Integração Numérica

Prof. Afonso Paiva

Departamento de Matemática Aplicada e Estatística
Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação
USP – São Carlos

Métodos Numéricos e Computacionais II – SME0306

Introdução

Objetivo: dada uma função real $f \in \mathcal{C}([a,b])$, desejamos calcular

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx}$$

Introdução

Objetivo: dada uma função real $f \in \mathcal{C}([a,b])$, desejamos calcular

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx}$$

1. $f(x)$ pode ser difícil (ou impossível) de integral, como por exemplo:

$$f(x) = \frac{x}{\left(b^{\frac{3}{2}} - x^{\frac{3}{2}}\right)^{\frac{2}{3}}}$$

Introdução

Objetivo: dada uma função real $f \in \mathcal{C}([a,b])$, desejamos calcular

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx}$$

1. $f(x)$ pode ser difícil (ou impossível) de integral, como por exemplo:

$$f(x) = \frac{x}{\left(b^{\frac{3}{2}} - x^{\frac{3}{2}}\right)^{\frac{2}{3}}}$$

2. $f(x)$ pode ser uma função amostrada (dada por uma tabela)

Introdução

Objetivo: dada uma função real $f \in \mathcal{C}([a,b])$, desejamos calcular

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx}$$

Podemos usar a propriedade aditiva de integrais. Para $a < c < b$, temos:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^c f(x)\,dx + \int_c^b f(x)\,dx$$

Introdução

Objetivo: dada uma função real $f \in \mathcal{C}([a,b])$, desejamos calcular

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx}$$

Podemos usar a propriedade aditiva de integrais. Para $a < c < b$, temos:

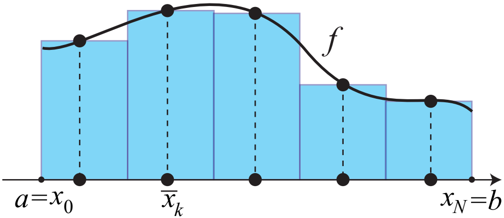
$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^c f(x)\,dx + \int_c^b f(x)\,dx$$

Podemos subdividir um intervalo $[a,b]$ em vários sub-intervalos, integrar $f(x)$ nesses sub-intervalos e finalmente somar todos esses valores para obter o resultado final!

Regra do Ponto Médio

Dados $f(x) \in \mathcal{C}([a,b])$ e N sub-intervalos em $[a,b]$ de comprimento $h = (b-a)/N$ com $x_0 = a$ e $x_N = b$, temos:

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x)\,dx \approx h \sum_{k=1}^{N} f(\bar{x}_k) \quad \text{com} \quad \bar{x}_k = \frac{x_{k-1} + x_k}{2}$$



Regra do Ponto Médio

Exercício 1

Faça uma função em MATLAB que implemente a Regra do Ponto Médio e que tenha o seguinte protótipo: `I = midpoint(fun,a,b,N)`.

Fórmulas de Quadratura

Estratégia

- Aproximar $\int_a^b f(x)dx$ usando combinação linear de valores de $f(x)$.

$$\boxed{\int_a^b f(x)\, dx \approx \sum_{k=0}^{N} A_k f(x_k)}$$

- x_k: são chamados de pontos de quadratura
- A_k: sao conhecidos como coeficientes da quadratura

Fórmulas de Quadratura

Erro de Aproximação

Erro de Aproximação

$$R(f) = \int_a^b f(x)\,dx - \sum_{k=0}^{N} A_k f(x_k)$$

Definição (grau de precisão)

O grau de precisão de uma formula de quadratura é o maior inteiro m tal que $R(x^k) = 0, k = 0, \ldots, m$ e $R(x^{m+1}) \neq 0$.

Fórmulas de Quadratura

Exemplo 1

Seja $[a, b] = [0, 2]$ e sejam $x_0 = 0$, $x_1 = 1$ e $x_2 = 1.5$. Determinar fórmula de quadratura que seja exata para todo polinômio de grau ≤ 2.

Fórmulas de Quadratura

Exemplo 1

Seja $[a, b] = [0, 2]$ e sejam $x_0 = 0$, $x_1 = 1$ e $x_2 = 1.5$. Determinar fórmula de quadratura que seja exata para todo polinômio de grau ≤ 2.

Solução: Exigimos que a fórmula (precisamos determinar os pesos):

$$\int_0^2 f(x)\,dx \approx A_0 \cdot f(x_0) + A_1 \cdot f(x_1) + A_2 \cdot f(x_2)\,,$$

seja **exata** para $f(x) = 1$, $f(x) = x$ e $f(x) = x^2$.

Fórmulas de Quadratura

Exemplo 1

Seja $[a,b] = [0,2]$ e sejam $x_0 = 0$, $x_1 = 1$ e $x_2 = 1.5$. Determinar fórmula de quadratura que seja exata para todo polinômio de grau ≤ 2.

Solução: Exigimos que a fórmula (precisamos determinar os pesos):

$$\int_0^2 f(x)\,dx \approx A_0 \cdot f(x_0) + A_1 \cdot f(x_1) + A_2 \cdot f(x_2)\,,$$

seja **exata** para $f(x) = 1$, $f(x) = x$ e $f(x) = x^2$. Portanto:

$$2 = \int_0^2 1\,dx = A_0 + A_1 + A_2$$

$$2 = \int_0^2 x\,dx = A_0 \cdot 0 + A_1 \cdot 1 + A_2 \cdot \frac{3}{2}$$

$$\frac{8}{3} = \int_0^2 x^2\,dx = A_0 \cdot 0 + A_1 \cdot 1 + A_2 \cdot \frac{9}{4}$$

Fórmulas de Quadratura

Exemplo 1

Seja $[a, b] = [0, 2]$ e sejam $x_0 = 0$, $x_1 = 1$ e $x_2 = 1.5$. Determinar fórmula de quadratura que seja exata para todo polinômio de grau ≤ 2.

Solução: Exigimos que a fórmula (precisamos determinar os pesos):

$$\int_0^2 f(x)\,dx \approx A_0 \cdot f(x_0) + A_1 \cdot f(x_1) + A_2 \cdot f(x_2)\,,$$

seja **exata** para $f(x) = 1$, $f(x) = x$ e $f(x) = x^2$. Portanto:

$$2 = \int_0^2 1\,dx = A_0 + A_1 + A_2$$

$$2 = \int_0^2 x\,dx = A_0 \cdot 0 + A_1 \cdot 1 + A_2 \cdot \frac{3}{2}$$

$$\frac{8}{3} = \int_0^2 x^2\,dx = A_0 \cdot 0 + A_1 \cdot 1 + A_2 \cdot \frac{9}{4}$$

Logo, resolvendo o sistema linear temos $A_0 = \frac{4}{9}$, $A_1 = \frac{2}{3}$ e $A_2 = \frac{8}{9}$.

Fórmulas de Newton-Cotes

Estratégia

- Calcular $\int_a^b f(x)dx$ através de uma aproximação $f(x)$ pelo polinômio de interpolação $P_n(x)$.

Fórmulas de Newton-Cotes

Estratégia

- Calcular $\int_a^b f(x)dx$ através de uma aproximação $f(x)$ pelo polinômio de interpolação $P_n(x)$.

Dados $(n+1)$ pontos igualmente espaçados:

- $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$
- espaçamento $h = (b-a)/n$.

Fórmulas de Newton-Cotes

Estratégia

- Calcular $\int_a^b f(x)dx$ através de uma aproximação $f(x)$ pelo polinômio de interpolação $P_n(x)$.

Dados $(n+1)$ pontos igualmente espaçados:

- $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$
- espaçamento $h = (b-a)/n$.

Seja uma $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ (conhecida ou não) cujos valores:

- $y_i = f(x_i)$, para $i = 0, \ldots, n$, são conhecidos.

Fórmulas de Newton-Cotes

Pela fórmula de quadratura usando a forma de Lagrange para $P_n(x)$, temos:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx \approx \int_{x_0}^{x_n} P_n(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} y_k \underbrace{\int_{x_0}^{x_n} \ell_k(x)\,dx}_{A_k}$$

Fórmulas de Newton-Cotes

Pela fórmula de quadratura usando a forma de Lagrange para $P_n(x)$, temos:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx \approx \int_{x_0}^{x_n} P_n(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} y_k \underbrace{\int_{x_0}^{x_n} \ell_k(x)\,dx}_{A_k}$$

Fazendo mudança de variável $x = x_0 + th$ (note que, $x_i = x_0 + ih$), logo:

$$dx = h\,dt \quad \text{e quando} \quad \begin{cases} x = x_0 & , t = 0 \\ x = x_n & , t = n \end{cases} . \qquad \text{Segue que,}$$

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} y_k\, h \underbrace{\int_0^n \lambda_k(t)\,dt}_{C_k^n} = \sum_{k=0}^{n} y_k\, h\, C_k^n}$$

Fórmulas de Newton-Cotes

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} y_k\, h\, C_k^n}$$

Fórmulas de Newton-Cotes

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} y_k\, h\, C_k^n}$$

Em que (Exercício 1 – Parte I da Lista 1),

$$C_k^n = \int_0^n \lambda_k(t)\,dx \qquad \text{com} \qquad \lambda_k(t) = \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n} \frac{t-i}{k-i}$$

Regra do Trapézio

1° caso: para $n = 1$.

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{1} y_k\,h\,C_k^1 = y_0\,h\,C_0^1 + y_1\,h\,C_1^1$$

Regra do Trapézio

1° caso: para $n = 1$.

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{1} y_k\, h\, C_k^1 = y_0\, h\, C_0^1 + y_1\, h\, C_1^1$$

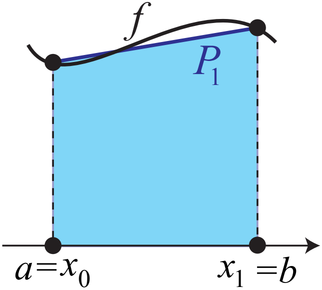
$$C_0^1 = \int_0^1 \lambda_0(t)\,dt = \int_0^1 \frac{t-1}{0-1}\,dt = \frac{1}{2}$$

$$C_1^1 = \int_0^1 \lambda_1(t)\,dt = \int_0^1 \frac{t-0}{1-0}\,dt = \frac{1}{2}$$

Regra do Trapézio

1° caso: para $n = 1$.

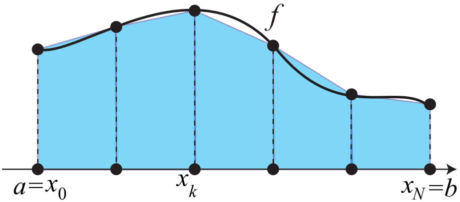
$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}(y_0 + y_1)$$



Regra do Trapézio Composta

Dados N sub-intervalos em $[a, b]$ de comprimento $h = (b - a)/N$ com $x_0 = a$ e $x_N = b$, temos:

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_N} f(x)\,dx &\approx \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2\,\left(f(x_1) + \cdots + f(x_{N-1})\,\right) + f(x_N)\right] \\ &= \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_N)\,\right] + h\sum_{k=1}^{N-1} f(x_k)\end{aligned}$$



Fórmulas de Quadratura

Exemplo 2

Calcule uma aproxição para a integral

$$I = \int_2^4 \exp(x)\,dx = \exp(4) - \exp(2) = 47.2091\,,$$

usando a Regra do Trapézio com 5 pontos igualmente espaçados.

Fórmulas de Quadratura

Exemplo 2

Calcule uma aproxição para a integral

$$I = \int_2^4 \exp(x)\,dx = \exp(4) - \exp(2) = 47.2091\,,$$

usando a Regra do Trapézio com 5 pontos igualmente espaçados.

Solução: Primeiro vamos calcular $h = (b-a)/N = (4-2)/(5-1) = 0.5$

Fórmulas de Quadratura

Exemplo 2

Calcule uma aproxição para a integral

$$I = \int_2^4 \exp(x)\,dx = \exp(4) - \exp(2) = 47.2091\,,$$

usando a Regra do Trapézio com 5 pontos igualmente espaçados.

Solução: Primeiro vamos calcular $h = (b-a)/N = (4-2)/(5-1) = 0.5$

$$I \approx \frac{h}{2}[f(x_0) + 2(f(x_1) + f(x_2) + f(x_3)) + f(x_4)]$$

Fórmulas de Quadratura

Exemplo 2

Calcule uma aproxição para a integral

$$I = \int_2^4 \exp(x)\,dx = \exp(4) - \exp(2) = 47.2091\,,$$

usando a Regra do Trapézio com 5 pontos igualmente espaçados.

Solução: Primeiro vamos calcular $h = (b-a)/N = (4-2)/(5-1) = 0.5$

$$\begin{aligned} I &\approx \frac{h}{2}[f(x_0) + 2(f(x_1) + f(x_2) + f(x_3)) + f(x_4)] \\ &= \frac{1}{4}[\exp(2) + 2(\exp(2.5) + \exp(3) + \exp(3.5)) + \exp(4)] \\ &= 48.1885 \end{aligned}$$

Regra do Trapézio

`I = trapz(xi,yi)`: calcula a integral usando regra do trapézio;
`% xi,yi`: pontos dados;

Refazendo o exemplo anterior no MATLAB:

```
xi = linspace(2,4,5);
yi = exp(xi);
I = trapz(xi,yi);
```

Regra do 1/3 de Simpson

2° caso: para $n = 2$.

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{2} y_k\,h\,C_k^2 = y_0\,h\,C_0^2 + y_1\,h\,C_1^2 + y_2\,h\,C_2^2$$

Regra do 1/3 de Simpson

2° caso: para $n = 2$.

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{2} y_k\,h\,C_k^2 = y_0\,h\,C_0^2 + y_1\,h\,C_1^2 + y_2\,h\,C_2^2$$

$$C_0^2 = \int_0^2 \lambda_0(t)\,dt = \int_0^2 \frac{(t-1)(t-2)}{(0-1)(0-2)}\,dt = \frac{1}{3}$$

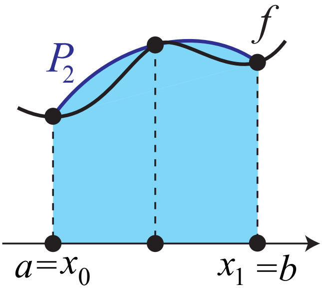
$$C_1^2 = \int_0^2 \lambda_1(t)\,dt = \int_0^2 \frac{(t-0)(t-2)}{(1-0)(1-2)}\,dt = \frac{4}{3}$$

$$C_2^2 = \int_0^2 \lambda_2(t)\,dt = \int_0^2 \frac{(t-0)(t-1)}{(2-0)(2-1)}\,dt = \frac{1}{3}$$

Regra do 1/3 de Simpson

2° caso: para $n = 2$.

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2)$$



Regra do 1/3 de Simpson Composta

Dados $2N$ sub-intervalos em $[a, b]$ de comprimento $h = (b - a)/2N$ com $x_0 = a$ e $x_{2N} = b$, temos:

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

Regra do 1/3 de Simpson Composta

Dados $2N$ sub-intervalos em $[a, b]$ de comprimento $h = (b - a)/2N$ com $x_0 = a$ e $x_{2N} = b$, temos:

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

MATLAB – Regra do 1/3 de Simpson

```
function I = simpson13(xi,yi)
% xi: igualmente espacados e qtdade impar de pontos

h = xi(2)-xi(1);
I = 4*sum(yi(2:2:end-1)) + 2*sum(yi(3:2:end-2));
I = h*(yi(1) + I + yi(end))/3 ;
```

Regra do 1/3 de Simpson *Revisitada*

Conhecida a função $f(x)$. Dados N sub-intervalos em $[a, b]$ de comprimento $h = (b - a)/N$ com $x_0 = a$ e $x_N = b$, temos:

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_N} f(x)\,dx \approx \frac{h}{6}\sum_{k=1}^{N}\left[f(x_{k-1}) + 4f(\bar{x}_k) + f(x_k)\right],}$$

com $\bar{x}_k = (x_{k-1} + x_k)/2$.

MATLAB – Regra do 1/3 de Simpson *Revisitada*

```
function I = simpson13f(fun,a,b,N)
% fun: funcao a ser integrada
% [a,b]: intervalo dado
% N: quantidade de sub-intervalos

h = (b-a)/N;
xi = linspace(a,b,N+1);
yi = fun(xi);
yi(2:end-1) = 2*yi(2:end-1);
I = h*sum(yi)/6;
xi = linspace(a+h/2,b-h/2,N);
yi = fun(xi);
I = I + 2*h*sum(yi)/3;
```

Aplicação

As notas dos alunos da disciplina de cálculo numérico tem distribuição normal:

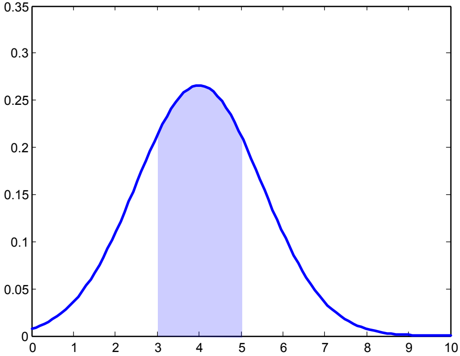
$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right)$$

onde m é a média das notas e σ o desvio padrão.

Se a média for 4.0 e o desvio padrão 1.5, qual a probabilidade de uma aluno sorteado aleatoriamente fique de REC?

Aplicação

A probabilidade é dada por $\mathbb{P}(3 \leq x \leq 5) = \int_3^5 f(x)\,dx$.




```
m = 4; sigma = 1.5;
f = @(x)(exp(-(x-m).^2/(2*sigma^2))/(sigma*sqrt(2*pi)));
prob = simpson13f(3,5,f,30);
```

Fórmulas de Newton-Cotes

Estimativa de Erro

Seja f uma função integrável em $[a, b]$, temos que uma estimativa do erro de integração é dado por:

Regra do Trapézio

$$|R(f)| \leq \frac{b-a}{12} h^2 \|f''\|_\infty$$

Regra 1/3 de Simpson

$$|R(f)| \leq \frac{b-a}{180} h^4 \|f^{(4)}\|_\infty$$

Observação: lembrando que $\|f\|_\infty = \max_{t \in [a,b]} \{|f(t)|\}$.

Fórmulas de Newton-Cotes

Estimativa de Erro

Exemplo 2

Determine o menor numero de sub-intervalos em que podemos dividir $[0,1]$ para obter uma aproximação com 2 casas decimais corretas de $\int_0^1 x\exp(x)dx$ usando a Regra do Trapézio .

Fórmulas de Newton-Cotes

Estimativa de Erro

Exemplo 2

Determine o menor numero de sub-intervalos em que podemos dividir $[0, 1]$ para obter uma aproximação com 2 casas decimais corretas de $\int_0^1 x \exp(x) dx$ usando a Regra do Trapézio .

Solução: Primeiro vamos calcular $\|f''\|_\infty$:

$$f''(x) = (2 + x) \exp(x) \Rightarrow \|f''\|_\infty = |f''(1)| \approx 8.1548 \, .$$

Fórmulas de Newton-Cotes

Estimativa de Erro

Exemplo 2

Determine o menor numero de sub-intervalos em que podemos dividir $[0, 1]$ para obter uma aproximação com 2 casas decimais corretas de $\int_0^1 x \exp(x) dx$ usando a Regra do Trapézio .

Solução: Primeiro vamos calcular $\|f''\|_\infty$:

$$f''(x) = (2 + x) \exp(x) \Rightarrow \|f''\|_\infty = |f''(1)| \approx 8.1548 \,.$$

Logo,

$$|R(f)| \leq \frac{b-a}{12} h^2 \|f''\|_\infty < 10^{-2} \Rightarrow \frac{h^2}{12} 8.1548 < 10^{-2} \Rightarrow h < 0.1212 \,.$$

Fórmulas de Newton-Cotes

Estimativa de Erro

Exemplo 2

Determine o menor numero de sub-intervalos em que podemos dividir $[0,1]$ para obter uma aproximação com 2 casas decimais corretas de $\int_0^1 x \exp(x) dx$ usando a Regra do Trapézio .

Solução: Primeiro vamos calcular $\|f''\|_\infty$:

$$f''(x) = (2+x)\exp(x) \Rightarrow \|f''\|_\infty = |f''(1)| \approx 8.1548 \,.$$

Logo,

$$|R(f)| \leq \frac{b-a}{12} h^2 \|f''\|_\infty < 10^{-2} \Rightarrow \frac{h^2}{12} 8.1548 < 10^{-2} \Rightarrow h < 0.1212 \,.$$

Portanto,

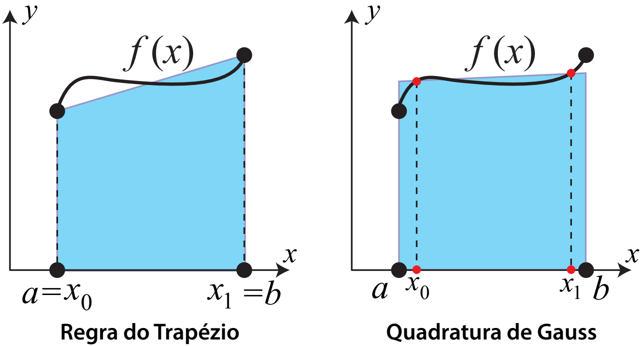
$$N = \frac{b-a}{h} > \frac{1}{0.1212} \approx 8.25 \Rightarrow N = 9 \,.$$

Quadratura de Gauss

As fórmulas de Newton-Cotes usam valores de $y_i = f(x_i)$ com nós x_i igualmente espaçados. Porém, nas fórmulas generalizadas isso pode reduzir a precisão da aproximação de $I_f = \int_a^b f(x)\,dx$.

Quadratura de Gauss

As fórmulas de Newton-Cotes usam valores de $y_i = f(x_i)$ com nós x_i igualmente espaçados. Porém, nas fórmulas generalizadas isso pode reduzir a precisão da aproximação de $I_f = \int_a^b f(x)\,dx$.



A Regra do Trapézio não fornece a melhor reta para aproximar I_f!!!

Quadratura de Gauss

A Quadratura de Gauss escolhe os nós de uma maneira ótima, isto é, os nós $\xi_0, \ldots, \xi_n \in [a, b]$ e os coeficientes (*pesos*) $\omega_0, \ldots, \omega_n$ são escolhidos de forma a minimizar o erro da aproximação:

$$\boxed{I_f = \int_a^b f(x)\, dx \approx \sum_{k=0}^{n} \omega_k\, f(\xi_k)\,.}$$

Quadratura de Gauss

A Quadratura de Gauss escolhe os nós de uma maneira ótima, isto é, os nós $\xi_0, \ldots, \xi_n \in [a, b]$ e os coeficientes (*pesos*) $\omega_0, \ldots, \omega_n$ são escolhidos de forma a minimizar o erro da aproximação:

$$I_f = \int_a^b f(x)\, dx \approx \sum_{k=0}^{n} \omega_k\, f(\xi_k)\,.$$

Para garantir essa precisão, vamos assumir que a melhor escolha para esses $2n + 2$ valores é aquela que fornece resultado exato quando $f \in \mathcal{P}_m$, onde m é o maior grau de precisão.

Quadratura de Gauss

A Quadratura de Gauss escolhe os nós de uma maneira ótima, isto é, os nós $\xi_0, \ldots, \xi_n \in [a, b]$ e os coeficientes (*pesos*) $\omega_0, \ldots, \omega_n$ são escolhidos de forma a minimizar o erro da aproximação:

$$I_f = \int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} \omega_k f(\xi_k)\,.$$

Para garantir essa precisão, vamos assumir que a melhor escolha para esses $2n+2$ valores é aquela que fornece resultado exato quando $f \in \mathcal{P}_m$, onde m é o maior grau de precisão.

Se $f \in \mathcal{P}_{2n+1} \Rightarrow f$ possui $2n+2$ parâmetros a serem determinados. Portanto, é razoável usar $m = 2n+1$ para que aproximação seja exata.

Quadratura de Gauss

Exemplo 3

Como determinar os nós ξ_k e os coeficientes ω_k quando $n = 1$ no intervalo de integração $[-1, 1]$?

Quadratura de Gauss

Exemplo 3

Como determinar os nós ξ_k e os coeficientes ω_k quando $n = 1$ no intervalo de integração $[-1, 1]$?

Solução: $I_f = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \omega_0 f(\xi_0) + \omega_1 f(\xi_1)$. Por outro lado, I_f é exata quando $f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$, então:

Quadratura de Gauss

Exemplo 3

Como determinar os nós ξ_k e os coeficientes ω_k quando $n = 1$ no intervalo de integração $[-1, 1]$?

Solução: $I_f = \int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx \omega_0 f(\xi_0) + \omega_1 f(\xi_1)$. Por outro lado, I_f é exata quando $f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$, então:

$$I_f = a_0 \int_{-1}^{1} 1\, dx + a_1 \int_{-1}^{1} x\, dx + a_2 \int_{-1}^{1} x^2\, dx + a_3 \int_{-1}^{1} x^3\, dx$$

Quadratura de Gauss

Exemplo 3

Como determinar os nós ξ_k e os coeficientes ω_k quando $n = 1$ no intervalo de integração $[-1, 1]$?

Solução: $I_f = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \omega_0 f(\xi_0) + \omega_1 f(\xi_1)$. Por outro lado, I_f é exata quando $f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$, então:

$$I_f = a_0 \int_{-1}^{1} 1\,dx + a_1 \int_{-1}^{1} x\,dx + a_2 \int_{-1}^{1} x^2\,dx + a_3 \int_{-1}^{1} x^3\,dx$$

Isso é equivalente a mostrar que I_f é exata quando f é 1, x, x^2 e x^3:

Quadratura de Gauss

Exemplo 3

Como determinar os nós ξ_k e os coeficientes ω_k quando $n = 1$ no intervalo de integração $[-1, 1]$?

Solução: $I_f = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \omega_0 f(\xi_0) + \omega_1 f(\xi_1)$. Por outro lado, I_f é exata quando $f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$, então:

$$I_f = a_0 \int_{-1}^{1} 1\,dx + a_1 \int_{-1}^{1} x\,dx + a_2 \int_{-1}^{1} x^2\,dx + a_3 \int_{-1}^{1} x^3\,dx$$

Isso é equivalente a mostrar que I_f é exata quando f é $1, x, x^2$ e x^3:

$$\omega_0 \cdot 1 + \omega_1 \cdot 1 = \int_{-1}^{1} 1\,dx = 2 \qquad \omega_0 \cdot \xi_0 + \omega_1 \cdot \xi_1 = \int_{-1}^{1} x\,dx = 0$$

$$\omega_0 \cdot \xi_0^2 + \omega_1 \cdot \xi_1^2 = \int_{-1}^{1} x^2\,dx = \tfrac{2}{3} \qquad \omega_0 \cdot \xi_0^3 + \omega_1 \cdot \xi_1^3 = \int_{-1}^{1} x^3\,dx = 0$$

Quadratura de Gauss

Solução (continuação):

Cuja solução é

$$\{\omega_0 = 1,\, \omega_1 = 1,\, \xi_0 = -1/\sqrt{3},\, \xi_1 = 1/\sqrt{3}\}\,.$$

Quadratura de Gauss

Solução (continuação):

Cuja solução é

$$\{\omega_0 = 1,\, \omega_1 = 1,\, \xi_0 = -1/\sqrt{3},\, \xi_1 = 1/\sqrt{3}\}\,.$$

Portanto,

$$I_f \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)\,.$$

Quadratura de Gauss

Polinômios Ortogonais

Definição (polinômios ortogonais)

Polinômios ortogonais são polinômios da família $\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n, \ldots\}$ *definidos em um intervalo* $[a, b]$, *onde* $\operatorname{grau}(\varphi_n) = n$ *(e* $\varphi_0 \neq 0$*), tais que*

$$\langle \varphi_m, \varphi_n \rangle = \int_a^b W(x)[\varphi_m(x)\varphi_n(x)]\, dx = 0 \quad se \quad m \neq n\,.$$

A função peso $W \in \mathcal{C}([a, b])$ *é positiva.*

Quadratura de Gauss

Polinômios Ortogonais

Definição (polinômios ortogonais)

Polinômios ortogonais são polinômios da família $\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n, \ldots\}$ *definidos em um intervalo* $[a, b]$, *onde* $\mathrm{grau}(\varphi_n) = n$ *(e* $\varphi_0 \neq 0$*), tais que*

$$\langle \varphi_m, \varphi_n \rangle = \int_a^b W(x)[\varphi_m(x)\varphi_n(x)]\, dx = 0 \quad se \quad m \neq n\,.$$

A função peso $W \in \mathcal{C}([a, b])$ *é positiva.*

Propriedades:

1. $\varphi_n(x)$ é único (a menos de uma escala);
2. Se $p \in \mathcal{P}_n \Rightarrow p = \alpha_0\varphi_0 + \alpha_1\varphi_1 + \cdots + \alpha_n\varphi_n(x)$ ($\{\varphi_i\}$ são LI);
3. $\langle \varphi_n, p \rangle = 0$, para qualquer polinômio $p \in \mathcal{P}_m$ com $m < n$;
4. $\varphi_n(x)$ possui n raízes reais distintas em $[a, b]$;

Quadratura de Gauss

Polinômios de Legendre

Considerando o intervalo $[-1,1]$ e o produto interno com a função peso $W(x) = 1$, os polinômios ortogonais gerados pela recursão:

$$\varphi_0(x) = 1\,, \quad \varphi_1(x) = x\,,$$

$$\varphi_{k+1}(x) = \frac{2k+1}{k+1}\, x\, \varphi_k(x) - \frac{k}{k+1}\, \varphi_{k-1}(x)\,, \quad k = 1, 2, \ldots$$

São chamados de Polinômios de Legendre.

Quadratura de Gauss

Polinômios de Legendre

Considerando o intervalo $[-1,1]$ e o produto interno com a função peso $W(x) = 1$, os polinômios ortogonais gerados pela recursão:

$$\varphi_0(x) = 1\,, \quad \varphi_1(x) = x\,,$$

$$\varphi_{k+1}(x) = \frac{2k+1}{k+1}\, x\, \varphi_k(x) - \frac{k}{k+1}\, \varphi_{k-1}(x)\,, \quad k = 1, 2, \ldots$$

São chamados de Polinômios de Legendre.

Consideração: Dada a base canônica de $\mathcal{P}_n$, os polinômios de Legendre também podem ser obtidos através do Processo de Ortogonalização de Gram-Schmidt seguido da normalização $\varphi_k(1) = 1$, para $k = 0, \ldots, n$.

Quadratura de Gauss

Polinômios de Legendre

Exemplo 4

Forneça os 5 primeiros Polinômios de Legendre.

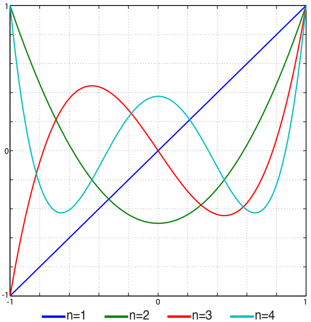
Quadratura de Gauss
Polinômios de Legendre

Exemplo 4

Forneça os 5 primeiros Polinômios de Legendre.

Solução:

$$\varphi_0(x) = 1$$
$$\varphi_1(x) = x$$
$$\varphi_2(x) = \tfrac{1}{2}(3x^2 - 1)$$
$$\varphi_3(x) = \tfrac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$
$$\varphi_4(x) = \tfrac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$$



Quadratura de Gauss

Polinômios de Legendre

Exercício 1

Considere a base canônica $\{1, x, x^2, x^3, x^4\}$ de $\mathcal{P}_4$. Use o Processo de Ortogonalização de Gram-Schmidt para obter $\{\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4\}$.

Quadratura de Gauss

Caso Geral

Relembrando de interpolação polinomial: encontre um polinômio $P_n \in \mathcal{P}_n$ tal que:

$$f(x_i) = P_n(x_i)\,, \quad i = 0, \ldots, n$$

Quadratura de Gauss

Caso Geral

Relembrando de interpolação polinomial: encontre um polinômio $P_n \in \mathcal{P}_n$ tal que:

$$f(x_i) = P_n(x_i)\,, \quad i = 0, \ldots, n$$

A idéia chave de integração numérica é

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \int_{-1}^{1} P_n(x)\,dx$$

Quadratura de Gauss

Caso Geral

Relembrando de interpolação polinomial: encontre um polinômio $P_n \in \mathcal{P}_n$ tal que:

$$f(x_i) = P_n(x_i)\,, \quad i = 0, \ldots, n$$

A idéia chave de integração numérica é

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \int_{-1}^{1} P_n(x)\,dx$$

Pelo erro de interpolação temos:

$$R(f) = \int_{-1}^{1} (f(x) - P_n(x))\,dx = \int_{-1}^{1} \frac{f^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)\,dx$$

Quadratura de Gauss

Caso Geral

- Se $f \in \mathcal{P}_m$ com $m \leq n \Longrightarrow \frac{f^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} = 0$ (aproximação exata);

Quadratura de Gauss

Caso Geral

- Se $f \in \mathcal{P}_m$ com $m \leq n \Longrightarrow \frac{f^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} = 0$ (aproximação exata);
- Se $f \in \mathcal{P}_m$ com $m > n \Longrightarrow \frac{f^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} \in \mathcal{P}_{m-n-1}$;

Quadratura de Gauss

Caso Geral

- Se $f \in \mathcal{P}_m$ com $m \leq n \Longrightarrow \frac{f^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} = 0$ (aproximação exata);
- Se $f \in \mathcal{P}_m$ com $m > n \Longrightarrow \frac{f^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} \in \mathcal{P}_{m-n-1}$;
- Melhor aproximação é feita usando Polinômios de Legendre.

Quadratura de Gauss

Caso Geral

- Se $f \in \mathcal{P}_m$ com $m \leq n \Longrightarrow \frac{f^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} = 0$ (aproximação exata);
- Se $f \in \mathcal{P}_m$ com $m > n \Longrightarrow \frac{f^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} \in \mathcal{P}_{m-n-1}$;
- Melhor aproximação é feita usando Polinômios de Legendre.

Se $\xi_0, \ldots, \xi_n$ são raízes de $\varphi_{n+1}(x)$ então:

$$\varphi_{n+1}(x) = a \prod_{i=0}^{n} (x - \xi_i)$$

Quadratura de Gauss

Caso Geral

- Se $f \in \mathcal{P}_m$ com $m \leq n \Longrightarrow \frac{f^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} = 0$ (aproximação exata);
- Se $f \in \mathcal{P}_m$ com $m > n \Longrightarrow \frac{f^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} \in \mathcal{P}_{m-n-1}$;
- Melhor aproximação é feita usando Polinômios de Legendre.

Se $\xi_0, \ldots, \xi_n$ são raízes de $\varphi_{n+1}(x)$ então:

$$\varphi_{n+1}(x) = a \prod_{i=0}^{n} (x - \xi_i)$$

Se $f \in \mathcal{P}_{2n+1}$, pela Propriedade 3, segue que:

$$a^{-1} \int_{-1}^{1} \frac{f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!} \, \varphi_{n+1}(x) \, dx = 0$$

Quadratura de Gauss-Legendre

Teorema

Suponha que $\xi_0, \ldots, \xi_n$ são raízes do polinômio de Legendre $\varphi_{n+1}(x)$ e os valores ω_k são definidos (usando polinômios de Lagrange $\ell_k(x)$) por

$$\omega_k = \int_{-1}^{1} \underbrace{\prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{n} \frac{x-\xi_i}{\xi_k-\xi_i}}_{\ell_k(x)} \, dx \,, \qquad k = 0, \ldots, n \,.$$

Se $f \in \mathcal{P}_{2n+1}$ então

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx = \sum_{k=0}^{n} \omega_k f(\xi_k) \,.$$

Quadratura de Gauss-Legendre

Processo Prático

O procedimento para calcular uma integral usando Quadratura de Gauss-Legendre é o seguinte:

1. Calcular as raízes $\xi_0, \ldots, \xi_n$ de $\phi_{n+1}(x)$;

Quadratura de Gauss-Legendre

Processo Prático

O procedimento para calcular uma integral usando Quadratura de Gauss-Legendre é o seguinte:

1. Calcular as raízes $\xi_0, \ldots, \xi_n$ de $\phi_{n+1}(x)$;
2. Determinar os polinômios $\ell_k(x)$ usando os nós $\xi_0, \ldots, \xi_n$;

Quadratura de Gauss-Legendre

Processo Prático

O procedimento para calcular uma integral usando Quadratura de Gauss-Legendre é o seguinte:

1. Calcular as raízes $\xi_0, \ldots, \xi_n$ de $\phi_{n+1}(x)$;
2. Determinar os polinômios $\ell_k(x)$ usando os nós $\xi_0, \ldots, \xi_n$;
3. Calcular $\omega_k = \int_{-1}^{1} \ell_k(x)\, dx$ para $k = 0, \ldots, n$;

Quadratura de Gauss-Legendre

Processo Prático

O procedimento para calcular uma integral usando Quadratura de Gauss-Legendre é o seguinte:

1. Calcular as raízes $\xi_0, \ldots, \xi_n$ de $\phi_{n+1}(x)$;
2. Determinar os polinômios $\ell_k(x)$ usando os nós $\xi_0, \ldots, \xi_n$;
3. Calcular $\omega_k = \int_{-1}^{1} \ell_k(x)\, dx$ para $k = 0, \ldots, n$;
4. Calcular $f(\xi_k)$ para $k = 0, \ldots, n$;

Quadratura de Gauss-Legendre

Processo Prático

O procedimento para calcular uma integral usando Quadratura de Gauss-Legendre é o seguinte:

1. Calcular as raízes $\xi_0, \ldots, \xi_n$ de $\phi_{n+1}(x)$;
2. Determinar os polinômios $\ell_k(x)$ usando os nós $\xi_0, \ldots, \xi_n$;
3. Calcular $\omega_k = \int_{-1}^{1} \ell_k(x)\, dx$ para $k = 0, \ldots, n$;
4. Calcular $f(\xi_k)$ para $k = 0, \ldots, n$;
5. Finalmente, calcular

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx \sum_{k=0}^{n} \omega_k f(\xi_k)\,.$$

Quadratura de Gauss-Legendre

Processo Prático

Na prática os valores de ξ_k e ω_k são tabelados:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} \omega_k f(\xi_k)$$

n	ξ_k	ω_k
1	± 0.5773502691	1.0000000000
2	± 0.7745966692	0.5555555555
	0.0000000000	0.8888888888
3	± 0.8611363115	0.3478548451
	± 0.3399810435	0.6521451548
4	± 0.9061798459	0.2369268850
	± 0.5384693101	0.4786286704
	0.0000000000	0.5688888888
5	± 0.9324695142	0.1713244923
	± 0.6612093864	0.3607615730
	± 0.2386191860	0.4679139345

Quadratura de Gauss-Legendre

Processo Prático

Exemplo 5

Aproxime a integral $\int_{-1}^{1} x \exp(x)\, dx$ usando a Quadratura de Gauss com 3 pontos de quadratura ($n = 2$).

Quadratura de Gauss-Legendre

Processo Prático

Exemplo 5

Aproxime a integral $\int_{-1}^{1} x \exp(x)\, dx$ usando a Quadratura de Gauss com 3 pontos de quadratura ($n = 2$).

Solução: Usando a tabela, temos que:

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} x \exp(x)\, dx &\approx 0.\overline{5} \cdot (-0.7745966692) \cdot \exp(-0.7745966692) \\
&+ 0.\overline{8} \cdot 0 \cdot \exp(0) \\
&+ 0.\overline{5} \cdot (0.7745966692) \cdot \exp(0.7745966692) \\
&\approx 0.7354
\end{aligned}$$

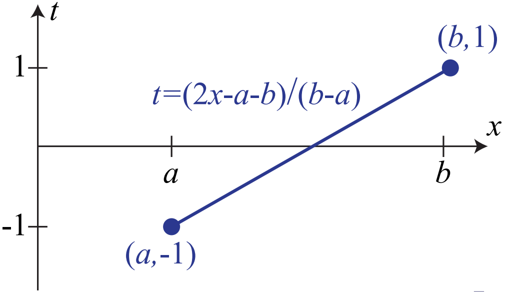
Integrando por partes para obter o valor exato, o erro absoluto é aproximadamente 3.97×10^{-4}.

Quadratura de Gauss-Legendre

em Intervalos Arbitrários

Uma integral $\int_a^b f(x)\,dx$ definida em um intervalo arbitrário $[a,b]$ pode ser transformada em uma integral em $[-1,1]$ usando mudança de variáveis:

$$t = \frac{2x-a-b}{b-a} \iff x = \frac{1}{2}[(b-a)t+a+b]\,.$$



Quadratura de Gauss-Legendre

em Intervalos Arbitrários

Portanto, a Quadratura de Gauss-Legendre pode ser aplicada em qualquer intervalo $[a,b]$, pois

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

Quadratura de Gauss-Legendre
em Intervalos Arbitrários

Portanto, a Quadratura de Gauss-Legendre pode ser aplicada em qualquer intervalo $[a, b]$, pois

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

Desvantagem da Quadratura de Gauss: os nós ξ_k dependem de n.

- os valores $f(\xi_k)$ não podem ser reusados quando n aumenta.

Quadratura de Gauss-Legendre

em Intervalos Arbitrários

Exemplo 6

Aproxime $\int_1^3 \exp(x)\cos(x)\,dx = -10.403054469377356$ usando a Quadratura de Gauss com 2 pontos de quadratura.

Quadratura de Gauss-Legendre

em Intervalos Arbitrários

Exemplo 6

Aproxime $\int_1^3 \exp(x)\cos(x)\,dx = -10.403054469377356$ usando a Quadratura de Gauss com 2 pontos de quadratura.

Solução: Fazendo a mudança de variável, segue que:

$$\int_1^3 \exp(x)\cos(x)\,dx = \int_{-1}^1 \exp(t+2)\cos(t+2))\,dt$$

Usando a tabela com $n = 1$:

$$\begin{aligned}\int_1^3 \exp(x)\cos(x)\,dx &\approx f(-0.5773502691+2) + f(0.5773502691+2)\\ &= -10.509712087073790\end{aligned}$$

MATLAB – Quadratura de Gauss-Legendre

```
function I = gauss_legendre(fun,a,b)
% Quadratura de Gauss-Legendre com 6 pontos
% fun: funcao que avalia vetor

nos   = [-0.9324695142031520; -0.6612093864662645;
         -0.2386191860831969;  0.2386191860831969;
          0.6612093864662645;  0.9324695142031520];

pesos = [ 0.1713244923791703;  0.3607615730481386;
          0.4679139345726910;  0.4679139345726910;
          0.3607615730481386;  0.1713244923791703];

% mudanca de intervalo de [-1,1] para [a,b]
ab_nos   = ((b-a)*nos+a+b)/2;
ab_pesos = pesos*(b-a)/2;

% aplica regra de Guass-Legendre
I = sum(ab_pesos.*fun(ab_nos));
```

Quadratura de Gauss
Resumo

Quadratura de Gauss-Legendre (GL)

$$\xi_k = \text{raízes de } \varphi_{n+1}(x)$$

$$\omega_k = \frac{2}{(1-\xi_k^2)[\varphi'_{n+1}(\xi_k)]^2}, \quad k = 0, \ldots, n\,.$$

Quadratura de Gauss-Legendre-Lobatto (GLL)

$$\xi_0 = -1\,,\ \xi_n = 1\,,\ \xi_k = \text{raízes de } \varphi'_n(x)\,, \quad k = 1, \ldots, n-1\,.$$

$$\omega_k = \frac{2}{n(n+1)} \frac{1}{[\varphi_n(\xi_k)]^2}, \quad k = 0, \ldots, n\,.$$

Quadratura de Gauss-Legendre-Lobatto

Na prática os valores de ξ_k e ω_k são tabelados:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} \omega_k f(\xi_k)$$

n	ξ_k	ω_k
1	± 1.0000000000	1.0000000000
2	± 1.0000000000	0.3333333333
	0.0000000000	1.3333333333
3	± 1.0000000000	0.1666666667
	± 0.4472135955	0.8333333333
4	± 1.0000000000	0.1000000000
	± 0.6546536707	0.5444444444
	0.0000000000	0.7111111111

`I = quadl(fun,a,b)`: calcula a integral usando quadratura de GLL;
`% fun`: função que avalia vetores;

Quadratura de Gauss

Estimativa de Erro

Erro na Quadratura de GL

Se $f \in \mathcal{C}^{2n+2}([-1,1])$:

$$R(f) = \frac{2^{2n+3}((n+1)!)^4}{(2n+3)((2n+2)!)^3} f^{(2n+2)}(c)\,, \quad \text{com } c \in (-1,1)$$

Erro na Quadratura de GLL

Se $f \in \mathcal{C}^{2n}([-1,1])$:

$$R(f) = -\frac{(n+1)n^3\, 2^{2n+1}((n-1)!)^4}{(2n+1)((2n)!)^3} f^{(2n)}(c)\,, \quad \text{com } c \in (-1,1)$$