermite)

Os polinômios de Hermite são obtidos usando o Teorema 7.1, com o produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_{-\infty}^\infty e^{-x^2}f(x)g(x)dx,$$

onde a função peso é $\omega(x) = e^{-x^2}$, $a = -\infty$ e $b = +\infty$.

8 Propriedades dos Polinômios Ortogonais

Propriedade 1: Se $p_0(x), p_1(x), \dots, p_n(x)$ são polinômios ortogonais segundo um produto interno, então qualquer polinômio de grau $\leq n$ pode ser escrito como combinação linear destes polinômios. Além disso, $p_n(x)$ é ortogonal a todo polinômio de grau menor do que n .

Propriedade 2: Se $p_0(x), p_1(x), \dots, p_n(x)$ são polinômios ortogonais segundo o produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \omega(x)f(x)g(x)dx,$$

onde $\omega(x) \geq 0$ é contínua em $[a, b]$, então $p_n(x)$ possui raízes reais distintas.

As fórmulas de quadratura de Gauss são baseadas no seguinte Teorema, que é a propriedade mais importante dos polinômios ortogonais.

Teorema 8.1 *Sejam $p_0(x), p_1(x), p_2(x), \dots, p_n(x), p_{n+1}(x) \dots$ polinômios não nulos e ortogonais, segundo o produto interno*

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx,$$

onde $\omega(x) \geq 0$ é contínua em $[a, b]$. Sejam $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ as raízes de $p_{n+1}(x)$. Se $f(x)$ é um polinômio de grau menor do que ou igual a $2n + 1$, então

$$\int_a^b \omega(x) f(x) dx = \sum_{k=0}^n \omega_k f(x_k),$$

onde

$$\omega_k = \int_a^b \omega(x) L_k(x) dx$$

com $P_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) L_k(x)$ é o polinômio interpolador de Lagrange que interpola f nos pontos $x_k, k = 0, 1, \dots, n$.

Demonstração: Sejam x_0, x_1, \dots, x_n as raízes de $p_{n+1}(x)$. Segue que podemos escrever

$$p_{n+1}(x) = a_0(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n).$$

Seja $P_n(x)$ o polinômio interpolador de $f(x)$ nos pontos x_0, x_1, \dots, x_n em $[a, b]$. Como $R_n(x) = f(x) - P_n(x)$ é o erro na interpolação, então

$$f(x) - P_n(x) = R_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!},$$

onde $\xi \in (a, b)$ depende de x . Como $f(x)$ é um polinômio de grau $\leq 2n + 1$, temos que o termo

$$q(x) = \frac{f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!}$$

é um polinômio de grau menor do que ou igual a n . Logo, podemos escrever

$$f(x) - P_n(x) = b_0 p_{n+1}(x) q(x).$$

Segue que

$$\int_a^b \omega(x) [f(x) - P_n(x)] dx = b_0 \int_a^b \omega(x) p_{n+1}(x) q(x) dx.$$

Como $p_{n+1}(x)$ e $q(x)$ são ortogonais, vale a igualdade

$$\int_a^b \omega(x) [f(x) - P_n(x)] dx = 0.$$

Isto é,

$$\begin{aligned}
 \int_a^b \omega(x) f(x) dx &= \int_a^b \omega(x) P_n(x) dx \\
 &= \int_a^b \omega(x) \left[\sum_{k=0}^n L_k(x) f(x_k) \right] dx \\
 &= \sum_{k=0}^n f(x_k) \int_a^b \omega(x) L_k(x) dx \\
 &= \sum_{k=0}^n \omega_k f(x_k).
 \end{aligned}$$

Isto conclui a prova do teorema. \square

9 Quadratura de Gauss-Legendre

Consideremos o produto interno dado por

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 f(x) g(x) dx.$$

Os polinômios ortogonais relativamente a este produto interno são os polinômios de Legendre.

Lembramos que os polinômios de Legendre são dados por

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x),$$

em geral

$$P_{m+1}(x) = \frac{1}{m+1} \{(2m+1)xP_m(x) - mP_{m-1}(x)\}, \quad m = 1, 2, \dots$$

Vamos calcular os pesos $\omega_0, \omega_1, \dots, \omega_n$ e os argumentos t_0, t_1, \dots, t_n no intervalo $[-1, 1]$ pela fórmula

$$\int_{-1}^1 F(t) dt \approx \sum_{i=0}^n \omega_i F(t_i).$$

Esta fórmula é exata para polinômios de grau menor do que ou igual $2n + 1$, veja o Teorema 8.1.

Se $n = 1$, então a fórmula é exata para polinômios de grau menor do que ou igual a 3. Assim,

$$\int_{-1}^1 F(t) dt = \omega_0 F(t_0) + \omega_1 F(t_1)$$

para os polinômios $F(t) = 1, t, t^2, t^3$, respectivamente. Obtemos o seguinte sistema

$$\begin{aligned}
 \omega_0 + \omega_1 &= 2 \\
 \omega_0 t_0 + \omega_1 t_1 &= 0 \\
 \omega_0 t_0^2 + \omega_1 t_1^2 &= \frac{2}{3} \\
 \omega_0 t_0^3 + \omega_1 t_1^3 &= 0.
 \end{aligned}$$

Resolvendo este sistema não-linear, $t_1 = -t_0$ e $t_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}$ e $\omega_0 = \omega_1 = 1$. Logo,

$$\int_{-1}^1 F(t) dt = 1.F\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + 1.F\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right),$$

que é exata para polinômios de grau menor do que ou igual a 3.

Este procedimento pode ser usado para deduzir fórmulas mais gerais. Tomando $F(t) = t^k, k = 0, 1, \dots, 2n+1$ e observando que

$$\int_{-1}^1 F(t) dt = \begin{cases} 0, & \text{se } k \text{ é ímpar,} \\ \frac{2}{k+1}, & \text{se } k \text{ é par,} \end{cases}$$

obtemos o seguinte sistema de $2n+2$ equações:

$$\begin{aligned} \omega_0 + \omega_1 + \cdots + \omega_n &= 2 \\ \omega_0 t_0 + \omega_1 t_1 + \cdots + \omega_n t_n &= 0 \\ \omega_0 t_0^2 + \omega_1 t_1^2 + \cdots + \omega_n t_n^2 &= \frac{2}{3} \\ \dots &= \dots \\ \omega_0 t_0^{2n+1} + \omega_1 t_1^{2n+1} + \cdots + \omega_n t_n^{2n+1} &= 0 \end{aligned}$$

Este sistema tem uma única solução. As soluções $t_k, k = 0, 1, \dots, n$ são as raízes do polinômio $P_{n+1}(x)$ de grau $(n+1)$ pertencente ao conjunto de polinômios ortogonais de Legendre. Estes polinômios dão nome a esta técnica de integração: **Quadratura de Gauss-Legendre**.

Assim, para o cálculo da integral usando a quadratura de Gauss-Legendre precisamos conhecer as raízes dos polinômios de Legendre, que podem ser encontradas com qualquer grau de precisão em tabelas e pacotes de Matemática. Também, precisamos conhecer os pesos ω_i , que podem ser encontrados resolvendo um sistema de equações lineares após as raízes serem encontradas, ou determinamos os pesos ω_i pelos polinômios de Lagrange que interpola os pontos dados pelas raízes.

Existem tabelas listando as raízes e os pesos para serem utilizados na integração de Gauss-Legendre.

A seguir uma tabela contendo as raízes e os pesos dos primeiros polinômios de Legendre. Os dados desta tabela foram calculados usando Maple.

n	t_k Raízes	ω_k Pesos
0	$t_0 = 0.0$	$\omega_0 = 2.0000000$
1	$t_1 = -t_0 = 0.57735027$	$\omega_0 = \omega_1 = 1.0$
2	$t_1 = 0,$ $t_2 = -t_0 = 0.77459667$	$\omega_0 = \omega_2 = 0.555555557$ $\omega_1 = 0.88888888$
3	$t_2 = -t_1 = 0.33998104$ $t_3 = -t_0 = 0.86113631$	$\omega_2 = \omega_1 = 0.23692689$ $\omega_3 = \omega_0 = 0.65214515$
4	$t_4 = -t_0 = 0.90617985$ $t_3 = -t_1 = 0.53846931$ $t_2 = 0.0$	$\omega_4 = \omega_0 = 0.23692689,$ $\omega_3 = \omega_1 = 0.47862867$ $\omega_2 = 0.56888889$

Exercício 9.1 Calcular a integral $\int_0^1 \exp(-x^2) dx$ usando quadratura de Gauss-Legendre com 5 pontos.

Antes de iniciarmos o cálculo da integral devemos mudar a sua variável para integrarmos no intervalo $[-1, 1]$. Fazendo $x = \frac{(b-a)}{2}t + \frac{(b+a)}{2}, t \in [-1, 1]$, obtemos

$$\int_0^1 \exp(-x^2) dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \exp\left(-\frac{(t+1)^2}{4}\right) dt,$$

assim $F(t) = \exp(-\frac{(t+1)^2}{4})$.

Logo,

$$\int_0^1 \exp(-x^2) dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 F(t) dt \approx \frac{1}{2} \sum_{k=0}^4 \omega_k F(t_k),$$

onde ω_k são os pesos e t_k são as raízes do polinômio $P_5(x)$ de Legendre. Veja a Tabela com $n = 4$. Donde,

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 F(t) dt \approx \frac{1}{2} \sum_{k=0}^4 \omega_k F(t_k) = 0.74683019.$$

Exercício 9.2 Calcular a integral $\int_{-1}^1 \frac{\sin^2(t+2)}{t+2} dt$ usando quadratura de Gauss-Legendre com 4 pontos.

Os pesos ω_k e as abscissas t_k estão na tabela (n=3). As abscissas t_k são as raízes do polinômio $P_4(x)$ de Legendre, assim a integral é

$$\int_{-1}^1 \frac{\sin^2(t+2)}{t+2} dt \approx \sum_{k=0}^3 \omega_k F(t_k) = .79482833.$$

10 Quadratura de Gauss-Tchebycheff

Nesta seção vamos calcular a integral

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

Considerando o produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) g(x) dx,$$

obtemos os polinômios de Tchebycheff não nulos e ortogonais segundo este produto interno. Lembramos que os polinômios de Tchebycheff são dados por

$$T_n(x) = \cos[n \arccos(x)], \quad n \geq 0.$$

Vejamos os primeiros polinômios de Tchebycheff:

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x, \quad T_2(x) = 2x^2 - 1, \quad T_3(x) = 4x^3 - 3x, \quad T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1.$$

De acordo com o Teorema 8.1 as abscissas para calcular numericamente a integral são raízes dos polinômios de Tchebycheff. As raízes são dadas em (10.1). Observe mais abaixo que os pesos serão constantes, veja (10.2).

Note que para o cálculo do produto interno vamos precisar da função peso, neste caso, é o fator $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ que deve ser multiplicado pela função $f(x)$ que desejamos calcular a integral.

As fórmulas de Gauss-Tchebycheff também fornecem valor exato da integral para polinômios de grau menor do que ou igual a $2n + 1$, veja Teorema 8.1:

$$\int_{-1}^1 F(t) dt = \sum_{k=0}^n \omega_k F(t_k),$$

onde as abscissas t_k são as raízes do polinômio $T_{n+1}(x)$ de Tchebycheff de grau $(n + 1)$ e calculadas por

$$t_k = \cos \left[\frac{(2k + 1)\pi}{2n + 1} \right], \quad k = 0, 1, 2, \dots, n. \quad (10.1)$$

Os pesos são constantes e iguais a

$$\omega_i = \frac{\pi}{n + 1}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n. \quad (10.2)$$

Logo,

$$\int_{-1}^1 F(t) dt = \frac{\pi}{n + 1} \sum_{k=0}^n F(t_k).$$

Exemplo 10.1 Calcule a integral $\int_0^{10} \exp(-x) dx$ usando quadratura de Gauss-Tchebycheff com quatro pontos (portanto $n = 3$).

Primeiramente, devemos fazer uma mudança de variável para passar a integral para o intervalo $[-1, 1]$. Assim,

$$I = \int_0^{10} \exp(-x) dx = 5 \int_{-1}^1 \exp(-(5t + 5)) dt = 5 \int_{-1}^1 \sqrt{1 - t^2} \exp(-(5t + 5)) \frac{1}{\sqrt{1 - t^2}} dt.$$

Note que a função $F(t)$ é dada por

$$F(t) = \sqrt{1 - t^2} \exp(-(5t + 5)).$$

Assim,

$$I \approx 5 \cdot \frac{\pi}{4} [F(t_0) + F(t_1) + F(t_2) + F(t_3)] = 1.196440816.$$

Aprenda a usar a tabela: Nesta tabela as raízes são simétricas com relação a origem, assim devemos considerar $\pm t_i$. Os dados desta tabela foram calculados usando o Maple.

$N = n + 1$, N número de pontos	$\pm t_i$	ω_i
$N = 2$	0.7071067811	1.570796326
$N = 3$	0.8660254037	1.047197551
	0.0000000000	1.047197551
$N = 4$	0.9238795325	0.7853981633
	0.3826834323	0.7853981633
$N = 5$	0.9510565162	0.6283185307
	0.5877852522	0.6283185307
	0.0	0.6283185307

11 Polinômios ortogonais e aproximação por mínimos quadrados: Aplicação

Consideremos o espaço vetorial $C[a, b]$ das funções reais contínuas em $[a, b]$ munido do produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx,$$

onde $\omega(x) \geq 0$ é uma função integrável com $\omega(x) \neq 0$ para todo subintervalo de $[a, b]$.

Usando o produto interno acima definimos a norma de $f \in C[a, b]$ por

$$\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle}.$$

O produto interno acima introduz no espaço $C[a, b]$ a seguinte noção de distância

$$d(f, g) = \|f - g\|,$$

que torna este espaço um espaço métrico completo.

Sejam $f \in C[a, b]$ e S , subespaço de $C[a, b]$, gerado pelo conjunto das funções $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ linearmente independentes em $C[a, b]$. Queremos determinar coeficientes $a_k \in \mathbb{R}$ tais que o erro

$$\|f - \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k\|$$

seja mínimo. Ou equivalente mente,

$$\left\| f - \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k \right\|^2 = \int_a^b \omega(x) \left[f(x) - \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x) \right]^2 dx$$

seja mínimo. Isto é, os quadrados devem mínimos.

Seja

$$E(a_0, a_1, \dots, a_n) = \int_a^b \omega(x) \left[f(x) - \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x) \right]^2 dx.$$

A fim de minimizar esta função devemos resolver o seguinte sistema de equações não lineares:

$$\frac{\partial E}{\partial a_j} = -2 \int_a^b \omega(x) \left[f(x) - \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x) \right] \varphi_j(x) dx = 0, \quad (11.1)$$

$j = 0, 1, \dots, n$.

Reescrevendo o sistema:

$$\int_a^b \omega(x) f(x) \varphi_j(x) dx = \sum_{k=0}^n a_k \int_a^b \omega(x) \varphi_k(x) \varphi_j(x) dx, \quad j = 0, 1, \dots, n. \quad (11.2)$$

Se as funções $\varphi_k(x)$ podem ser escolhidas ortogonais entre si, então o sistema acima se reduz a

$$\int_a^b \omega(x) f(x) \varphi_j(x) dx = a_j \int_a^b \omega(x) |\varphi_j(x)|^2 dx, \quad j = 0, 1, \dots, n, \quad (11.3)$$

e neste caso

$$a_j = \frac{1}{\alpha_j} \int_a^b \omega(x) f(x) \varphi_j(x) dx,$$

onde

$$\alpha_j = \int_a^b \omega(x) |\varphi_j(x)|^2 dx.$$

Assim obtemos o seguinte resultado.

Teorema 11.1 Seja $C[a, b]$ munido do produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx.$$

Sejam $f \in C[a, b]$ e S subespaço de $C[a, b]$ gerado pelo conjunto das funções $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ ortogonais em $C[a, b]$. A aproximação de f por mínimos quadrados é

$$f^*(x) = \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x),$$

onde $k = 0, 1, \dots, n$ e

$$a_k = \frac{\int_a^b \omega(x) f(x) \varphi_k(x) dx}{\int_a^b \omega(x) |\varphi_k(x)|^2 dx}.$$

(11.4)

$$f^*$$

$$S \overbrace{\hspace{1cm}}^{f^*}$$

Exercício 11.2

1. Use a regra dos trapézios para calcular numericamente as seguinte integrais:
 - a) $\int_1^2 \sin(\sqrt{x}) dx$ com erro menor do que 10^{-2} .
 - b) $\int_1^2 \exp(\sqrt{x}) dx$ com erro menor do que 10^{-2} .
2. Use a regra de Simpson para calcular numericamente as seguinte integrais:
 - a) $\int_1^2 \sin(\sqrt{x}) dx$ com erro menor do que 10^{-4} .
 - b) $\int_1^2 \exp(\sqrt{x}) dx$ com erro menor do que 10^{-4} .
 - c) $\int_0^2 x^2 \exp(-x^2) dx$ usando $h = .25$.
3. Determine os valores de n e de h necessários para aproximar $\int_0^2 \exp(2x) \sin(3x) dx$ com erro menor do que 10^{-4} ,
 - a) usando regra dos trapézios
 - b) usando regra de Simpson
4. Repita o exercício acima com $\int_0^2 x^2 \cos(x) dx$.

5. Use quadratura de Gauss-Legendre com 5 pontos para calcular as seguintes integrais:

a) $\int_1^2 \sin(\sqrt{x})dx$. b) $\int_1^2 \exp(\sqrt{x})dx$.

6. Use quadratura de Gauss-Tchebycheff com 4 pontos para calcular as seguintes integrais:

a) $\int_1^2 \sin(\sqrt{x})dx$. b) $\int_1^2 \exp(\sqrt{x})dx$.

7. Use Gauss-Legendre com 3 pontos para calcular as seguintes integrais e compare com seus valores exatos.

a) $\int_1^{1.5} x^2 \ln(x)dx$. b) $\int_0^{3.5} \frac{2}{x^2 - 4} dx$. c) $\int_3^{3.5} \frac{x}{\sqrt{x^2 - 4}} dx$.

Referências

- [1] S. D. Conte, Elementary Numerical Analysis. MacGraw-Hill, 1965.
- [2] D. Sperandio, Cálculo Numérico. Pearson, 2003.