Integração Numérica

Prof. Doherty Andrade- DMA/UEM[1]

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:

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

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

2 Fórmulas de Newton-Cotes

Nesta secção 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 $f : [a, b] \to \mathbb{R}$, seja n um número natural e $h = \dfrac{b-a}{n}$. Os pontos $x_j = x_0 + jh$, $j = 0, 1, \ldots, n$ são igualmente espaçados.

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

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

e o erro

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

[1] doherty@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,

$$\omega_0 = \int_{x_0}^{x_1} \frac{x-x_1}{x_0-x_1}dx = \frac{h}{2},$$

$$\omega_1 = \int_{x_0}^{x_1} \frac{x-x_0}{x_1-x_0}dx = \frac{h}{2}.$$

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

$$\begin{aligned} E_{Trap} &= \frac{1}{2}\int_{x_0}^{x_1} f''(\alpha)(x-x_0)(x-x_1)dx && (3.1)\\ &= \frac{f''(\beta)}{2}\int_{x_0}^{x_1}(x-x_0)(x-x_1)dx && (3.2)\\ &= -\frac{f''(\beta)h^3}{12}. && (3.3) \end{aligned}$$

Logo,

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

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 coincida com esta função em $a = x_0, x_1 = \dfrac{a+b}{2}$ 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

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

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

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

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

Logo, a fórmula de Simpson é

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

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.

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

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

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 $h = \dfrac{b-a}{n}$ e portanto $x_0 = a, x_i = x_0 + ih,\ i = 0, 1, \ldots, n$ e $x_n = b$, temos que

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

O erro final de uma fórmual 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

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

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

$$\boxed{|E_{Trap}| \leq n\frac{h^3}{12} M_2 = (b-a)\frac{h^2}{12} M_2.} \tag{5.1}$$

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 $h = \dfrac{b-a}{n}$ e portanto $x_0 = a, x_i = x_0 + ih,\ i = 0, 1, \ldots, n$ e $x_n = b$, temos que

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

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

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

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 $\omega_0, \omega_1, \ldots, \omega_n$ e os argumentos $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 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 $\displaystyle\int_a^b f(x)dx$ fazemos a mudança de variáveis $x = \dfrac{(b-a)}{2}t + \dfrac{(b+a)}{2}, t \in [-1,1]$.

Assim,

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

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 $p_0(x), p_1(x), \ldots, p_n(x), \ldots$ 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) $\langle f, g \rangle = \displaystyle\int_{-1}^{1} f(x) g(x) dx$, isto é, $\omega(x) \equiv 1$ e $a = -1, b = 1$. Este produto interno dará origem aos polinômios de Legendre.

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

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

(4i) $\langle f, g \rangle = \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2} f(x) g(x) dx$, isto é, $\omega(x) = \mathrm{e}^{-x^2}$ 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 $\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n, \ldots\}$ construídas como se segue, é ortogonal em $C[a, b]$,

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

onde

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

e para $k \geq 2$

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

onde

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

e

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

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

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

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

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 $L_0(x), L_1(x), L_2(x), \ldots,$ são obtidos usando o Teorema 7.1, com o produto interno

$$\langle f, g\rangle = \int_{0}^{\infty} \mathrm{e}^{-x} f(x)g(x)dx,$$

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

Exemplo 7.5 (Polinômios de Hermite)

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

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

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

8 Propriedades dos Polinômios Ortogonais

Propriedade 1: Se $p_0(x), p_1(x), \ldots, p_n(x)$ 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 $p_0(x), p_1(x), \ldots, p_n(x)$ 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$n$ 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 $p_0(x), p_1(x), p_2(x), \ldots, p_n(x), p_{n+1}(x) \ldots$ 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 $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$ 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 $x_k, k = 0, 1, \ldots, n$.

Demonstração: Sejam $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 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 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 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

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

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

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

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. □

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

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

em geral

$$P_{m+1}(x)=\frac{1}{m+1}\left\{(2m+1)xP_m(x)-mP_{m-1}(x)\right\}, m=1,2,\ldots.$$

Vamos calcular os pesos $\omega_0,\omega_1,\ldots,\omega_n$ e os argumentos $t_0,t_1,\ldots,t_n$ 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,

$$\in t_{-1}^{1}F(t)dt = \omega_0F(t_0)+\omega_1F(t_1)$$

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

$$\begin{aligned}
\omega_0+\omega_1 &= 2\\
\omega_0t_0+\omega_1t_1 &= 0\\
\omega_0t_0^2+\omega_1t_1^2 &= \frac{2}{3}\\
\omega_0t_0^3+\omega_1t_1^3 &= 0.
\end{aligned}$$

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

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

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 $F(t) = t^k, k = 0, 1, \ldots, 2n+1$ 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:

$$\begin{array}{rcl} \omega_0 + \omega_1 + \cdots + \omega_n & = & 2 \\ \omega_0 t_0 + \omega_1 t_1 + \cdots + \omega_n t_n & = & 0 \\ \omega_0 t_0^2 + \omega_1 t_1^2 + \cdots + \omega_n t_n^2 & = & \dfrac{2}{3} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & = & \ldots\ldots \\ \omega_0 t_0^{2n+1} + \omega_1 t_1^{2n+1} + \cdots + \omega_n t_n^{2n+1} & = & 0 \end{array}$$

Este sistema tem uma única solução. As soluções $t_k, k = 0, 1, \ldots, n$ 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

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

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 secção 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

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

Vejamos os primeiros polinômios de Tchebycheff:

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

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:

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

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

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

Os pesos são constantes e iguais a

$$\omega_i = \frac{\pi}{n+1}, \; i = 0, 1, 2, \ldots, n. \tag{10.2}$$

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,

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

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
	0.000000000	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 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)$ 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 equivalentemente,

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

seja mínimo. Isto é, os quadrados devem mínimos.

Seja

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

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

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

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

Reescrevendo o sistema:

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

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

$$\int_a^b \omega(x) f(x) \varphi_j(x) dx = a_j \int_a^b \omega(x) |\varphi_j(x)|^2 dx, \;\; j = 0, 1, \ldots, n, \tag{11.3}$$

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*

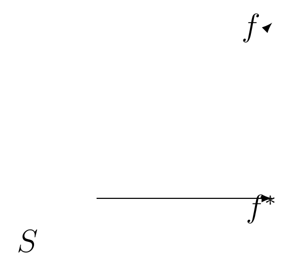
$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx.$$

Sejam $f \in C[a,b]$ e S subespaço de $C[a,b]$ gerado pelo conjunto das funções $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)$ 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 $k = 0, 1, \ldots, n$ e

$$\boxed{a_k = \frac{\displaystyle\int_a^b \omega(x) f(x) \varphi_k(x) dx}{\displaystyle\int_a^b \omega(x) |\varphi_k(x)|^2 dx}.} \tag{11.4}$$



Exercício 11.2

1. Use a regra dos trapézios para calcular numericamente as seguinte integrais:

   a) $\displaystyle\int_1^2 \sin(\sqrt{x}) dx$ com erro menor do que 10^{-2}.

   b) $\displaystyle\int_1^2 \exp(\sqrt{x}) dx$ com erro menor do que 10^{-2}.

2. Use a regra de Simpson para calcular numericamente as seguinte integrais:

   a) $\displaystyle\int_1^2 \sin(\sqrt{x}) dx$ com erro menor do que 10^{-4}.

   b) $\displaystyle\int_1^2 \exp(\sqrt{x}) dx$ com erro menor do que 10^{-4}.

   c) $\displaystyle\int_0^2 x^2 \exp(-x^2) dx$ usando $h = .25$.

3. Determine os valores de n e de h necessários para aproximar $\displaystyle\int_0^2 \exp(2x) \sin(3x)$ com erro menor do que 10^{-4},

   a) usando regra dos trapézios

   b) usando regra de Simpson

4. Repita o exercício acima com $\displaystyle\int_0^2 x^2 \cos(x)$.

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) $\int_0^{.35} \frac{2}{x^2-4}dx.$ 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.