Curso: Métodos Numéricos II Professor: Creto Augusto Vidal

Semestre: 2021.1 Aula # 10

Objetivo: Deduzir as fórmulas de integração de Gauss-Legendre e compará-las com as fórmulas de Newton-Cotes

Problema: Desenvolver uma fórmula de Gauss-Legendre para a integração da equação (1). (1) $I = \int_a^b f(x) dx$

1. Argumentação para a proposta de mais uma fórmula de integração.

Todo mundo tem direito a exercer sua criatividade e propor novas maneiras de resolver o mesmo problema?

A resposta, obviamente, é sim. Porém, essa nova proposta é sempre avaliada considerando os seguintes aspectos que, na verdade, são um só, mas escritos de maneiras diferentes:

- 1) Para um esforço computacional equivalente ao de abordagens existentes, será que a nova abordagem produz resultados mais acurados?
- 2) Para a obtenção de uma acurácia equivalente à de abordagens existentes, será que a nova abordagem consegue isso com menor esforço computacional?

As Fórmulas de integração de Gauss-Legendre (também conhecidas como Quadraturas de Gauss-Legendre) vencem as Fórmulas de integração de Newton-Cotes. Isso é o que vamos ver durante o desenvolvimento dessas fórmulas.

2. Recapitulação dos conceitos básicos que valem para as duas abordagens (N-C) e (G-L).

Dado o problema de calcular a integral

(2)
$$I = \int_a^b f(x) dx,$$

a primeira coisa que avaliamos é: assumindo que a integral exista, nós sabemos resolver o problema usando as técnicas de integração estudadas na disciplina de Cálculo Integral?

Se a resposta for afirmativa, acabou-se o problema, nós vamos resolvê-lo de forma exata.

No entanto, se a resposta for negativa, nós vamos resolvê-lo de forma aproximada.

O ideal aqui é:

- 1) Desenhar o gráfico da função (para problemas de funções de uma variável isso é muito fácil) entre os limites de integração a e b (ou x_i e x_f);
- 2) Olhar pro jeitão do gráfico, e pensar qual seria o polinômio que poderia representar aquele jeitão. Analisando os pontos de inflexão nós poderíamos sugerir o grau adequado do polinômio candidato.
- 3) Se o grau do polinômio candidato for muito grande (o gráfico tem muitas ondulações), nós poderíamos particionar o problema em vários subproblemas e repetir os passos 1) e 2) acima. Dessa maneira, se fizermos muitas subdivisões, talvez um polinômio de grau 1 sirva para resolver o problema de forma adequada mesmo que ao custo de um grande esforço computacional (a função vai ser calculada em um número excessivo de pontos).

4) Agora o problema original será substituído por uma aproximação

(3)
$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \begin{cases} \int_a^b p(x)dx, & \text{ou} \\ \int_a^{a+\Delta x} p(x)dx \cdots \int_{a+(N-1)\Delta x}^b p(x)dx \end{cases}$$

onde N é o número de partições do intervalo de integração (número de subproblemas).

Independentemente da estratégia de particionar ou não o intervalo, nós substituímos o integrando original f(x) por um polinômio de grau adequado p(x).

3. Desenvolvimento das fórmulas de integração de Gauss-Legendre

Suponha que o grau do polinômio adequado seja G.

A fórmula de Newton-Cotes com polinômio de substituição de grau G vai precisar de (G+1) pontos de interpolação. Portanto, o **esforço computacional** medido apenas pelo número de cálculos da função (pontos de interpolação) é (G+1).

Vamos pensar ligeiramente diferente. Se tivermos uma fórmula de Newton-Cotes com n pontos de interpolação, qual seria o grau do polinômio que ela conseguiria integrar exatamente?

A resposta é simples. Sabendo-se que o número de pontos de interpolação para um polinômio de grau G é n=G+1, então G=n-1.

Assim, uma **fórmula de Newton-Cotes** com n pontos integra exatamente um polinômio de grau G = n - 1.

A **proposta de Gauss** é, com uma fórmula de n pontos, integrar exatamente um polinômio de grau G = 2n - 1.

Desculpem-me a linguagem chula, mas a fórmula mais **vagabunda** de Newton-Cotes, isto é, a regra do trapézio (n=2) integra exatamente um polinômio de grau G=1, enquanto a fórmula de Gauss com esforço equivalente integra um polinômio de grau G=3.

3.1 Preparação para a genialidade de Gauss

Para entender o que Gauss fez no desenvolvimento de sua fórmula vamos apresentar os seguintes conceitos:

- 1) Polinômios de Legendre;
- 2) Raízes dos polinômios de Legendre;
- 3) Ortogonalidade dos polinômios de Legendre no intervalo [-1, 1];
- 4) Base ortogonal de um espaço vetorial de polinômios;
- 5) Divisão de polinômios.

Não se apavore! Cruze as pernas, respire fundo e recite o mantra, e sua mente ficará pronta para o passo-a-passo que se segue. (*Trust me. I am a doctor.*)

3.1.1 Polinômios de Legendre

Os polinômios de Legendre, se expandidos, são polinômios como qualquer outro. Eles são formados por uma soma de monômios, cada um dos quais, é uma constate multiplicando uma dada potência da variável do polinômio.

A fórmula que define um polinômio de Legendre grau $m{n}$ é

(4)
$$P_n(\alpha) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{d\alpha^n} [(\alpha^2 - 1)^n].$$

Exemplos:

Grau 0:
$$P_0(\alpha) = \frac{1}{2^0 0!} \frac{d^0}{d\alpha^0} [(\alpha^2 - 1)^0] = 1;$$

Grau 1: $P_1(\alpha) = \frac{1}{2^1 1!} \frac{d^1}{d\alpha^1} [(\alpha^2 - 1)^1] = \frac{1}{2} 2\alpha = \alpha;$
Grau 2: $P_2(\alpha) = \frac{1}{2^2 2!} \frac{d^2}{d\alpha^2} [(\alpha^2 - 1)^2] = \frac{1}{8} \frac{d^2}{d\alpha^2} [\alpha^4 - 2\alpha^2 + 1] = \frac{1}{8} (12\alpha^2 - 4) = \frac{1}{2} (3\alpha^2 - 1);$
Grau 3: $P_3(\alpha) = \frac{1}{2^3 3!} \frac{d^3}{d\alpha^3} [(\alpha^2 - 1)^3] = \frac{1}{2} (5\alpha^3 - 3\alpha).$

3.1.2 Raízes dos Polinômios de Legendre

O que é uma raiz de um polinômio $p(\alpha)$? É o valor $\bar{\alpha}$ tal que $p(\bar{\alpha}) = 0$.

Os polinômios de Legendre têm propriedades interessantes com relação às suas raízes.:

- 1) Todas as raízes são distintas, isto é, a multiplicidade de cada raiz é 1;
- 2) Todas as raízes estão no intervalo de (-1, 1);
- 3) Cada raiz $\bar{\alpha}$ tem sua correspondente simétrica $\bar{\alpha}$.

Assim,

um polinômio de Legendre de grau $oldsymbol{n}$

tem n raízes distintas situadas, simetricamente, entre -1 e 1.

Vamos ver as raízes dos polinômios acima:

Grau 0:
$$P_0(\alpha) = 1 \rightarrow nenhuma\ raiz;$$

Grau 1:
$$P_1(\alpha) = \alpha = 0 \rightarrow \bar{\alpha}_1 = 0$$
;

Grau 2:
$$P_2(\alpha) = \frac{1}{2}(3\alpha^2 - 1) = 0 \rightarrow 3\bar{\alpha}^2 - 1 = 0 \rightarrow \bar{\alpha}_1 = -\sqrt{\frac{1}{3}}, \quad \bar{\alpha}_2 = +\sqrt{\frac{1}{3}};$$

Grau 3:
$$P_3(\alpha) = \frac{1}{2}(5\alpha^3 - 3\alpha) = 0 \rightarrow \alpha(5\alpha^2 - 3) = 0 \rightarrow \bar{\alpha}_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \ \bar{\alpha}_2 = 0 \ \bar{\alpha}_3 = +\sqrt{\frac{3}{5}}$$

3.1.3 Ortogonalidade dos polinômios de Legendre no intervalo [-1, 1]

Isso é muito simples. Nós sabemos que dois vetores são ortogonais entre si se eles formam um ângulo de noventa graus entre si. Em outras palavras, dois vetores são ortogonais entre si se a projeção de um sobre o outro é tem comprimento zero. Ou ainda em outras palavras, dois vetores são ortogonais entre si se o **produto escalar entre eles é zero**.

É justamente esse conceito de produto escalar nulo que nós vamos generalizar de forma intuitiva para funções (ou polinômios em particular).

Suponha que \mathbf{u} e \mathbf{v} sejam dois vetores do \mathbb{R}^m . Assim, se pensarmos em suas representações como arrays com m elementos indexados, o produto escalar desses dois vetores pode ser escrito como

(5)
$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{u}[1]\mathbf{v}[1] + \mathbf{u}[2]\mathbf{v}[2] + \dots + \mathbf{u}[m]\mathbf{v}[m] = \sum_{k=1}^{m} \mathbf{u}[k]\mathbf{v}[k].$$

Os índices dos arrays são discretos e existem m deles.

Vamos imaginar agora dois polinômios \mathbf{p} e \mathbf{q} na variável α , definidos no intervalo [-1, 1], e vamos pensar que eles são arrays com um número infinito de elementos indexados pela variável $\alpha \in \mathbb{R}$. Assim, o produto escalar desses dois polinômios (ou "arrays") pode ser pensado como o "somatório" dos infinitos produtos dos termos correspondentes (integral) de \mathbf{p} e de \mathbf{q} , isto é

(6)
$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} = \int_{-1}^{1} \mathbf{p}(\alpha) \mathbf{q}(\alpha) d\alpha$$
.

Em (6), ao invés de somatório, temos uma integração já que o índice é uma variável real contínua. Logo, com este conceito de produto escalar (ou produto interno), podemos dizer que os dois

polinômios são ortogonais no intervalo [-1, 1] se

(7)
$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} = \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \rangle = \int_{-1}^{1} \mathbf{p}(\alpha) \mathbf{q}(\alpha) d\alpha = 0.$$

Com essa definição podemos verificar que dois polinômios de Legendre $P_i(\alpha)$ e $P_j(\alpha)$ têm a seguinte propriedade no intervalo [-1, 1]

(8)
$$P_i(\alpha) \cdot P_j(\alpha) = \langle P_i(\alpha), P_j(\alpha) \rangle = \int_{-1}^{1} \mathbf{p}(\alpha) \mathbf{q}(\alpha) d\alpha = \begin{cases} 0, & \text{se } i \neq j; \\ \frac{2}{2i+1}, & \text{se } i = j. \end{cases}$$

A equação (8), em palavras, diz que dois polinômios de Legendre de graus distintos são ortogonais entre si no intervalo [-1, 1].

3.1.4 Base ortogonal de um espaço vetorial de polinômios

O conceito de espaço vetorial de álgebra linear é o de um conjunto onde determinadas condições de operações entre seus elementos são obedecidas (consulte um livro de álgebra linear).

Uma base de um espaço vetorial é o menor número de elementos desse conjunto que podem ser combinados linearmente para escrever qualquer elemento do conjunto. Assumindo que essas propriedades sejam válidas no conjunto de polinômios de grau n, qualquer polinômio de grau n pode ser escrito como uma combinação linear de n+1 polinômios linearmente independentes como os polinômios de Legendre de graus de n0 a n1.

Exemplo:

O polinômio de grau 2 abaixo está escrito como combinação dos elementos da base padrão (base canônica): $\{1,\alpha,\alpha^2\}$

(9)
$$p(\alpha) = a + b\alpha + c\alpha^2$$
.

Os elementos dessa base são linearmente independentes pois não é possível obter

$$1 = c_1 \alpha + c_2 \alpha^2$$
 ou $\alpha = c_0 1 + c_2 \alpha^2$ ou $\alpha^2 = c_0 1 + c_1 \alpha$.

No formalismo de álgebra linear isso é equivalente a dizer que esses elementos são linearmente independentes, se

$$c_0 1 + c_1 \alpha + c_2 \alpha^2 = 0$$

só for possível se $c_0 = c_1 = c_2 = 0$.

Esse mesmo polinômio $p(\alpha)=a+b\alpha+c\alpha^2$ pode ser obtido como combinação linear de outra base diferente da base canônica. Por exemplo, ele pode ser obtido combinando a base formada pelos polinômios de Legendre de graus 0 a 2. Para isso precisamos mostrar que existem coeficientes c_0, c_1 e c_2 tal que

(10)
$$p(\alpha) = a + b\alpha + c\alpha^2 = c_0 + c_1 + c_2 + c_2 + c_3 + c_4 +$$

Expandindo o lado direito da equação (10), temos

$$c_0 1 + c_1 \alpha + c_2 \frac{3}{2} \alpha^2 - c_2 \frac{1}{2} = \left(c_0 - \frac{1}{2}c_2\right) + c_1 \alpha + \frac{3}{2}c_2 \alpha^2.$$

Agora comparando esses coeficientes com os correspondentes do lado esquerdo da equação (10), temos que

$$\begin{cases} \frac{3}{2}c_2 = c \to c_2 = \frac{2}{3}c \\ c_1 = b \\ \left(c_0 - \frac{1}{2}c_2\right) = a \to c_0 = a + \frac{1}{2}c_2 = a + \frac{1}{2} \times \frac{2}{3}c \to c_0 = a + \frac{1}{3}c \end{cases}$$

Por tanto, o polinômio $p(\alpha)$ pode ser escrito com

$$p(\alpha) = c_0 \ 1 + c_1 \ \alpha + c_2 \frac{1}{2} (3\alpha^2 - 1).$$

3.1.5 Divisão de polinômios.

No ensino médio atual, creio que o assunto de divisão de polinômios seja ensinado. Vamos relembrar o que nos interessa.

Suponha que queiramos dividir um polinômio $p(\alpha)$ de grau G = 2n - 1 pelo polinômio de Legendre de grau n, ou seja $p(\alpha)$ é o dividendo e $P_n(\alpha)$ é o divisor. Assim, existe um polinômio $q(\alpha)$ que é o quociente e um polinômio $r(\alpha)$ que é o resto da divisão.

Tudo que nos interessa é saber duas coisas:

- 1) $p(\alpha) = P_n(\alpha) q(\alpha) + r(\alpha)$ (Dividendo = Divisor x Quociente + Resto)
- 2) Os graus possíveis de cada um desses polinômios.

Obviamente os graus do Dividendo e do divisor já foram dados: o grau de $p(\alpha)$, que é o Dividendo, é 2n-1; o grau de $P_n(\alpha)$, que é o divisor, é n.

• Primeiro vamos determinar qual é o grau de $q(\alpha)$.

O termo de maior expoente no Dividendo, $p(\alpha)$, é $\alpha^{2n-1} = \alpha^{2n}\alpha^{-1}$.

O termo de maior expoente no Divisor, $P_n(\alpha)$, é α^n .

Assim, o termo de maior expoente no Quociente, $q(\alpha)$, é $\frac{\alpha^{2n-1}}{\alpha^n} = \frac{\alpha^{2n}\alpha^{-1}}{\alpha^n} = \alpha^{n-1}$.

• Agora vamos determinar qual é o maior grau possível para $r(\alpha)$

Nós sabemos que, se o termo de maior expoente do Resto for igual ao maior o termo de maior expoente do Divisor, a divisão continua. No entanto, se ele for um grau menor do que o do Divisor, a divisão para. Assim, o maior grau que $r(\alpha)$ pode ter é n-1, já que $P_n(\alpha)$ tem grau n.

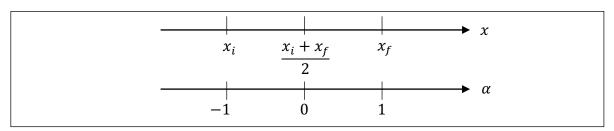
3.2 Apreciação da genialidade de Gauss

De volta ao problema a ser resolvido de forma aproximada, isto é

(11)
$$I = \int_{x_i}^{x_f} f(x) dx \approx \int_{x_i}^{x_f} p(x) dx$$
.

Vamos assumir que nossa análise do gráfico de f(x) nos indicou que p(x) deveria ter grau 2n-1. Não vamos ficar confusos. Vamos imaginar que o grau do polinômio de substituição seja 7, por exemplo. Então, $2n-1=7 \rightarrow n=\frac{8}{2}=4$. Então, Gauss quer desenvolver uma fórmula que usa apenas 4 pontos amostrais. Se fosse uma fórmula de Newton-Cotes, seriam necessários 8 pontos amostrais. Ok, isso foi só um exemplo para mostrar que se soubermos o grau de p(x) podemos determinar n e escrevê-lo como 2n-1.

Antes de fazer qualquer coisa, vamos fazer uma mudança de variável em (11) para que os limites de integração na nova variável sejam -1 e 1. Para isso, vamos ver a relação entre a variável $x \in [x_i, x_f]$ e a nova variável $\alpha \in [-1,1]$.



(12)
$$x(\alpha) = \frac{x_i + x_f}{2} + \frac{x_f - x_i}{2} \alpha$$

Em (12), podemos ver que

(13)
$$\begin{cases} x(-1) = \frac{x_i + x_f}{2} - \frac{x_f - x_i}{2} = x_i \\ x(0) = \frac{x_i + x_f}{2} \\ x(1) = \frac{x_i + x_f}{2} + \frac{x_f - x_i}{2} = x_f. \end{cases}$$

De (12), podemos obter

(14)
$$dx = \frac{x_f - x_i}{2} d\alpha.$$

Assim, após a mudança de variável, nosso problema pode ser escrito como

(15)
$$I = \int_{x_i}^{x_f} f(x) dx \approx \int_{x_i}^{x_f} p(x) dx = \frac{x_f - x_i}{2} \int_{-1}^{1} p(x(\alpha)) d\alpha = \frac{x_f - x_i}{2} \int_{-1}^{1} \bar{p}(\alpha) d\alpha.$$

Note que, como (12) é um polinômio de grau 1, o polinômio composto

(16)
$$\bar{p}(\alpha) = p(x(\alpha))$$

continua tendo grau 2n-1 em α .

Se $\bar{p}(\alpha)$ for considerado o Dividendo na divisão em que o Divisor é o polinômio de Legendre de grau n, $P_n(\alpha)$, então podemos escrever

(17)
$$\bar{p}(\alpha) = P_n(\alpha)q(\alpha) + r(\alpha)$$
.

Vamos substituir (17) em (15) para obter

(18)
$$I = \int_{x_i}^{x_f} f(x) dx \approx \frac{x_f - x_i}{2} \int_{-1}^{1} \bar{p}(\alpha) d\alpha = \frac{x_f - x_i}{2} \int_{-1}^{1} (P_n(\alpha) q(\alpha) + r(\alpha)) d\alpha.$$

Sabendo que $q(\alpha)$ é um polinômio de grau n-1, ele pode ser escrito como uma combinação linear dos elementos da base polinomial formada pelos polinômios de Legendre de graus 0 a n-1, isto é

(19)
$$q(\alpha) = c_0 P_0(\alpha) + c_1 P_1(\alpha) + \dots + c_{n-1} P_{n-1}(\alpha) = \sum_{k=0}^{n-1} c_k P_k(\alpha).$$

Substituindo (19) em (18), temos

(20)
$$I \approx \frac{x_f - x_i}{2} \int_{-1}^{1} \left(P_n(\alpha) \sum_{k=0}^{n-1} c_k P_k(\alpha) + r(\alpha) \right) d\alpha$$
$$= \frac{x_f - x_i}{2} \int_{-1}^{1} \left(\sum_{k=0}^{n-1} c_k P_n(\alpha) P_k(\alpha) + r(\alpha) \right) d\alpha$$

Mas a integral da soma é igual à soma das integrais. Assim, podemos reescrever (20) como

(21)
$$I \approx \frac{x_f - x_i}{2} \left[\sum_{k=0}^{n-1} \left(c_k \int_{-1}^1 \left(P_n(\alpha) P_k(\alpha) \right) d\alpha \right) + \int_{-1}^1 r(\alpha) d\alpha \right].$$

Porém, como os polinômios de Legendre são ortogonais entre si no intervalo [-1, 1], as integrais

$$\int_{-1}^{1} (P_n(\alpha) P_k(\alpha)) d\alpha = 0$$

já que $k=1,2,\ldots,n-1 \neq n$. Assim, a equação (21) é reduzida a

(22)
$$I \approx \frac{x_f - x_i}{2} \left[\int_{-1}^1 r(\alpha) d\alpha \right].$$

Sabemos que $r(\alpha)$ é um polinômio de grau n-1. Assim, se soubéssemos n pontos por onde esse polinômio passa, poderíamos reconstruir o polinômio, usando interpolação de Lagrange. De fato, o polinômio de interpolação de Lagrange passando por aqueles n pontos teria grau n-1 e seria o próprio $r(\alpha)$ já que não existem polinômios diferentes de grau n que passem pelos mesmos n-1 pontos. Por exemplo, a reta que passa por dois pontos é única. Também, só existe uma parábola que passa por três pontos dados, e assim por diante.

Vamos fazer uma experiência com as n raízes do polinômio $P_n(\alpha)$ de Legendre. Vamos substituir cada uma delas na equação (17). Assim, para cada raiz α_i de $P_n(\alpha)$, a equação (17) seria escrita como

(23)
$$\bar{p}(\alpha_i) = P_n(\alpha_i)q(\alpha_i) + r(\alpha_i)$$
.

Porém, como α_i é raiz de $P_n(\alpha)$, $P_n(\alpha_i)=0$. Portanto, em cada raiz de $P_n(\alpha)$ a equação (23) se reduz a

(24)
$$\bar{p}(\alpha_i) = r(\alpha_i), i = 1, ..., n.$$

Isso é genial. Os n pontos que precisamos para construir o polinômio $r(\alpha)$ vêm do próprio integrando calculado em cada raiz do polinômio de Legendre $P_n(\alpha)$. Finalmente, como foi visto em Métodos Numéricos I, $r(\alpha)$ pode ser escrito como o polinômio de interpolação de Lagrange que passa por esses n pontos de interpolação. Assim

$$(25) \quad r(\alpha) = \bar{p}(\alpha_1)L_1(\alpha) + \bar{p}(\alpha_2)L_2(\alpha) + \dots + \bar{p}(\alpha_n)L_n(\alpha) = \sum_{k=1}^n \bar{p}(\alpha_k)L_k(\alpha).$$

Depois eu reviso a interpolação de Lagrange e digo como obter os $L_k(\alpha)$, mas, agora, vamos para o golpe final. Vamos substituir (25) em (22) para obtermos a nossa fórmula de Gauss-Legendre, isto é

(26)
$$I \approx \frac{x_f - x_i}{2} \left[\int_{-1}^1 r(\alpha) d\alpha \right]$$
$$= \frac{x_f - x_i}{2} \left[\int_{-1}^1 \sum_{k=1}^n \bar{p}(\alpha_k) L_k(\alpha) d\alpha \right]$$
$$= \frac{x_f - x_i}{2} \left[\sum_{k=1}^n \bar{p}(\alpha_k) \int_{-1}^1 L_k(\alpha) d\alpha \right]$$

Finalmente,

A famosa Quadratura de Gauss-Legendre

(27)
$$I = \int_{x_i}^{x_f} f(x) dx \approx \frac{x_f - x_i}{2} \left[\sum_{k=1}^n \bar{p}(\alpha_k) w_k \right] = \frac{x_f - x_i}{2} \left[\sum_{k=1}^n p(x(\alpha_k)) w_k \right]$$

onde

i)
$$x(\alpha_k) = \frac{x_i + x_f}{2} + \frac{x_f - x_i}{2} \alpha_k$$

- ii) α_k , k=1,2,...n são as raízes do polinômio de Legendre de grau n, $P_n(\alpha)$ e
- iii) w_k , k=1,2,...n são os pesos correspondente dados por $w_k=\int_{-1}^1 L_k(\alpha)d\alpha$.

Vamos descansar agora.

Na próxima aula, vamos recapitular o as funções de interpolação de Lagrange $L_k(\alpha)$ e desenvolver as fórmulas específicas para n=2 e 3, para que vocês possam fazer a fórmula com n=4.

Tarefa: A única tarefa é ler e reler esse documento tantas vezes quantas forem necessárias para vocês entendam cada etapa do desenvolvimento.