Integração Numérica

Seja $f \in C[a, b]$ e considere a integral definida

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

onde $f(x)$ é uma "função complicada" (não se conhece uma primitiva, f sómente é conhecida num numero finito de pontos, etc). Uma aproximação para $I(f)$ pode ser obtida como segue:

Sejam $x_0 = a < x_1 < \cdots < x_n = b$, $(n+1)$-pontos em $[a, b]$ e $P_n(x)$ o polinomio interpolador de $f(x)$ em $x = x_k$, $k = 0, 1, \cdots, n$. Então

$$f(x) = P_n(x) + (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)\frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}, \quad \text{onde} \quad \xi(x) \in [a, b].$$

Logo,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_n(x)dx + \int_a^b R_n(x)dx \tag{1}$$

onde

$$\int_a^b R_n(x)dx = \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)\frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}dx \quad \text{é o erro}$$

Se desprezarmos o erro, obtemos:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x)dx$$

e tomando a fórmula de Lagrange para o polinomio interpolador vem:

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

Portanto,

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) \tag{2}$$

onde

$$A_k = \int_a^b L_k(x)dx$$

são chamados os pesos da fórmula de quadratura definida por (2).

Fórmulas de Newton-Cotes Fechadas

As fórmulas de Newton-Cotes fechadas são obtidas através de (2) onde os pontos $x_0, x_1, \cdots, x_n$, são igualmente espaçados em $[a,\ b]$ com $x_0 = a$ e $x_n = b$, ou seja,

$$x_j = a + jh, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad j = 0, 1, \cdots, n$$

As fórmulas de Newton-Cotes fechadas mais conhecidas são a "Fórmula do Trapézio" e a "Fórmula de Simpson".

Fórmula do Trapézio

Esta fórmula é obtida ao aproximarmos $f(x)$ pelo polinomio interpolador em $x_0 = a$ e $x_1 = b$. Nesse caso, fazendo $n = 1$ em (2), obtemos:

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) \quad \text{onde} \quad x_0 = a, x_1 = b, \text{ e } h = x_1 - x_0 \\
& A_0 = \int_a^b L_0(x)dx, \qquad A_1 = \int_a^b L_1(x)dx
\end{aligned}$$

Cálculo de A_0 e A_1

$$\begin{aligned}
A_0 &= \int_a^b \frac{(x-x_1)}{(x_0-x_1)}dx = -\frac{1}{h}\int_a^b (x-x_1)dx = -\frac{1}{h}\frac{(x-x_1)^2}{2}\Big|_{x_0}^{x_1} \\
&= \frac{1}{h}\frac{(x_0-x_1)^2}{2} = \frac{1}{h}\frac{h^2}{2} = \frac{h}{2} \\
A_1 &= \int_a^b \frac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)}dx = \frac{1}{h}\int_a^b (x-x_0)dx = \frac{1}{h}\frac{(x-x_0)^2}{2}\Big|_{x_0}^{x_1} \\
&= \frac{1}{h}\frac{(x_1-x_0)^2}{2} = \frac{1}{h}\frac{h^2}{2} = \frac{h}{2}
\end{aligned}$$

Logo, a fórmula de quadratura é dada por:

$$I_T(f) = \frac{h}{2}f(x_0) + \frac{h}{2}f(x_1) = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right]$$

Cálculo do erro: $E_T(f) = I(f) - I_T(f)$

Como vimos, a fórmula do trapezio foi obtida pela aproximação de $I(f) = \int_a^b f(x)dx$ pela integral do polinomio interpolador de $f(x)$ nos pontos $x_0 = a$ e $x_1 = b$. Para obtermos uma expressão do erro cometido procedemos como segue:

$$f(x) = P_1(x) + (x - x_0)(x - x_1)\frac{f^{(''}(\xi(x))}{2!}$$

logo,

$$\begin{aligned}
&\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_1(x)dx + \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)\frac{f''(\xi(x))}{2!}dx \\
&\Longrightarrow \int_a^b f(x)dx - \int_a^b P_1(x)dx = \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)\frac{f''(\xi(x))}{2!}dx \\
&\Longrightarrow I(f) - I_T(f) = \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)\frac{f''(\xi(x))}{2!}dx
\end{aligned}$$

Portanto o erro é dado por:

$$E_T(f) = \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)\frac{f''(\xi(x))}{2!}dx \tag{3}$$

Para simplificarmos essa equação, faremos uso do seguinte resultado da análise:

Teorema do Valor Médio para Integrais: Se $f \in C[a,\ b]$ e g é uma função integrável em $[a,\ b]$ que não muda de sinal em $[a,\ b]$ então existe $\xi \in (a,\ b)$ tal que

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi)\int_a^b g(x)dx$$

De fato, $W(x) = (x - x_0)(x - x_1) \leq 0\, \forall\, x \in [x_0,\ x_1] \Longrightarrow$ (pelo teor. valor médio para integrais) existe $\xi \in [x_0,\ x_1]$ tal que:

$$\int_a^b (x - x_0)(x - x_1)\frac{f''(\xi(x))}{2!}dx = \frac{f''(\xi)}{2!}\int_a^b (x - x_0)(x - x_1)dx.$$

Agora,

$$\begin{aligned}
\int_a^b (x - x_0)(x - x_1)dx &= (x - x_0)\frac{(x - x_1)^2}{2}\Big|_{x_0}^{x_1} - \int_a^b \frac{(x - x_1)^2}{2}dx \\
&= -\frac{(x - x_1)^3}{6}\Big|_{x_0}^{x_1} = \frac{(x_0 - x_1)^3}{6} = -\frac{h^3}{6}
\end{aligned}$$

Portanto, o erro é dado por:

$$E_T(f) = -\frac{h^3}{12} f''(\xi) \ .$$

Consequentemente,

$$|E_T(f)| \leq \frac{h^3}{12} \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$$

Fórmula de Simpson

A fórmula de Simpson é obtida ao aproximarmos $I(f)$ por $I(P_2)$ onde $P_2(x)$ é o polinomio interpolador de $f(x)$ nos pontos $x_0 = a, x_1 = \frac{a+b}{2}$ e $x_2 = b$. Nesse caso temos:

$$f(x) = P_2(x) + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}, \quad \text{onde} \quad \xi(x) \in [a,\ b]$$

onde $P_2(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2)$.

Logo,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_2(x)dx + \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}, \quad \text{onde} \quad \xi(x) \in [a,\ b]$$

e a integral é aproximada por (desprezando o erro)

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_2(x)dx$$

Calculando $\int_a^b P_2(x)dx$ vem:

$$\begin{aligned} \int_a^b P_2(x)dx &= \int_a^b L_0(x)f(x_0)dx + \int_a^b L_1(x)f(x_1)dx + \int_a^b L_2(x)f(x_2)dx \\ &= f(x_0)\int_a^b L_0(x)dx + f(x_1)\int_a^b L_1(x)dx + f(x_2)\int_a^b L_2(x)dx \end{aligned}$$

Cálculo de A_0, A_1, A_2

$$\begin{aligned} A_0 &= \int_a^b \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}dx = \frac{1}{2h^2}\int_a^b (x - x_1)(x - x_2)dx \\ &= \frac{1}{2h^2}\left[(x - x_1)\frac{(x - x_2)^2}{2}\Big|_{a=x_0}^{b=x_2} - \int_a^b \frac{(x - x_2)}{2}dx\right] \\ &= \frac{1}{2h^2}\left[(x - x_1)\frac{(x - x_2)^2}{2}\Big|_{a=x_0}^{b=x_2} - \frac{(x - x_2)^3}{3}\Big|_{a=x_0}^{b=x_2}\right] \\ &= \frac{1}{2h^2}\left[h\frac{4h^2}{2} - \frac{8h^3}{6}\right] = \frac{1}{2h^2}\left[2h^3 - \frac{4}{3}h^3\right] = \frac{1}{2h^2}\left[\frac{2}{3}h^3\right] = \frac{1}{3}h \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
A_1 &= \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}dx - \frac{1}{h^2}\int_a^b (x-x_0)(x-x_2)dx \\
&= -\frac{1}{h^2}\left[(x-x_0)\frac{(x-x_2)^2}{2}|_{a=x_0}^{b=x_2} - \int_a^b \frac{(x-x_2)}{2}dx\right] \\
&= -\frac{1}{h^2}\left[(x-x_0)\frac{(x-x_2)^2}{2}|_{a=x_0}^{b=x_2} - \frac{(x-x_2)^3}{3}|_{a=x_0}^{b=x_2}\right] \\
&= -\frac{1}{h^2}\left[-\frac{8h^3}{6}\right] = \frac{4}{3}h
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
A_2 &= \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}dx = -\frac{1}{2h^2}\int_a^b (x-x_0)(x-x_1)dx \\
&= \frac{1}{2h^2}\left[(x-x_0)\frac{(x-x_1)^2}{2}|_{a=x_0}^{b=x_2} - \int_a^b \frac{(x-x_1)}{2}dx\right] \\
&= \frac{1}{2h^2}\left[(x-x_0)\frac{(x-x_1)^2}{2}|_{a=x_0}^{b=x_2} - \frac{(x-x_1)^3}{3}|_{a=x_0}^{b=x_2}\right] \\
&= \frac{1}{2h^2}\left[2h\frac{h^2}{2} - \left(\frac{h^3}{6} - \left(-\frac{h^3}{6}\right)\right)\right] = \frac{1}{2h^2}\left[h^3 - \frac{1}{3}h^3\right] = \frac{1}{3}h
\end{aligned}
$$

Portanto, a fórmula de Simpson é dada por:

$$I_S(f) = \frac{1}{3}hf(x_0) + \frac{4}{3}hf(x_1) + \frac{1}{3}hf(x_2) = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)].$$

Observamos que esta fórmula é do tipo daquela definida por (2) com

$$A_0 = \frac{h}{3}, \qquad A_1 = \frac{4h}{3}, \qquad A_2 = \frac{h}{3}\ .$$

Pode-se mostrar que o erro dessa fórmula é dado por:

$$E_S(f) = -\frac{h^5}{90}f^4(\xi)\ , \xi\ \in\ [a,\ b]$$

Um majorante para o erro é dado por:

$$|E_S(f)| \leq \frac{h^5}{90} \max_{x \in [a,b]} |f^4(x)|$$

Fórmula de Simpson 3/8

Essa fórmula é obtida ao aproximarmos $I(f)$ por $I(P_3)$ onde $P_3(x)$ é o polinomio interpolador de $f(x)$ nos pontos $x_0 = a, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$ e $x_3 = b$, em que $h = (b - a)/3$. Nesse caso temos:

$$f(x) = P_3(x) + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)\frac{f^{(4)}(\xi(x))}{4!}, \quad \text{onde} \quad \xi(x) \in [a,\ b]$$

onde $P_3(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2) + L_3(x)f(x_3)$.

Logo,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_3(x)dx + \int_a^b (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)\frac{f^{(4)}(\xi(x))}{4!}, \quad \text{onde} \quad \xi(x) \in [a,\ b]$$

e a integral é aproximada por (desprezando o erro)

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_3(x)dx$$

Calculando $\int_a^b P_2(x)dx$ obtém-se a fórmula:

$$I(f) \approx I_{S_{3/8}}(f) = \frac{3}{8}\big[f(x_0 + 3(f(x_1) + f(x_2)) + f(x_3)\big]$$

Pode-se mostrar que o erro dessa fórmula é dado por:

$$E_{S_{3/8}} = I(f) - I_{S_{3/8}}(f) = -\frac{3h^5}{80}f_{(4)}(\xi), \quad \xi \in [a,\ b] \tag{4}$$

Fórmulas de Quadraturas Compostas

O desenvolvimento de uma fórmula de quadratura para o intervalo $[a,\ b]$ pode ser obtida através de:

1. Tomando um grande numero de nós de integração de modo que a fórmula

$$I_n(f) = \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j)$$

representa a integral do polinomio interpolador em $x_0, x_1, \cdots, x_n$. Essa técnica não convém visto que o polinomio terá grau elevado e a interpolação pode não resultar em uma boa aproximação para $f(x)$.

2. Dividir o intervalo $[a,\ b]$ em vários subintervalos $[x_j,\ x_{j+1}]$ de comprimentos $(x_{j+1} - x_j) << 1$ e aplicar uma fórmula com poucos pontos (por ex. $n = 1, 2, 3$) a cada subintervalo e somar os resultados de modo a obter uma aproximação para $I(f)$.

De fato, sejam $x_0, x_1, \cdots, x_N,\ (N+1)-$pontos em $[a,\ b]$ com $x_0 = a$ e $x_N = b$. Então,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{N-1}}^{x_N} f(x)dx = \sum_{j=0}^{N} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx$$

donde vemos que para obter uma aproximação para $I(f)$ é suficiente que aproximemos $\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx$ por uma fórmula de quadratura com poucos pontos e somar o resultado final.

Regra dos Trapézios Composta

Essa fórmula é obtida dividindo o intervalo $[a,\ b]$ em $N-$subintervalos e a aproxima-se $\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx$ pela regra dos trapézios, como segue:

Sejam $x_j = a + jh, \quad x_0 = a, \quad h = \frac{b-a}{N}, \quad j = 0, 1, \cdots, N$. Então,

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= \sum_{j=0}^{N} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx \approx \sum_{j=0}^{N} \left[\frac{h}{2} \left(f(x_j) + f(x_{j+1}) \right) \right] \\
&= \left[\frac{h}{2} \left(f(x_0) + f(x_1) \right) \right] + \left[\frac{h}{2} \left(f(x_1) + f(x_2) \right) \right] + \cdots + \left[\frac{h}{2} \left(f(x_{N-1}) + f(x_N) \right) \right] \\
&= \frac{h}{2} \left[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{N-1}) + f(x_N) \right] \\
&= \frac{h}{2} \left[f(x_0) + f(x_N) + \sum_{j=1}^{N-1} 2f(x_j) \right] = I_T^N(f)
\end{aligned}$$

Fórmula do Erro: $(f \in C^2[a,\ b])$

O erro $E_T^N(f) = I(f) - I_T^N(f)$. é a soma dos erros em cada subintervalo $[x_j,\ x_{j+1}]$. Logo,

$$E_T^N(f) = I(f) - T_n(f) = \sum_{j=0}^{N-1} -\frac{h^3}{12} f''(\xi_j) = -N\frac{h^3}{12}\sum_{j=0}^{N-1}\frac{f''(\xi_j)}{N} \quad \text{onde } \xi_j \in [x_j,\ x_{j+1}] \tag{5}$$

Observemos que, como $f \in C^2[a,\ b]$ então existe $m = \min_{x\in[a,b]} f''(x)$ e $M = \max_{x\in[a,b]} f''(x)$. Logo,

$$m \le f''(\xi_j) \le M \quad j = 0, 1, \cdots, N-1. \implies Nm \le \sum_{j=0}^{N-1} f''(\xi_j) \le NM$$

$$\implies m \le \sum_{j=0}^{N-1}\frac{f''(\xi_j)}{N} \le M \implies \min_{x\in[a,b]} f''(x) \le \sum_{j=0}^{N-1}\frac{f''(\xi_j)}{N} \le \max_{x\in[a,b]} f''(x)$$

Pelo teorema do valor intermediário, existe $\xi \in [a,\ b]$ tal que

$$f''(\xi) = \sum_{j=0}^{N-1}\frac{f''(\xi_j)}{N}$$

e substituindo em (5) obtemos (desde que $h = (b-a)/N$):

$$E_T^N(f) = -N\frac{h^3}{12} f''(\xi) = -\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\xi) \quad \text{onde} \quad \xi \in [a,\ b]\ .$$

Um majorante para o erro é então dado por:

$$|E_T^N(f)| \le \frac{(b-a)}{12} h^2 \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| \tag{6}$$

Fórmula de Simpson Composta

Essa fórmula é obtida aplicando a fórmula de Simpson nos subintervalos $[x_j,\ x_{j+2}]$. Sejam $x_0 = a, x_1, \cdots, x_{N-2}, x_{N-1}, x_N = b$ onde N é um numero par. Então,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{N-2}}^{x_N} f(x)dx = \sum_{j=1}^{N/2}\int_{x_{2j-2}}^{x_{2j}} f(x)dx$$

e aplicando a formula de Simpson a cada integral, obtemos

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx \quad &\approx \quad \frac{h}{3}[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)]+\frac{h}{3}[f(x_2)+4f(x_3)+f(x_4)] \\ &\qquad +\cdots+\frac{h}{3}[f(x_{N-2})+4f(x_{N-1})+f(x_N)] \\ &= \quad \frac{h}{3}\left[f(x_0)+f(x_N)+4\sum_{j=1}^{N/2} f(x_{2j-1})+2\sum_{j=1}^{N/2-1} f(x_{2j})\right]=I_S^N(f)\end{aligned}$$

Fórmula do Erro

De maneira análoga como se fez na regra dos trapézios composta, pode-se mostrar que o erro na fórmula de Simpson composta é dado por:

$$E_S^N(f)=-\frac{h^5}{90}\sum_{j=1}^{N/2} f^{(4)}(\xi_i)=-\frac{Nh^5}{180}f^{(4)}(\xi) \qquad \xi \ \in \ [a, \ b].$$

Um majorante para o erro é dado por:

$$|E_S^N(f)|\leq\frac{Nh^5}{180}\max_{x\in[a,b]}|f^{(4)}(x)|$$

Grau de Precisão de uma fórmula de Quadratura

Seja a igualdade $I(f) = I_Q(f) + E_Q(f)$ onde $I_Q(f)$ é uma fórmula de quadratura que aproxima $I(f)$ e $E_Q(f)$ é o erro. O grau de precisão da fórmula $I_Q(f)$ é um numero r tal que:

$$E_Q(P_k) = 0 \qquad \text{se} \qquad k \leq r \qquad \text{e} \qquad E_Q(x^{r+1}) \neq 0$$

onde $P_k(x)$ é um polinomio de grau $\leq k$.

Exemplo1: Ao aproximarmos $I(f)$ pela fórmula dos trapézios temos:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] - \frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi) \qquad \xi \in [a,\ b]$$

donde vemos que se $f(x) = P_1(x)$ (um polinomio de grau ≤ 1) então $f''(x) = 0 \implies E_T(f) = 0$ e portanto a fórmula dos trapezios é exata $\implies$ grau de precisão de $T(f)$ é $r \geq 1$. Mas para $f(x) = x^2$ temos que

$$E_T(f) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi) = -\frac{(b-a)^3}{12} 2 \neq 0 \qquad I(f) \neq I_T(f)$$

e portanto o grau de precisão de $T(f)$ é $r = 1$. O mesmo resultado se obtem se analisarmos $T_N(f)$.

Exemplo2: Pela regra de Simpson tem-se:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] - \left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \frac{1}{90} f^{(4)}(\xi) \qquad \xi \in [a,\ b]\ .$$

Como $f^{(4)}(x) = 0$ se $f(x)$ é um polinomio de grau $\leq 3 \implies E_S(f) = 0$ para polinomios de grau $\leq 3 \implies I_S(f)$ é exata para polinomios de grau ≤ 3 e portanto grau de precisão de $S(f)$ é $r \geq 3$. Porem, para $f(x) = x^4$ temos que

$$f^{(4)}(x) = 4!\ \forall\ x \implies E_S(f) = -\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \frac{1}{90} 4! \neq 0$$

e portanto $S(f)$ não é exata para polinomios de grau 4 $\implies$ grau de precisão de $I_S(f)$ é $r = 3$.

Métodos dos Coeficientes Indeterminados

Sejam $x_0, x_1, \cdots, x_n$, $(n+1)-$pontos em $[a,\ b]$. O método dos coeficientes indeterminados consiste em obter os pesos da formula de quadratura

$$I_Q(f) = \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j) \approx \int_a^b f(x)dx \tag{7}$$

de modo que $I_Q(f)$ tenha grau de precisão $r \geq n$, ou seja,

$$I_Q(P_k) = I(P_k), \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

onde P_k é um polinomio de grau k.

Lema: A fórmula de quadratura definida por (7) é uma aplicação linear.

Prova:

De fato, sejam $x_0, x_1, \cdots, x_n, \in [a,\ b]$, f e g duas funções integraveis em $[a,\ b]$ e $\lambda \in \mathbf{R}$. Então

$$\begin{aligned}
I_Q(f+g) &= \sum_{j=0}^{n} A_j[(f+g)(x_j)] = \sum_{j=0}^{n} A_j[f(x_j)+g(x_j)] = \sum_{j=0}^{n}[A_j f(x_j) + A_j g(x_j)] \\
&= \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j) + \sum_{j=0}^{n} A_j g(x_j) = I_Q(f) + I_Q(g) \\
I_Q(\lambda f) &= \sum_{j=0}^{n} A_j[(\lambda f)(x_j)] = \sum_{j=0}^{n} A_j \lambda f(x_j) = \lambda \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j) = \lambda I_Q(f)
\end{aligned}$$

Cálculo de $A_1, A_2, \cdots, A_n$

Seja $P_k(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 \cdots + \alpha_n x^n$ um polinomio de grau k. Então

$$I_Q(P_k) = I_Q(\alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 \cdots + \alpha_n x^n) = \alpha_0 I_Q(1) + \alpha_1 I_Q(x) + \alpha_2 I_Q(x^2) + \cdots + \alpha_n I_Q(x^n)$$

e

$$I(P_k) = I(\alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 \cdots + \alpha_n x^n) = \alpha_0 I(1) + \alpha_1 I(x) + \alpha_2 I(x^2) + \cdots + \alpha_n I(x^n)$$

donde vemos que para termos $I_Q(P_k) = I(P_k)$ é suficiente que:

$$I_Q(x^k) = I(x^k)\ , \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

donde obtemos as equações:

$$
\begin{aligned}
I_Q(1) &= \sum_{j=0}^{n} A_j(1) = I(1) = \int_a^b dx = b - a \\
&\Longrightarrow \quad A_0 + A_1 + \cdots + A_n = b - a \\
I_Q(x) &= \sum_{j=0}^{n} A_j(x_j) = I(x) = \int_a^b x dx = \frac{x^2}{2}|_a^b = \frac{b^2 - a^2}{2} \\
&\Longrightarrow \quad A_0x_0 + A_1x_1 + \cdots + A_nx_n = \frac{b^2 - a^2}{2} \\
I_Q(x^2) &= \sum_{j=0}^{n} A_j(x_j^2) = I(x^2) = \int_a^b x^2 dx = \frac{x^3}{3}|_a^b = \frac{b^3 - a^3}{3} \\
&\Longrightarrow \quad A_0x_0^2 + A_1x_1^2 + \cdots + A_nx_n^2 = \frac{b^3 - a^3}{3} \\
\vdots &= \qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \\
I_Q(x^n) &= \sum_{j=0}^{n} A_j(x_j^n) = I(x^n) = \int_a^b x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1}|_a^b = \frac{b^{n+1} - a^{n+1}}{n+1} \\
&\Longrightarrow \quad A_0x_0^n + A_1x_1^n + \cdots + A_nx_n^n = \frac{b^{n+1} - a^{n+1}}{n+1}
\end{aligned}
$$

que fornecem um sistema linear que pode ser escrito na forma:

$$
\begin{bmatrix}
1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\
x_0 & x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\
x_0^2 & x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_n^2 \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
x_0^n & x_1^n & x_2^n & \cdots & x_n^n
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
A_0 \\ A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ A_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b - a \\ \frac{b^2 - a^2}{2} \\ \frac{b^3 - a^3}{3} \\ \vdots \\ \vdots \\ \frac{b^{n+1} - a^{n+1}}{n+1}
\end{bmatrix}
\tag{8}
$$

Se os pontos forem distintos, a matriz acima é conhecida como “Matriz de Vandermonde” e sabe-se que é não-singular $\Longrightarrow$ esse sistema tem solução única $\Longrightarrow$ $A_j, \ j = 0, 1, \cdots, n$, são unicamente determinados!

Quadratura Gaussiana

Como vimos anteriormente, o método dos coeficientes indeterminados consiste em dados $(n+1)$-nós de integração, obter os pesos de integração A_j tais que:

$$\int_a^b x^k w(x)dx = \sum_0^n A_j x_j^k, \quad k = 0, 1, 2, \cdots, n.$$

Isto então fornece um sistema linear com $(n+1)$-equações a $(n+1)$-incógnitas e as fórmulas obtidas tem grau de precisão $r \geq n$.

Agora, se tratarmos os nós de integração como incógnitas então as equações acima fornecem

$$\int_a^b x^k w(x)dx = \sum_0^n A_j x_j^k, \quad k = 0, 1, 2, \cdots, 2n+1,$$

o que representa um sistema não-linear com $(2n+2)$-equações a $(2n+2)$-incógnitas. Se mostrarmos que esse sistema tem solução única então podemos resolve-lo e determinar assim uma fórmula de quadratura com apenas $(n+1)$-pontos mas com um grau de precisão $m = 2n+1$. Vejamos então que esse sistema tem solução única e como determinar os A_j.

Polinomios Ortogonais: Seja $\{\phi_i(x)\}_{i \in N}$ uma familia de polinomios e $(\ ,\ )$ um produto escalar. Se

$$\begin{cases} (\phi_i, \phi_j) = 0, \ i \neq j \\ (\phi_i, \phi_i) \neq 0 \end{cases}$$

então os polinomios $\phi_0, \phi_1, \cdots,$ são chamados polinomios ortogonais.

Consideremos o produto escalar

$$(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx, \quad \text{com } w(x) \geq 0, x \in [a,\ b] \text{ e continua.} w \text{ é chamada função peso}$$

Os polinomios ϕ_i podem ser obtidos pela ortogonalização da sequencia $\{1, x, x^2, \cdots, x^n\}$ pelo processo de ortogonalização de Gram-Schmidt ou recorrentemente pela fórmula

$$(I) \begin{cases} \phi_0(x) = 1 \\ \phi_1(x) = x - \dfrac{(x\phi_0(x), \phi_0(x))}{(\phi_0(x), \phi_0(x))} = x - \dfrac{(x, 1)}{(1, 1)} \\ \phi_{k+1} = x\phi_k(x) - \alpha_k \phi_k(x) - \beta_k \phi_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, 3 \\ \text{onde} \\ \alpha_k = \dfrac{(x\phi_k(x), \phi_k(x))}{(\phi_k(x), \phi_k(x))}, \quad k = 1, 2, \cdots \\ \beta_k = \dfrac{(x\phi_k(x), \phi_{k-1}(x))}{(\phi_{k-1}(x), \phi_{k-1}(x))}, \quad k = 1, 2, \cdots \end{cases}$$

Os polinomios $\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$ assim definidos são dois a dois ortogonais.

A sequencia de polinomios obtida por (I) depende do produto escalar adotado. Os mais conhecidos são os seguintes:

1. Legendre

   Os polinomios de Legendre $P_0(x), P_1(x), P_2(x), \cdots$ são obtidos segundo o produto escalar

   $$(f,g) = \int_{-1}^{1} f(x)g(x)dx, \quad w(x) = 1$$

   Os primeiros polinomios de Legendre são:

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

   $$P_n(x) = \frac{2n-1}{n} x P_{n-1}(x) - \frac{(n-1)}{n} P_{n-2}(x), \quad n = 2, 3, \cdots$$

2. Polinomios de Chebyshev

   Os Polinomios de Chebyshev são obtidos segundo o produto escalar

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

   Os primeiros polinomios de Chebyshev são:

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

   e podem ser obtidos pela fórmula de recorrência:

   $$T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x), \quad n = 2, 3, \cdots$$

3. Polinomios de Laguerre

   Esses polinomios estão associados ao produto escalar

   $$(f,g) = \int_{0}^{\infty} f(x)g(x)e^{-x}dx, \quad w(x) = e^{-x}.$$

   Os primeiros polinomios de Laguerre são:

   $$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = 1 - x, \quad L_2(x) = x^2 - 4x + 2, \quad L_3(x) = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6$$

   e podem ser obtidos pela fórmula de recorrência:

   $$L_n(x) = (2n - x - 1)L_{n-1}(x) - (n-1)^3 L_{n-2}(x), \quad n = 2, 3, \cdots$$

4. Polinomios de Hermite

$$(f,g) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)g(x)e^{-x^2}dx, \quad w(x) = e^{-x^2}.$$

Os primeiros polinomios de Laguerre são:

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = 4x^2 - 2, \quad H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

e podem ser obtidos pela fórmula de recorrência:

$$H_n(x) = 2xH_{n-1}(x) - 2(n+1)H_{n-2}(x), \quad n = 2, 3, \cdots$$

Propriedades dos Polinomios Ortogonais

$\mathbf{P}_1$ Sejam $\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$ polinomios ortogonais não-nulos segundo um produto escalar qualquer. Então, $\{\phi_0, \phi_1, \cdots, \phi_n\}$ constitui uma base do espaço dos polinomios de grau $\leq n$.

Se $q(x)$ é um polinomio de grau $\leq n$ então $\exists\ \alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_n$ tais que $q(x) = \alpha_0\phi_0(x) + \alpha_1\phi_1(x) + \cdots + \alpha_n\phi_n(x)$

$\mathbf{P}_2$ Sejam $\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$ polinomios ortogonais não-nulos de grau $j = 0, 1, \cdots n$, segundo um produto escalar qualquer. Então $\phi_n(x)$ é ortogonal a qquer polinomio $q(x)$ de grau $< n$.

$$(q, \phi_n) = 0 \left\{ \begin{array}{ll} q(x) & = \alpha_0\phi_0(x) + \alpha_1\phi_1(x) + \cdots + \alpha_n\phi_{n-1}(x) \\ (q, \phi_n) & = (\alpha_0\phi_0(x) + \alpha_1\phi_1(x) + \cdots + \alpha_n\phi_{n-1}(x), \phi_n(x)) \\ & = \alpha_0(\phi_0, \phi_n) + \alpha_1(\phi_1, \phi_n) + \cdots + \alpha_{n-1}(\phi_0, \phi_n) = 0 \end{array} \right.$$

$\mathbf{P}_3$ Sejam $\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$ polinomios ortogonais não-nulos segundo o produto escalar

$$(f,g) = \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx \ \text{ com } w(x) \geq 0 \text{ e continua em } [a, /b].$$

Então, $\phi_n(x)$ tem n-raizes reais e distintas em $[a,\ b]$.

Teorema Quadratura de Gauss: Sejam $\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x), \phi_{n+1}(x)$, polinomios ortogonais não-nulos segundo o produto escalar (1) e sejam $x_0, x_1, \cdots, x_n$ as raizes de ϕ_{n+1}. Então, se $f(x)$ é um polinomio de grau $\leq 2n+1$,

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

onde

$$A_k = \int_a^b L_k(x)dx, \ L_k(x) \text{ polinomio de Lagrange em } x_0, x_1, \cdots, x_n$$

Prova: Como $x_0, x_1, \cdots, x_n$ são as raízes de ϕ_{n+1}, podemos escrever

$$\phi_{n+1}(x) = a_0(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \qquad [\text{por ex. } 2x^2-4 = \phi_2(x) = 2(x-1)(x+1)] \quad (9)$$

Agora, seja $P_n(x)$ o polinomio interpolador de $f(x)$ em $x_0, x_1, \cdots, x_n$. Então,

$$\begin{aligned} f(x) &= P_n(x) + R_n(x) \\ f(x) &= \sum_{k=0}^{n} L_k(x)f(x_k) + (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\frac{f^{n+1}(\xi_x)}{(n+1)!} \end{aligned} \quad (10)$$

Substituindo (9) em (10) vem:

$$f(x) - \sum_{k=0}^{n} L_k(x)f(x_k) = b_0\phi_{n+1}(x)\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \qquad b_0 = \frac{1}{a_0} \quad (11)$$

Por outro lado, como $f(x)$ é um polinomio de grau $\leq 2n+1$, temos que

$$\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} = g(x) \quad (12)$$

é um polinomio de grau $\leq n$. por ex:

$$\begin{cases} f(x) = x^5 - 2x^3 + 2x; \qquad 2n+1 \leq 5, \quad n = 2 \\ f'(x) = 5x^4 - 6x^2 + 2 \\ f''(x) = 20x^3 - 12x \\ f'''(x) = 20x^2 - 12 \end{cases}$$

Substituindo (12) em (11) obtemos:

$$f(x) - \sum_{k=0}^{n} L_k(x)f(x_k) = b_0\phi_{n+1}(x)g(x) \quad (13)$$

Pela propriedade $\mathbf{P}_1$, $\exists\ \alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_n$ tais que

$$g(x) = \alpha_0\phi_0(x) + \alpha_1\phi_1(x) + \cdots + \alpha_n\phi_n(x) \tag{14}$$

Substituindo (14) em (13) vem:

$$\begin{aligned} f(x) - \sum_{k=0}^{n} L_k(x)f(x_k) &= b_0\phi_{n+1}(x)\left[\alpha_0\phi_0(x) + \alpha_1\phi_1(x) + \cdots + \alpha_n\phi_n(x)\right] && (15) \\ &= b_0\left[\alpha_0\phi_{n+1}(x)\phi_0(x) + \alpha_1\phi_{n+1}(x)\phi_1(x) + \cdots + \alpha_n\phi_{n+1}(x)\phi_n(x)\right] && (16) \end{aligned}$$

Multiplicando ambos os lados de (16) por $w(x)$ tem-se:

$$\begin{aligned} w(x)\left[f(x) - \sum_{k=0}^{n} L_k(x)f(x_k)\right] &= w(x)\left\{b_0\left[\alpha_0\phi_{n+1}(x)\phi_0(x) + \alpha_1\phi_{n+1}(x)\phi_1(x)\right.\right. \\ &\qquad \left.\left. + \cdots + \alpha_n\phi_{n+1}(x)\phi_n(x)\right]\right\} \\ \left[f(x)w(x) - \sum_{k=0}^{n} L_k(x)w(x)f(x_k)\right] &= b_0\left[\alpha_0\phi_{n+1}(x)\phi_0(x)w(x) + \alpha_1\phi_{n+1}(x)\phi_1(x)w(x)\right. \\ &\qquad \left. + \cdots + \alpha_n\phi_{n+1}(x)\phi_n(x)w(x)\right] && (17) \end{aligned}$$

Integrando (17) em $[a,\ b]$, temos:

$$\left[\int_a^b f(x)w(x)dx - \int_a^b \sum_{k=0}^{n} w(x)L_k(x)f(x_k)dx\right] = b_0\left[\int_a^b \alpha_0\phi_{n+1}(x)\phi_0(x)w(x)dx\right.$$
$$\left. + \int_a^b \alpha_1\phi_{n+1}(x)\phi_1(x)w(x)dx + \cdots + \int_a^b \alpha_n\phi_{n+1}(x)\phi_n(x)w(x)dx\right]$$
$$\int_a^b f(x)w(x)dx - \sum_{k=0}^{n}\left[\int_a^b L_k(x)dx\right]f(x_k) = b_0\left[\alpha_0\overbrace{(\phi_0, \phi_{n+1})}^{=0} + \alpha_1\overbrace{(\phi_1, \phi_{n+1})}^{=0} \cdots + \alpha_n\overbrace{(\phi_n, \phi_{n+1})}^{=0}\right]$$

Logo,

$$\int_a^b f(x)w(x)dx - \sum_{k=0}^{n}\left[\int_a^b w(x)L_k(x)dx\right]f(x_k) = 0$$
$$\Longrightarrow\ \int_a^b f(x)w(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

onde $A_k = \int_a^b w(x)L_k(x)dx,\ L_k(x)$ polinomio de Lagrange em $x_0, x_1, \cdots, x_n$

Fórmulas de Quadratura de Gauss

São fórmulas usadas para se calcular $\int_a^b w(x)f(x)dx$, utilizando o resultado do teorema Quadratura de Gauss. Calculamos o valor aproximado da integral usando:

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = \sum_{k=0}^{k=n} A_k f(x_k) \ , \quad A_k = \int_a^b w(x)L_k(x)dx$$

onde $L_k(x)$ são os polinômios de Lagrange sobre as raizes $x_0, x_1, \cdots, x_n$ de $\phi_{n+1}(x)$.

O procedimento é o seguinte:

1. Determinar o polinômio ortogonal $\phi_{n+1}(x)$, segundo o produto escalar apropriado, isto 'e, com a função peso $w(x)$ e no intervalo $[a,\ b]$.
2. Calcular as raizes $x_0, x_1, \cdots, x_n$ de $\phi_{n+1}(x)$. de $\phi_{n+1}(x)$.
3. Determinar os polinômios de Lagrange $L_k(x)$, $k = 0, 1, \cdots, n$ usando os pontos $x_0, x_1, \cdots, x_n$.
4. Calcular $A_k = \int_a^b w(x)L_k(x)dx \ , \quad k = 0, 1, \cdots, n$.
5. Calcular $f(x)$ em $x_0, x_1, \cdots, x_n$.
6. Finalmente, calcular

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

Este procedimento é valido para qualquer produto escalar. Quando particularizamos o produto escalar aos ja visto anteriormente, isto 'e, quando usamos os polinômios de Legendre, Chebyshev, Laguerre, Hermite, precisamos apenas efetuar os passos 5 e 6 pois os valores de x_k e A_k já estão tabelados.

Instruções de uso das tabelas:

1. Os valores x_i e A_i são apresentados na forma normalizada, isto é, na forma $0.\cdots \times 10^j$, onde j aparece entre parêntesis, antes do número. Quando não aparecer j significa $j = 0$.

2. N = n+1

3. Quando o intervalo de integração for simétrico em relação a origem, as raizes x_i tambem o são. Nesse caso, a tabele apresenta apenas os x_i sem sinal, devendo-se considerar $\pm x_i$. Por exemplo, para o caso de Gauss-Legendre com N = 3, temos $n = 2$, isto é, x_0, x_1, x_2. Nesse caso, $x_0 = -0.77459...$, $x_1 = 0.0$, $x_2 = 0.77459$.