MS211 - Cálculo Numérico

Integração Numérica
(Slides Modificados de M. E. Valle)

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

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

Assumiremos que f é contínua e, geralmente, assumiremos também que f é suave.

A quadratura numérica é usada quando conhecemos f apenas em alguns pontos ou quando é inviável calcular $I(f)$ analiticamente.

Fórmulas de Quadratura

Sabemos do curso de Cálculo I que a integral definida (de Riemann) de uma função contínua f em $[a, b]$ é

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} f(z_k)\Delta x_k,$$

em que $\Delta x_k = x_k - x_{k-1}$ e z_k são pontos arbitráriamente escolhidos em $[x_{k-1}, x_k]$ para $k = 1, \ldots, n$, sendo

$$a = x_0 \leq x_1 \leq \ldots \leq x_{n-1} \leq x_n = b.$$

Na quadratura numérica, aproximamos $I(f)$ por uma soma finita, na qual f é amostrada em alguns pontos, chamada **fórmula de quadratura.**

Exemplos de Somas de Riemann

Uma soma die Riemann é da forma $\sum_{k=1}^{n} f(z_k)\Delta x_k$, em que $\Delta x_k = x_k - x_{k-1}$ e $z_k \in [x_{k-1}, x_k]$ para $k = 1, \ldots, n$, sendo

$$a = x_0 \leq x_1 \leq \ldots \leq x_{n-1} \leq x_n = b.$$

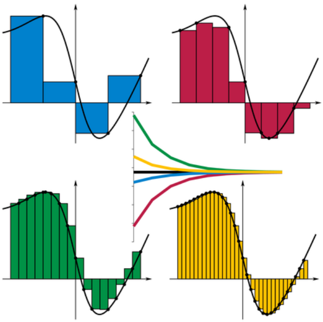


Figura: Somas de Riemann com (retirado de Wikipedia).

Fórmulas de Quadratura

Formalmente, numa fórmula de quadratura de $n+1$ pontos temos

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

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,
- R_{n+1} é o resto.

Dessa forma, numa quadratura numérica definimos

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

Nosso objetivo será escolher os pontos x_k's nos quais f é

Fórmulas de Newton-Cotes

As fórmulas de Newton-Cotes são obtidas usando interpolação polinomial ou interpolação polinomial por partes em pontos $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$ **igualmente espaçados em** $[a, b]$**.**

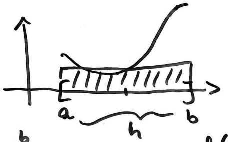
Temos uma **fórmula fechada** de Newton-Cotes se $x_0 = a$ **e** $x_n = b$**.** Caso contrário, temos uma fórmula aberta de Newton-Cotes.

Em outras palavras, numa **fórmula aberta** de Newton-Cotes, temos $x_0, x_1, \ldots, x_n \in (a, b)$.

Exemplo de uma Fórmula Aberta de Newton-Cotes

Regra de Retângulos

(Ponto Médio)



$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \underbrace{h \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right)}_{I_R}$$

Podemos mostrar que

$$E_R = \int_a^b f(x)\,dx - I_R = \frac{h^3}{24} \cdot f''(c)$$

para algum $c \in (a,b)$ se $f \in C^2[a$

$$\Rightarrow |E_R| \leq \frac{h^3}{24} \cdot M$$

A Regra dos Retângulos Repetida

Regra de Retângulos Repetida

Seja

$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n = b$

$x_i - x_{i-1} = h$ para $i = 1, 2, \ldots, n$

$\bar{y}_i = f\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right)$

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{n} h \cdot \bar{y}_i = \underbrace{h \cdot \sum_{i=1}^{n} \bar{y}_i}_{I_{RR}}$$

Suponha que $f \in C^2([a,b])$

$$E_{RR} = \sum_{i=1}^{n} E_{R_i} = \sum_{i=1}^{n} \frac{h^3}{24} f''(c_i)$$

onde $c_i \in (x_{i-1}, x_i)$

$$= \frac{h^3}{24} \sum_{i=1}^{n} f''(c_i) = \frac{h^3}{24} \cdot n \cdot f''(c)$$

para algum $c \in (a, b)$

Fórmulas Fechadas de Newton-Cotes

Seja p_n o polinômio de grau n que interpola f nos pontos

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad \forall k = 0, 1, \ldots, n,$$

igualmente espaçados no intervalo $[a, b]$.

Usando a forma de Lagrange temos

$$p_n(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + \ldots + f(x_n)L_n(x) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k)L_k(x),$$

em que

$$L_k(x) = \prod_{i \neq k} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}.$$

Consequentemente,

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b f(x)dx \\ &\approx \int_a^b p_n(x)dx = \int_a^b \left(\sum_{k=1}^{n} f(x_k)L_k(x) \right) dx \\ &= \sum_{k=1}^{n} f(x_k) \left(\int_a^b L_k(x)dx \right) \\ &= \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k), \end{aligned}$$

em que os pesos $w_0, w_1, \ldots, w_n$ são dados por

$$w_k = \int_a^b L_k(x)dx, \quad \forall k = 0, 1, \ldots, n.$$

Note que os pesos não dependem da função f!

Regra dos Trapézios

A regra dos trapézios é obtida considerando $n = 1$.

Nesse caso, $x_0 = a$ e $x_1 = b$. As bases de Lagrange são

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x_1 - x}{h} \quad \text{e} \quad L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x - x_0}{h},$$

em que $h = x_1 - x_0$. Logo,

$$w_0 = \int_a^b L_0(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \left(\frac{x_1 - x}{h}\right) dx = \frac{h}{2},$$

$$w_1 = \int_a^b L_1(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \left(\frac{x - x_0}{h}\right) dx = \frac{h}{2}.$$

Portanto, na fórmula dos trapézios temos

$$I(f) \approx T_1(f) = \frac{h}{2}\Big(f(x_0) + f(x_1)\Big) = \frac{h}{2}\Big(y_0 + y_1\Big).$$

Ilustração da Regra dos Trapézios

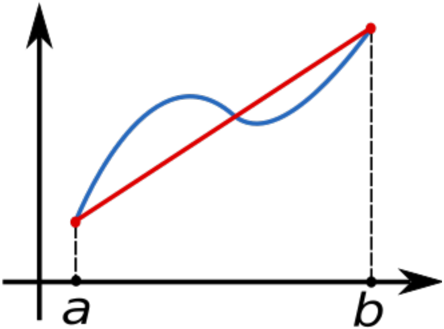


Figura: A integral de f em $[a,b]$ é aproximada pela integral da função linear em $[a,b]$, i.e., $(b-a)\frac{y_0+y_1}{2} = \frac{h}{2}(y_0+y_1)$, sendo $y_i = f(x_i)$ para $i = 0, 1$. (Figura retirada de Wikipedia)

Erro da Regra dos Trapézios

Da interpolação polinomial, sabemos que

$$f(x) = p_1(x) + \frac{1}{2}(x - x_0)(x - x_1)f''(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_1),$$

em que p_1 é o polinômio de grau 1 que interpola f em x_0 e x_1.

Integrando ambos os lados da equação, obtemos

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} p_1(x)dx + \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{2}(x - x_0)(x - x_1)f''(\xi)dx \\ &= T_1(f) + E_T, \end{aligned}$$

em que ξ depende de x e

$$E_T = \frac{1}{2}\int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)f''(\xi)dx.$$

Erro da Regra dos Trapézios

Pelo teorema do valor médio para integrais, temos

$$E_T = \frac{f''(\eta)}{2}\int_{x_0}^{x_1}(x-x_0)(x-x_1)dx, \quad \eta \in (x_0, x_1).$$

Tomando $z = x - x_0$ e $h = x_1 - x_0$, concluímos que

$$\int_{x_0}^{x_1}(x-x_0)(x-x_1)dx = \int_0^h z(z-h)dz = \frac{-h^3}{6}.$$

Portanto,

$$I(f) = T_1(f) - \frac{h^3}{12}f''(c) \Rightarrow E_T = -\frac{h^3}{12}f''(c) \quad \text{para algum } c \in (a,b)$$

$$\Rightarrow |E_T| \leq \frac{h^3}{12}\max_{x_0 \leq x \leq x_1}|f''(x)|,$$

supondo que f'' existe e é contínuo em $[a, b]$.

Regra dos Trapézios Repetida

Note que E_T pode ser grande quando a integral é calculada em um intervalo grande. Para contornar esse problema, podemos fazer uma subdivisão do intervalo $[a, b]$ com pontos

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad \forall k = 0, 1, \ldots, n,$$

igualmente espaçados e aplicar a regra dos trapézios em cada um dos subintervalos $[x_{k-1}, x_k]$, para $k = 1, \ldots, n$.

Equivalentemente, podemos aproximar f por uma função linear por partes Π_1 que interpola f em $x_0, x_1, \ldots, x_n$.

Nesse caso,

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \Pi_1(x)dx = T_n(f).$$

Formalmente, temos a aproximação

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \Pi_1(x)dx = \sum_{k=1}^{n} \int_{x_{k-1}}^{x_k} \Pi_1(x)dx = T_n(f).$$

Considerando a expressão para o resto, obtemos

$$\begin{aligned} I(f) &= \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{h}{2}\Big(f(x_{k-1}) + f(x_k)\Big) - \frac{h^3}{12} f''(\eta_k) \right) \\ &= \frac{h}{2} \sum_{k=1}^{n} \Big(f(x_{k-1}) + f(x_k)\Big) - \frac{h^3}{12} \sum_{k=1}^{n} f''(\eta_k) \\ &= T_n(f) + E_T. \end{aligned}$$

Concluindo a **regra dos trapézios repetida** define

$$I(f) \approx T_n(f) = \frac{h}{2}\Big(y_0 + 2y_1 + 2y_2 + \ldots + 2y_{n-1} + y_n\Big),$$

em que $y_k = f(x_k)$ para $k = 01, 1, \ldots, n$.

Ilustração da Regra dos Trapézios Repetida

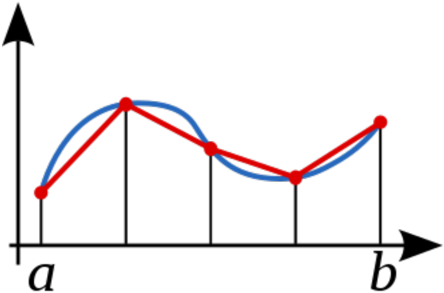


Figura: Aplicação da Regra dos Trapézios Repetida com 4 subintervalos $[x_{k-1}, x_k]$ para $k = 1, ldots, 4$. (Figura retirada de Wikipedia)

Erro da Regra dos Trapézios Repetida

Supondo que f'' é contínua em $[a, b]$, uma generalização do teorema do valor intermediário garante que existe $c \in (a, b)$ tal que

$$E_T = -\frac{h^3}{12}\sum_{k=1}^{n} f''(\eta_k) = -nf''(c)\frac{h^3}{12}.$$

Portanto, o erro da regra dos trapézios repetida aplicada para estimar a integral $\int_a^b f(x)dx$ para uma função com derivada segunda contínua em $[a, b]$ satisfaz

$$|E_T| = |I(f) - T_n(f)| \leq \frac{b-a}{12}h^2 M_2,$$

em que

$$M_2 = \max_{a \leq x \leq b} |f''(\xi)|.$$

Exemplo 1

Considere a integral definida $I(f) = \int_0^1 e^x dx$.

(a) Estime $I(f)$ usando a regra dos trapézios repetida com 10 subintervalos. Determine o erro cometido e compare com a estimativa apresentada anteriormente.

(b) Supondo que desconhecemos o valor de $I(f)$, quantos subintervalos são suficientes para garantir um erro $|I(f) - T_n(f)| < 10^{-3}$?

Resposta: (a) Os pontos $x_k = 0.1k$, para $k = 0, 1, \ldots, 10$, dividem o intervalo $[0, 1]$ em 10 subintervalos. Dessa forma,

$$T_{10}(f) = \frac{0.1}{2}(e^0 + 2e^{0.1} + 2e^{0.2} + \ldots + 2e^{0.8} + 2e^{0.9} + e) = 1.7197,$$

enquanto

$$I(f) = \int_0^1 e^x dx = e^1 - 1 = 1.7183.$$

Portanto, o erro da estimativa é

$$|I(f) - T_{10}(f)| = 0.0014317.$$

Por outro lado, sabemos que

$$M_2 = \max_{a \leq \xi \leq b} |f''(\xi)| = \max_{a \leq \xi \leq b} e^{\xi} = e^1.$$

$$\Rightarrow |I(f) - T_n(f)| \leq \frac{b-a}{12} h^2 M_2 = \frac{(0.1)^2 e}{12} = 0.0022652.$$

De fato, temos $|I(f) - T_{10}(f)| = 0.0014317 < 0.0022652$.

(b) Teremos $|I(f) - T_n(f)| < 10^{-3}$ se

$$\frac{b-a}{12}h^2 M_2 = \frac{e}{12}h^2 < 10^{-3} \quad \Longrightarrow \quad h < \sqrt{\frac{12 \times 10^{-3}}{e}}.$$

Portanto,

$$h = \frac{b-a}{n} \quad \Longrightarrow \quad n = \frac{b-a}{h} = \frac{1}{h} > \sqrt{\frac{e}{12 \times 10^{-3}}} = 15.051,$$

ou seja, um número de subintervalos maior que 15 ($n \geq 16$) é suficiente.

Ilustração da Regra 1/3 de Simpson

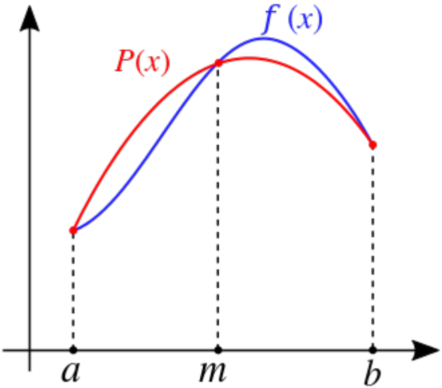


Figura: Aplicação da Regra 1/3 de Simpson. Note que os nós de interpolação são (x_k, y_k) para $k = 0, 1, 2$, sendo $x_0 = a$, $x_2 = b$ e $x_1 = m = \frac{a+b}{2}$. (Figura retirada de Wikipedia)

Regra 1/3 de Simpson

A regra dos trapézios é obtida considerando $n = 2$.

Nesse caso,

$$x_0 = a, \quad x_1 = (a+b)/2 \quad \text{e} \quad x_2 = b.$$

As integrais das bases de Lagrange são

$$w_0 = \int_a^b L_0(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}dx = \frac{h}{3},$$

$$w_1 = \int_a^b L_1(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}dx = \frac{4h}{3},$$

$$w_2 = \int_a^b L_2(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}dx = \frac{h}{3},$$

que podem ser calculadas considerando $z = x - x_0$.

Regra 1/3 de Simpson

Portanto, na fórmula 1/3 de Simpson temos

$$I(f) \approx S_2(f) = \frac{h}{3}\Big(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\Big) = \frac{h}{3}\Big(y_0 + 4y_1 + y_2\Big).$$

Supondo que a derivada $f^{(iv)}$ é contínua em $[a, b]$, pode-se mostrar que o resto na fórmula 1/3 de Simpson satisfaz

$$E_S = I(f) - S_2(f) = -\frac{h^5}{90} f^{iv}(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

Note que o erro da fórmula 1/3 de Simpson depende de h^5!

Regra dos 1/3 de Simpson Repetida

Tal como na regra dos trapézios, o resto E_S da regra 1/3 de Simpson pode ser grande quando a integral é calculada em um intervalo grande.

Para contornar esse problema, subdividimos o intervalo $[a, b]$ com pontos

$$x_i = a + \frac{b-a}{n} i, \quad \forall i = 0, 1, \ldots, n,$$

igualmente espaçados com n par e aplicar a regra 1/3 de Simpson em cada um dos subintervalos $[x_{2k-2}, x_{2k}]$, para $k = 1, \ldots, n/2$.

Equivalentemente, podemos aproximar f por uma função quadrática por partes Π_2 que interpola f em $x_0, x_1, \ldots, x_n$.

Assim, na regra 1/3 de Simpson repetida temos

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \Pi_2(x)dx = \sum_{k=1}^{n/2} \int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} \Pi_2(x)dx = S_n(f).$$

Considerando a expressão para o resto, obtemos

$$\begin{aligned} I(f) &= \sum_{k=1}^{n/2} \left(\frac{h}{3}\Big(f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})\Big) - \frac{h^5}{90} f^{(iv)}(\eta_k) \right) \\ &= \frac{h}{3} \sum_{k=1}^{n/2} \Big(f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})\Big) - \frac{h^5}{90} \sum_{k=1}^{n/2} f^{(iv)}(\eta_k) \\ &= S_n(f) + E_S. \end{aligned}$$

Concluindo, a **regra 1/3 de Simpson repetida** fornece $S_n(f) =$

$$\frac{h}{3}\Big(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \ldots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\Big).$$

Ilustração da Regra 1/3 de Simpson Repetida

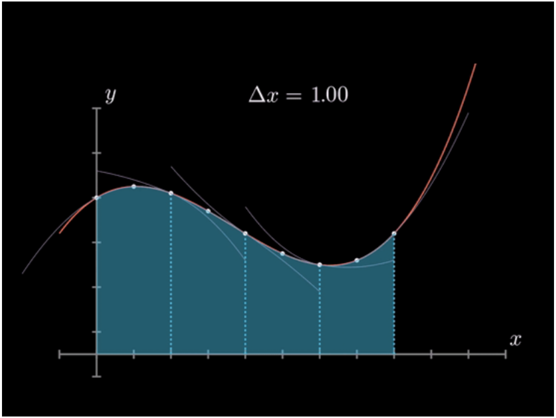


Figura: Aplicação da Regra 1/3 de Simpson Repetida com 4 Subintervalos e $n = 8$. Note que os nós de interpolação são (x_k, y_k) para $k = 0, 1, \ldots, 8$. (Figura retirada de Wikipedia)

Erro da Regra 1/3 de Simpson Repetida

Supondo que $f^{(iv)}$ é contínua em $[a, b]$, uma generalização do teorema do valor intermediário garante que existe $\xi \in (a, b)$ tal que

$$E_S = -\frac{h^5}{90} \sum_{k=1}^{n/2} f^{(iv)}(\eta_k) = -\frac{n}{2} f^{(iv)}(\xi) \frac{h^5}{90} = -n f^{(iv)}(\xi) \frac{h^5}{180}.$$

Portanto, o erro da regra 1/3 de Simpson repetida para estimar a integral $\int_a^b f(x)dx$ de uma função com derivada $f^{(iv)}$ contínua em $[a, b]$ satisfaz

$$|E_S| = |I(f) - S_n(f)| \leq \frac{b-a}{180} h^4 M_4,$$

em que

$$M_4 = \max_{a \leq \xi \leq b} |f^{(iv)}(\xi)|.$$

Exemplo 2

Considere a integral definida $I(f) = \int_0^1 e^x dx$.

(a) Estime $I(f)$ usando a regra 1/3 de Simpson repetida com 5 subintervalos da forma $[x_{2k-2}, x_{2k}]$, sendo $k = 1, 2, \ldots, 5$. Determine o erro cometido e compare com a estimativa apresentada anteriormente.

(b) Supondo que desconhecemos o valor de $I(f)$, quantos subintervalos, quer dizer quantas aplicações da regra 1/3 de Simpson, garantem um erro $|I(f) - S_n(f)| < 10^{-3}$?

Resposta: (a) Os pontos $x_i = 0.1i$, para $i = 0, 1, \ldots, 10$ são igualmente esapçados em $[0, 1]$ e $h = x_i - x_{i-1} = 0.1$ para $i = 1, \ldots, 10$. Dessa forma,

$$S_{10}(f) = \frac{0.1}{3}(e^0 + 4e^{0.1} + 2e^{0.2} + \ldots + 2e^{0.8} + 4e^{0.9} + e) = 1.7183,$$

enquanto

$$I(f) = \int_0^1 e^x dx = e^1 - 1 = 1.7183.$$

Usando uma precisão maior, concluímos que o erro da estimativa é

$$|I(f) - S_{10}(f)| = 9.5347 \times 10^{-7}.$$

Por outro lado, sabemos que

$$M_4 = \max_{a \leq \xi \leq b} |f^{(iv)}(\xi)| = \max_{a \leq \xi \leq b} e^{\xi} = e^1.$$

$$\Rightarrow |I(f) - S_{10}(f)| \leq \frac{b-a}{180} h^4 M_4 = \frac{(0.1)^4 e}{180} = 1.5102 \times 10^{-6}.$$

(b) Teremos $|I(f) - S_n(f)| < 10^{-3}$ se

$$\frac{b-a}{180}h^4 M_4 = \frac{e}{180}h^4 < 10^{-3} \quad \Longrightarrow \quad h < \sqrt[4]{\frac{180 \times 10^{-3}}{e}}.$$

Portanto,

$$h = \frac{b-a}{n} \quad \Longrightarrow \quad n > \frac{b-a}{h} = \sqrt[4]{\frac{e}{180 \times 10^{-3}}} = 1.9713.$$

Como n deve ser par, $n \geq 2$ é suficiente. Portanto, basta aplicar a regra 1/3 de Simpson uma vez.

Teorema Geral do Erro

Teorema 3

Sejam f uma função com derivada $f^{(n+2)}$ contínua em $[a, b]$ e p_n o polinômio que interpola f em pontos igualmente espaçados $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ do intervalo $[a, b]$. Nesse caso, o resto $E_n = I(f) - \int_a^b p_n(x)dx$ da fórmula de Newton-Cotes fechada satisfaz

- *Se n é ímpar:*

$$E_n = \frac{h^{n+2} f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_0^n z(z-1)\ldots(z-n)dz, \quad \xi \in [a, b].$$

- *Se n é par:*

$$E_n = \frac{h^{n+3} f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_0^n \left(z - \frac{n}{2}\right) z(z-1)\ldots(z-n)dz, \quad \xi \in [a, b].$$

Considerações Finais

Na aula de hoje apresentamos fórmulas para estimar numericamente uma integral definida $\int_a^b f(x)dx$.
Especificamente, apresentamos as fórmulas de Newton-Cotes, em que

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_n(x)dx \quad \text{ou} \quad \int_a^b f(x)dx = \int_a^b \Pi_m(x)dx.$$

Em particular, vimos

- A regra dos trapézios repetida é obtida aproximando f por Π_1 em $x_0, x_1, \ldots, x_n$.
- A regra 1/3 de Simpsion repetida é obtida aproximando f por Π_2 em $x_0, x_1, \ldots, x_n$ com n par.

Muito grato pela atenção!

MS211 - Cálculo Numérico

Quadratura Gaussiana
(Slides Modificados de M. E. Valle)

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 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 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

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

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

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

ou seja, $R_{n+1} = 0$, se f for um polinômio de grau $\leq 2n + 1$ em

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

Quadratura Gaussiana para $n = 1$ e $[a, b] = [-1, 1]$

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

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

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

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

Quadratura Gaussiana para $n = 1$ e $[a, b] = [-1, 1]$

Obtemos um sistema não-linear com 4 equações e 4 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

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

Portanto, obtemos a aproximação

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt \approx G_1(f) = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

Quadratura Gaussiana versus Regra dos Trapézios

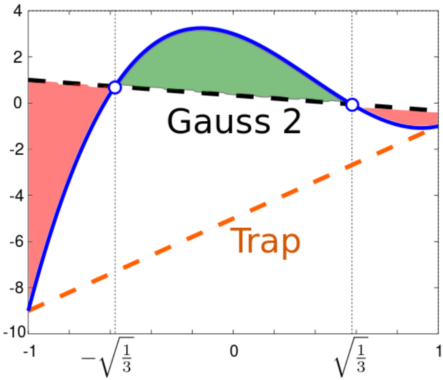


Figura: Comparação visual entre a quadratura Gaussiana e a regra dos trapézios. (Figura retirada de Wikipedia)

Quadratura Gaussiana para $n = 1$ e $[a, b]$ arbitrário

No caso de um intervalo $[a, b]$ arbitrário, efetuamos a mudança de variável, quer dizer, aplicamos a regra de substituição. Lembre-se que

$$\int_{\varphi(-1)=a}^{\varphi(1)=b} f(x)dx = \int_{-1}^{1} f(\varphi(t))d\varphi(t) = \int_{-1}^{1} f(\varphi(t))\varphi'(t)dt$$

Escolhendo

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

obtemos $\varphi(-1) = a$ e $\varphi(1) = b$ como desejado e $\varphi'(t) = \frac{b-a}{2}$. Dessa forma, a quadradura Gaussiana para $I(f) = \int_a^b f(x)dx$ é

$$G_1(f) = \frac{b-a}{2}\left[f\left(\frac{1}{2}\left(a+b-\frac{b-a}{\sqrt{3}}\right)\right) + f\left(\frac{1}{2}\left(a+b+\frac{b-a}{\sqrt{3}}\right)\right)\right].$$

Quadratura Gaussiana versus Regra 1/3 de Simpson

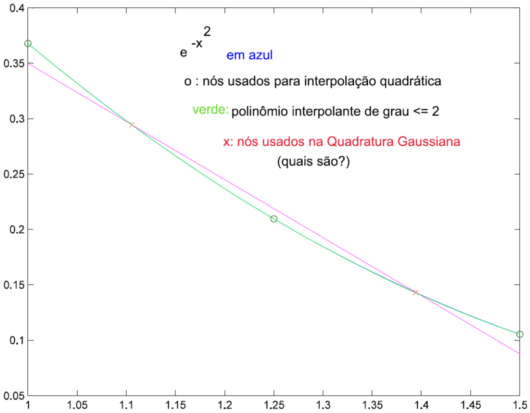


Figura: Comparação visual entre a quadratura Gaussiana e a regra 1/3 de Simpson.

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 11 pontos $x_0,\ldots,x_{10}$, foram respectivamente

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

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 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 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!

Muito grato pela atenção!