Quadratura de Gauss

Doherty Andrade

doherty200@hotmail.com

1 Introdução

Dizemos que uma família de polinômios não nulos \$p_0(x), p_1(x), . . . , p_n(x), . . . \$ é uma família de polinômios ortogonais, relativamente ao produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$, se verifica o seguinte

$$\langle p_i(x), p_j(x) \rangle = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ C_i \neq 0, & i = j. \end{cases}$$

No estudo dos polinômios, utiliza-se produtos internos da forma

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx,$$

onde $\omega(x) \geq 0$ e $\omega(x) \not\equiv 0$ em cada subintervalo de $[a, b]$ e integrável em $[a, b]$ é chamada de função peso.

Os seguintes produtos internos são os mais comumente utilizados na determinação de polinômios ortogonais.

(1i) $\langle f, g \rangle = \displaystyle\int_{-1}^{1} f(x) g(x) dx$, isto é, $\omega(x) \equiv 1$ e $a = -1, b = 1$. Este produto interno dará origem aos polinômios de Legendre.

Os polinômios de Legendre podem ser determinados pela seguinte lei de recorrência

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= x \\ (n+1)P_{n+1}(x) &= (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x). \end{aligned} \tag{1}$$

Outra forma de determiná-los é pela igualdade:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n.$$

(2i) $\langle f, g \rangle = \displaystyle\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1 - x^2}} f(x) g(x) dx$, isto é, $\omega(x) = \dfrac{1}{\sqrt{1 - x^2}}$ e $a = -1, b = 1$. Este produto interno dará origem aos polinômios de Tchebycheff.

Uma forma alternativa para construir os polinômios de Tchebyscheff é dada por, para $n \geq 1$

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x),$$

onde $T_0(x) = 1$, $T_1(x) = x$.

(3i) $\langle f,g\rangle = \int_0^{\infty} e^{-x} f(x)g(x)dx$, isto é, $\omega(x) = e^{-x}$ e $a = 0, b = \infty$. Este produto interno dará origem aos polinômios de Laguerre.

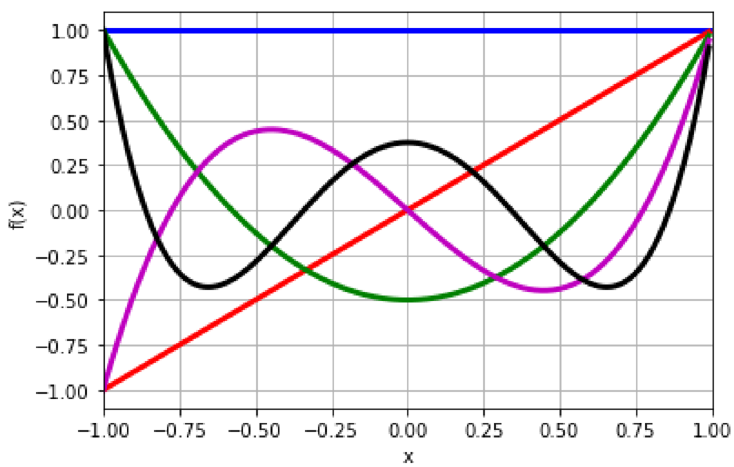
(4i) $\langle f,g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x)g(x)dx$, isto é, $\omega(x) = e^{-x^2}$ e $a = -\infty, b = \infty$. Este produto interno dará origem aos polinômios de Hermite.

Vamos utilizar a biblioteca Python chamada mpmath para trabalhar com polinômios ortogonais.

```
In [1]: from mpmath import *
        mp.dps = 15; mp.pretty = True
```

2 Polinômios de Legendre

```
In [10]: # Legendre polynomials P_n(x) on [-1,1] for n=0,1,2,3,4
         f0 = lambda x: legendre(0,x)
         f1 = lambda x: legendre(1,x)
         f2 = lambda x: legendre(2,x)
         f3 = lambda x: legendre(3,x)
         f4 = lambda x: legendre(4,x)
         plot([f0,f1,f2,f3,f4],[-1,1])
```



Alguns polinômios de Legendre (não normalizados).

Grau	Polinômios de Legendre
0	1
1	x
2	$3x^2/2-1/2$
3	$5x^3/2-3x/2$
4	$\frac{35}{8}x^4-\frac{15}{4}x^2+3/8$
5	$\frac{63}{8}x^5-\frac{35}{4}x^3+\frac{15}{8}x$
6	$\frac{231}{16}x^6-\frac{315}{16}x^4+\frac{105}{16}x^2-\frac{5}{16}$
7	$\frac{429}{16}x^7-\frac{693}{16}x^5+\frac{315}{16}x^3-\frac{35}{16}x$
8	$\frac{6435}{128}x^8-\frac{3003}{32}x^6+\frac{3465}{64}x^4-\frac{315}{32}x^2+\frac{35}{128}$
9	$\frac{12155}{128}x^9-\frac{6435}{32}x^7+\frac{9009}{64}x^5-\frac{1155}{32}x^3+\frac{315}{128}x$
10	$\frac{46189}{256}x^{10}-\frac{109395}{256}x^8+\frac{45045}{128}x^6-\frac{15015}{128}x^4+\frac{3465}{256}x^2-\frac{63}{256}$

Vamos testar a ortogonalidade de alguns polinômios de Legendre.

```
In [3]: for j in range(5):
            for k in range(5):
                R = chop(quad(lambda x: legendre(j,x)*legendre(k,x), [-1, 1]))
                print(j,k, R)
```

```
0 0 2.0
0 1 0.0
0 2 0.0
0 3 0.0
0 4 0.0
1 0 0.0
1 1 0.666666666666667
1 2 0.0
1 3 0.0
1 4 0.0
2 0 0.0
2 1 0.0
2 2 0.4
2 3 0.0
2 4 0.0
3 0 0.0
3 1 0.0
3 2 0.0
3 3 0.285714285714286
3 4 0.0
4 0 0.0
4 1 0.0
4 2 0.0
4 3 0.0
4 4 0.222222222222222
```

3 Polinômios de Tchebycheff

```
In [4]: # Chebyshev polynomials T_n(x) on [-1,1] for n=0,1,2,3,4
        f0 = lambda x: chebyt(0,x)
        f1 = lambda x: chebyt(1,x)
        f2 = lambda x: chebyt(2,x)
        f3 = lambda x: chebyt(3,x)
        f4 = lambda x: chebyt(4,x)
        plot([f0,f1,f2,f3,f4],[-1,1])
```

Veja alguns dos polinômios ortogonais de Tchebycheff.

Grau	Polinômios de Tchebyceff
0	1
1	x
2	$2\,x^2 - 1$
3	$4\,x^3 - 3\,x$
4	$8\,x^4 - 8\,x^2 + 1$
5	$16\,x^5 - 20\,x^3 + 5\,x$
6	$32\,x^6 - 48\,x^4 + 18\,x^2 - 1$
7	$64\,x^7 - 112\,x^5 + 56\,x^3 - 7\,x$
8	$128\,x^8 - 256\,x^6 + 160\,x^4 - 32\,x^2 + 1$
9	$256\,x^9 - 576\,x^7 + 432\,x^5 - 120\,x^3 + 9\,x$
10	$512x^{10} - 1280\,x^8 + 1120\,x^6 - 400\,x^4 + 50\,x^2 - 1$

Verificando a ortogonalidade entre alguns polinômios de Tchebycheff.

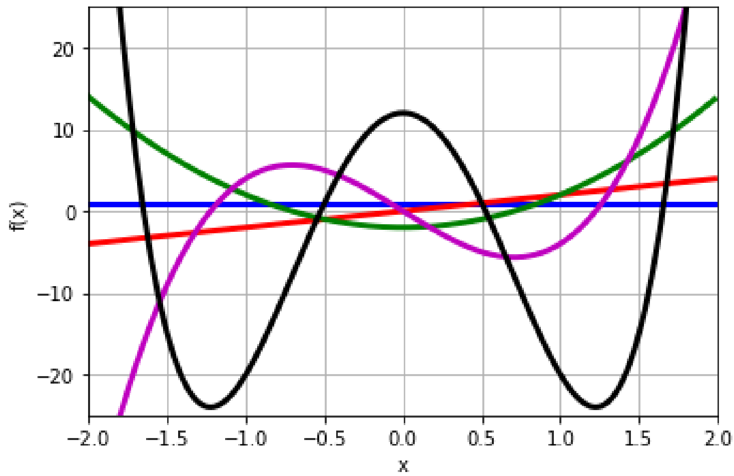
```
In [5]: for j in range(5):
            for k in range(5):
                R = chop(quad(lambda x: chebyt(j,x)*chebyt(k,x)/sqrt(1-x**2), [-1, 1]))
                print(j,k, R)
```

```
0 0 3.14159265252864
0 1 0.0
```

```
0 2 -1.33982266404492e-9
0 3 0.0
0 4 -1.06115030127495e-9
1 0 0.0
1 1 1.57079632545507
1 2 0.0
1 3 -1.06115030127492e-9
1 4 0.0
2 0 -1.33982266404492e-9
2 1 0.0
2 2 1.57079632573375
2 3 0.0
2 4 -1.06115030127495e-9
3 0 0.0
3 1 -1.06115030127492e-9
3 2 0.0
3 3 1.57079632573375
3 4 0.0
4 0 -1.06115030127495e-9
4 1 0.0
4 2 -1.06115030127495e-9
4 3 0.0
4 4 1.57079632596448
```

4 Polinômios de Hermite

```
In [6]: # Hermite polynomials H_n(x) on the real line for n=0,1,2,3,4
        f0 = lambda x: hermite(0,x)
        f1 = lambda x: hermite(1,x)
        f2 = lambda x: hermite(2,x)
        f3 = lambda x: hermite(3,x)
        f4 = lambda x: hermite(4,x)
        plot([f0,f1,f2,f3,f4],[-2,2],[-25,25])
```



Alguns polinômios de Hermite

Grau	Polinômios de Hermite
0	1
1	$2\,x$
2	$4\,x^2 - 2$
3	$8\,x^3 - 12\,x$
4	$16\,x^4 - 48\,x^2 + 12$
5	$32\,x^5 - 160\,x^3 + 120\,x$
6	$64\,x^6 - 480\,x^4 + 720\,x^2 - 120$
7	$128\,x^7 - 1344\,x^5 + 3360\,x^3 - 1680\,x$
8	$256\,x^8 - 3584\,x^6 + 13440\,x^4 - 13440\,x^2 + 1680$
9	$512\,x^9 - 9216\,x^7 + 48384\,x^5 - 80640\,x^3 + 30240\,x$
10	$1024\,x^{10} - 23040\,x^8 + 161280\,x^6 - 403200\,x^4 + 302400\,x^2 - 30240$

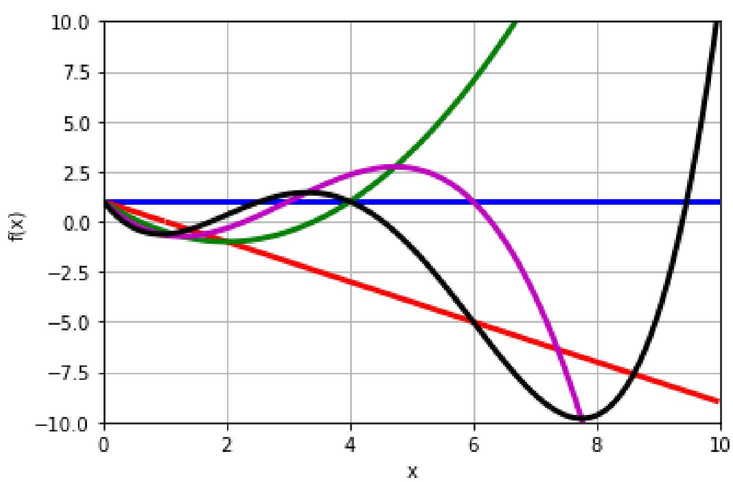
```
In [7]: for j in range(5):
            for k in range(5):
                R = chop(quad(lambda x: hermite(j,x)*hermite(k,x)*exp(-x**2), [-inf,inf]))
                print(j,k, R)
```

```
0 0 1.77245385090552
0 1 0.0
0 2 0.0
0 3 0.0
0 4 0.0
1 0 0.0
1 1 3.54490770181103
1 2 0.0
1 3 0.0
1 4 0.0
2 0 0.0
2 1 0.0
2 2 14.1796308072441
```

```
2 3 0.0
2 4 0.0
3 0 0.0
3 1 0.0
3 2 0.0
3 3 85.0777848434648
3 4 0.0
4 0 0.0
4 1 0.0
4 2 0.0
4 3 0.0
4 4 680.622278747718
```

5 Polinômios de Laguerre

In [8]:
```
# laguerre polynomials L_n(x) on the real line for n=0,1,2,3,4
f0 = lambda x: laguerre(0,0,x)
f1 = lambda x: laguerre(1,0,x)
f2 = lambda x: laguerre(2,0,x)
f3 = lambda x: laguerre(3,0,x)
f4 = lambda x: laguerre(4,0,x)
plot([f0,f1,f2,f3,f4],[0,10],[-10,10])
```



Grau	Polinômios de Laguerre
0	1
1	$1 - x$
2	$1 - 2\,x + 1/2\,x^2$
3	$1 - 3\,x + 3/2\,x^2 - 1/6\,x^3$
4	$1 - 4\,x + 3\,x^2 - 2/3\,x^3 + 1/24\,x^4$
5	$1 - 5\,x + 5\,x^2 - 5/3\,x^3 + \frac{5}{24}\,x^4 - \frac{1}{120}\,x^5$
6	$1 - 6\,x + 15/2\,x^2 - 10/3\,x^3 + 5/8\,x^4 - 1/20\,x^5 + \frac{1}{720}\,x^6$
7	$1 - 7\,x + 21/2\,x^2 - \frac{35}{6}\,x^3 + \frac{35}{24}\,x^4 - \frac{7}{40}\,x^5 + \frac{7}{720}\,x^6 - \frac{1}{5040}\,x^7$
8	$1 - 8\,x + 14\,x^2 - \frac{28}{3}\,x^3 + \frac{35}{12}\,x^4 - \frac{7}{15}\,x^5 + \frac{7}{180}\,x^6 - \frac{1}{630}\,x^7 + \frac{1}{40320}\,x^8$
9	$1 - 9\,x + 18\,x^2 - 14\,x^3 + \frac{21}{4}\,x^4 - \frac{21}{20}\,x^5 + \frac{7}{60}\,x^6 - \frac{1}{140}\,x^7 + \frac{1}{4480}\,x^8 - \frac{1}{362880}\,x^9$
10	$1 - 10\,x + \frac{45}{2}\,x^2 - 20\,x^3 + \frac{35}{4}\,x^4 - \frac{21}{10}\,x^5 + \frac{7}{24}\,x^6 - 1/42\,x^7 + \frac{1}{896}\,x^8 - \frac{1}{36288}\,x^9 + \frac{1}{3628800}\,x^{10}$

Teste a ortogonalidade de alguns polinômios de Laguerre.

```
In [9]: from mpmath import *
        Lj = lambda x: laguerre(j,0,x)
        Lk = lambda x: laguerre(k,0,x)
        j = 5
        k = 4
        #calculando o produto interno
        chop(quad(lambda x: exp(-x)*Lj(x)*Lk(x), [0,inf]))

Out[9]: 0.0
```

6 Aplicação

1.Propriedade: Se $p_0(x), p_1(x), \ldots, p_n(x)$ são polinômios ortogonais segundo o produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx,$$

onde $\omega(x) \geq 0$ e $\omega(x) \not\equiv 0$ em cada subintervalo de $[a, b]$ é contínua em $[a, b]$, então $p_n(x)$ possui n raízes reais distintas pertencentes ao intervalo (a, b). Além disso, $p_n(x)$ e $p_{n+1}(x)$ possuem raízes entrelaçadas.

2. Integração numérica

Os métodos de integração numérica baseados nas fórmulas de Newton-Cotes considera pontos fixos igualmente espaçados. Gauss observou que a precisão poderia ser melhorada se as abscissas e os pesos não tiverem restrição.

Assim,

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n} \omega_i f(x_i),$$

onde agora os pesos $\omega_0, \omega_1, \ldots, \omega_n$ e os nós $x_0, x_1, \ldots, x_n$ são determinados para obter a melhor precisão possível, isto é, deverá ser exata para polinômios de grau até $2n + 1$.

As fórmulas de quadratura de Gauss são baseadas no seguinte Teorema, que é a propriedade mais importante dos polinômios ortogonais.

TEOREMA: Sejam $p_0(x), p_1(x), p_2(x), ...,p_n(x),p_{n+1}(x) ...$ polinômios não nulos e ortogonais, segundo o produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx,$$

onde $\omega(x) \geq 0$ e $\omega(x) \not\equiv 0$ em cada subintervalo de $[a, b]$ é contínua em $[a, b]$. Sejam $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$ as raízes de $p_{n+1}(x)$. Se $f(x)$ é um polinômio de grau menor do que ou igual a $2n + 1$, então

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

onde

$$\omega_k = \int_a^b \omega(x) L_k(x) dx$$

com $P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L_k(x)$ é o polinômio interpolador de Lagrange que interpola f nos pontos $x_k, k = 0, 1, \ldots, n$.

Observamos que as raízes dos polinômios ortogonais são simétricas com relação à origem e que os pesos associados a raízes de mesmo módulo são iguais.

7 Exemplo: integração de Gauss-Legendre.

Uma tabela de pesos e abscissas é dada a seguir para ilustar o método de integração.

Integração Gauss-Legendre

t_k - Raízes	ω_k - Pesos
$t_0 = 0.0$	$\omega_0 = 2.0000000$
$t_1 = -t_0 = 0.57735027$	$\omega_0 = \omega_1 = 1.0$
$t_1 = 0,$ $t_2 = -t_0 = 0.77459667$	$\omega_1 = 0.88888888$ $\omega_0 = \omega_2 = 0.555555556$
$t_2 = -t_1 = 0.33998104$ $t_3 = -t_0 = 0.86113631$	$\omega_2 = \omega_1 = 0.65214515$ $\omega_3 = \omega_0 = 0.34785496$
$t_4 = -t_0 = 0.90617985$ $t_3 = -t_1$=0.53846931 $t_2 = 0.0$	$\omega_4 = \omega_0$=0.23692687 $\omega_3 = \omega_1 = 0.47862865$ $\omega_2 = 0.56888891$

Vamos obter uma aproximação para $\int_{-1}^{1} \frac{\sin^2(x)}{x} dx$ usando quadratura de Gauss-Legendre com 4 pontos.

Os pesos ω_k e as abscissas t_k estão na tabela acima. As abscissas t_k são as raízes do polinômio $P_4(x)$ de Legendre: $t_2 = -t_1 = 0.33998104,$ t_3=-t_0=0.86113631$ e os pesos $ \omega_2 = \omega_1 = 0.65214515, \omega_3 = \omega_0 = 0.34785496$.

Assim a integral é

$$\int_{-1}^{1} \frac{\sin^2(x)}{x} dx \approx \sum_{k=0}^{3} \omega_k F(t_k) = 0.$$

como esperado.

8 Exemplo: quadratura de Gauss-Tchebycheff

Calcule a integral $\int_0^{10} \exp(-x)dx$ usando quadratura de Gauss-Tchebycheff com quatro pontos.

Primeiramente, devemos fazer uma mudança de variável para passar a integral para o intervalo $[-1, 1]$. Assim,

$$I = \int_0^{10} \exp(-x)dx = 5\int_{-1}^{1} \exp(-(5t+5))dt$$

Agora devemos incluir a função peso

$$I = \int_0^{10} \exp(-x)dx = 5\int_{-1}^{1} \sqrt{1-t^2}\exp(-(5t+5))\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}dt.$$

Note que a função $F(t)$ é dada por

$$F(t) = \sqrt{1-t^2}\exp(-(5t+5)).$$

Assim,

$$I \approx 5.\frac{\pi}{4}\left[F(t_0) + F(t_1) + F(t_2) + F(t_3)\right] = 1.196440816.$$

Entendendo a tabela: Nesta tabela as raízes são simétricas com relação a origem, assim devemos considerar $\pm t_i$. Os pesos são iguais para cada grau do polinômio.

Tabela Gauss-Tchebycheff

$\pm t_i$	ω_i
0.7071067812	1.570796326
0.8660254038	1.047197551
0.0	1.047197551
0.9238795325	0.7853981634
0.3826834323	0.7853981634
0.9510565163	0.6283185308
0.5877852523	0.6283185308
0.0	0.6283185308

9 Quadratura de Gauss-Laguerre

Veja a seguir a tabela com os pesos e abscissas para o cálculo de integrais pelo método de Gauss-Laguerre.

Como exemplo vamos determinar uma aproximação para $\int_0^{\infty} e^{-x}\sin(x)dx$ usando a quadratura de Gauss-Laguerre com 3 pontos.

Tomando os dados da tabela, obtemos

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty} e^{-x}\sin(x)dx \quad &\approx \quad 0.7110930099 \cdot \sin(.4157745567) + 0.2785177335 \cdot \sin(2.294280360) \\ &\quad +0.01038925650 \cdot \sin(6.289945082) = 0.4960298273\end{aligned}$$

Quadratura Gauss-Laguerre

t_k- Raízes- sempre positivos	ω_k- Pesos
0.5857864376	0.8535533905
0.3414213562×10^{1}	0.1464466094
0.4157745567	0.7110930099
0.2294280360×10^{1}	0.2785177335
0.6289945082×10^{1}	$0.1038925650\times10^{-1}$
0.3225476896	0.6031541043
0.1745761101×10^{1}	0.3574186924
0.4536620296×10^{1}	$0.3888790851\times10^{-1}$
0.9395070912×10^{1}	$0.5392947055\times10^{-3}$
0.2635603197	0.5217556105
0.1413403059×10^{1}	0.3986668110
0.3596425771×10^{1}	$0.7594244968\times10^{-1}$
0.7085810005×10^{1}	$0.3611758679\times10^{-2}$
0.1264080084×10^{2}	$0.2336997238\times10^{-4}$
0.2228466041	0.4589646739
0.1188932101×10^{1}	0.4170008307
0.2992736326×10^{1}	0.1133733820
0.5775143569×10^{1}	$0.1039919745\times10^{-1}$
0.9837467418×10^{1}	$0.2610172028\times10^{-3}$
0.1598297398×10^{2}	$0.8985479064\times10^{-6}$

10 Quadratura de Gauss-Hermite

A fórmula de quadratura de Gauss-Hermite é utilizada para calcular uma aproximação para a integral imprópria do tipo

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x)dx.$$

Os pesos e as abscissas são determinados utilizando os polinômios ortogonais de Hermite. Veja a tabela com os pesos e as abscissas.

Como exemplo, vamos usar a quadratura de Gauss-Hermite para determinar uma aproximação para a integral $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^2 dx$ usando 2 pontos.

Estamos dentro das condições de integração de Gauss-Hermite, com $f(x) = x^2$. Usando a tabela, temos $x_0 = -0.7071067811$, $x_1 = 0.7071067811$ e $\omega_0 = \omega_1 = 0.8862269254$, donde $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^2 dx \approx \omega_0 f(x_0) + \omega_1 f(x_1) = 0.8862269253$.

References

[1] D. Andrade, Métodos Numéricos. Notas de Aula (1994).

[2] S. D. Conte, Elementary Numerical Analysis. MacGraw-Hill, 1965.

Quadratura Gauss-Hermite

$\pm t_k$ - Raízes	ω_k - Pesos
0.7071067811	0.8862269254
0.1224744871×10^{1}	0.2954089751
0.0000000000	$0.1181635900\ \times10^{1}$
0.1650680123×10^{1}	$0.8131283544\times10^{-1}$
0.5246476323	0.8049140900
0.2020182870×10^{1}	$0.1995324205\times10^{-1}$
0.9585724646	0.3936193231
0.0000000000	0.9453087212
0.2350604973×10^{1}	$0.4530009905\times10^{-2}$
0.1335849074×10^{1}	0.1570673203
0.4360774119	0.7246295952