Aula 24
Quadratura Gaussiana.

MS211 - Cálculo Numérico

Marcos Eduardo Valle

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

Introdução

Na aula anterior iniciamos os estudos sobre **quadratura numérica**, que consiste em obter um número real que aproxime o valor da integral definida

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

De um modo geral, numa quadratura numérica definimos

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k) + R_{n+1},$$

em que $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a, b]$ são os nós de integração, $w_0, w_1, \ldots, w_n$ são os pesos e R_{n+1} é o resto da integração.

As fórmulas de Newton-Cotes são obtidas considerando nós de integração igualmente espaçados no intervalo $[a, b]$.

Por exemplo, numa fórmula fechada de Newton-Cotes temos

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b p_n(x)dx + R_{n+1},$$

em que p_n é o polinômio de grau n que interpola f nos pontos

$$x_k = a + hk, \quad \text{com } h = \frac{b-a}{n}, \quad \text{para } k = 0, 1, \ldots, n.$$

Note que a aproximação acima será exata, ou seja $R_{n+1} = 0$, se f for um polinômio de grau menor ou igual a n.

Quadratura Gaussiana

Na quadratura Gaussiana, também aproximamos

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k) = G_n(f),$$

mas os nós de integração $x_0, x_1, \ldots, x_n$ não são mais pontos igualmente espaçados em $[a, b]$.

Especificamente, tanto os nós de integração $x_0, x_1, \ldots, x_n$ como os pesos $w_0, w_1, \ldots, w_n$ são escolhidos de modo que

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \underbrace{\sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k)}_{G_n(f)} + R_{n+1}$$

seja exata para polinômios de grau menor ou igual à $2n+1$, ou seja, $R_{n+1} = 0$ se f for um polinômio de grau $\leq 2n+1$.

Quadratura Gaussiana para $n = 1$

Considerando $n = 1$ e $[a, b] = [-1, +1]$, devemos ter

$$G_1(f) = \int_{-1}^{1} f(t)dt = w_0 f(t_0) + w_1 f(t_1),$$

sempre que f for um polinômio de grau ≤ 3, ou seja,

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} 1dx = w_0 f(t_0) + w_1 f(t_1) \quad &\Longrightarrow \quad w_0 + w_1 = 2,\\
\int_{-1}^{1} xdx = w_0 f(t_0) + w_1 f(t_1) \quad &\Longrightarrow \quad w_0 t_0 + w_1 t_1 = 0,\\
\int_{-1}^{1} x^2 dx = w_0 f(t_0) + w_1 f(t_1) \quad &\Longrightarrow \quad w_0 t_0^2 + w_1 t_1^2 = \frac{2}{3},\\
\int_{-1}^{1} x^3 dx = w_0 f(t_0) + w_1 f(t_1) \quad &\Longrightarrow \quad w_0 t_0^3 + w_1 t_1^3 = 0.
\end{aligned}$$

Temos assim o sistema não-linear com quarto equações e quatro incógnitas:

$$\begin{cases} w_0 + w_1 = 2, \\ w_0 t_0 + w_1 t_1 = 0, \\ w_0 t_0^2 + w_1 t_1^2 = \frac{2}{3}, \\ w_0 t_0^3 + w_1 t_1^3 = 0, \end{cases}$$

cuja solução é

$$t_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad t_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad \text{e} \quad w_0 = w_1 = 1.$$

Note que os pesos w_0 e w_1 são determinados considerando o polinômio linear que interpola f em t_0 e t_1 dados acima, isto é,

$$w_0 = \int_{-1}^{1} L_0(t)dt = \int_{-1}^{1} \frac{t - 1/\sqrt{3}}{-1/\sqrt{3} - 1/\sqrt{3}} dt = 1,$$

$$w_1 = \int_{-1}^{1} L_1(t)dt = \int_{-1}^{1} \frac{t + 1/\sqrt{3}}{1/\sqrt{3} + 1/\sqrt{3}} dt = 1.$$

No caso de um intervalo $[a, b]$ genérico, efetuamos a mudança de variável

$$x = \frac{1}{2}\Big(a + b + t(b - a)\Big).$$

Dessa forma, a quadradura Gaussiana para $I(f) = \int_a^b f(x)dx$ é

$$G_2(f) = \frac{b-a}{2}\left[f\left(\frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2\sqrt{3}}\right)\right].$$

Exemplo 1

Considere a integral definida

$$I(f) = \int_0^1 e^x dx.$$

Estime $I(f)$ usando a quadratura Gaussiana $G_2(f)$ e determine o erro cometido.

Reposta: Pela fórmula anterior, temos

$$\begin{aligned} G_2(f) &= \frac{1}{2}\left[f\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2\sqrt{3}}\right)+f\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2\sqrt{3}}\right)\right] \\ &= \frac{1}{2}\left[e^{(\sqrt{3}-1)/(2\sqrt{3})}+e^{(\sqrt{3}+1)/(2\sqrt{3})}\right] \\ &= \frac{1}{2}\left[e^{0.21132}+e^{0.78868}\right] \\ &= \frac{1}{2}(1.2353+2.2005) = 1.7179. \end{aligned}$$

O erro da quadratura Gaussiana é

$$E_G = |I(f) - G_2(f)| = 3.8545 \times 10^{-4}.$$

Lembre-se que o erro da regra dos trapézios repetida e da regra 1/3 de Simpson repetida, ambas com 10 pontos, foram

$$E_T = 1.4317 \times 10^{-3} \quad \text{e} \quad E_S = 9.5347 \times 10^{-7},$$

respectivamente.

De um modo geral, a quadratura Gaussiana é significativamente mais difícil de ser deduzida que as fórmulas de Newton-Cotes pois os nós de integração e os pesos são obtidos resolvendo um sistema não-linear.

Alternativamente, os nós de integração $x_0, x_1, \dots, x_n$ da quadratura Gaussiana são as raízes de um polinômio q_n de grau n, chamado **polinômio ortogonal**, tal que

$$\int_a^b q_n(x)x^k dx = 0, \quad \forall k = 0, 1, \dots, n-1.$$

O n-ésimo polinômio de Legendre é particularmente apropriado para a quadratura Gaussiana e, nesse caso, a fórmula é conhecida como **quadratura de Gauss-Legendre.**

Os pesos $w_0, w_1, \dots, w_n$ são dados por

$$w_k = \int_a^b L_k(x)dx, \quad L_k(x) = \prod_{i \neq k} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}.$$

Considerações Finais

Na aula de hoje apresentamos quadratura Gausssiana em que

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k) + R_{n+1} = G_n(f) + R_{n+1},$$

em que os nós de integração $x_0, x_1, \ldots, x_n$ e os pesos $w_0, w_1, \ldots, w_n$ são determinados de modo que $R_{n+1} = 0$ se f for um polinômio de grau $\leq 2n+1$.

Em geral, os nós e os pesos da quadratura Gaussiana estão tabulados e, nos computadores atuais, o usuário nem precisa conhece-los!