MATEMÁTICA COMPUTACIONAL

Cap. 8. Integração Numérica

Filipe J. Romeiras

Departamento de Matemática
Instituto Superior Técnico

Dezembro de 2007

Apontamentos das aulas da disciplina do mesmo nome do 2º ano do
Mestrado Integrado em Engenharia Física Tecnológica

8. INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

Introdução.

• Neste capítulo derivamos e analisamos métodos numéricos para calcular integrais definidos da forma

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

com $[a, b]$ finito. Estes métodos são necessários para o cálculo de integrais tais que:

- ◇ a primitiva da função integranda não é conhecida;
- ◇ embora conhecida a primitiva da função integranda é demasiado complicada, tornando mais rápido o cálculo numérico do integral;
- ◇ a integranda é conhecida apenas num número finito de pontos.

Além disso estes métodos de *integração numérica* ou *quadratura numérica* constituem uma ferramenta básica para a resolução numérica de equações diferenciais e equações integrais.

A maior parte dos métodos de integração numérica para calcular $I(f)$ encaixa-se no seguinte esquema: sendo f_n uma função aproximadora de f, define-se a **fórmula de integração ou quadratura numérica** por

$$I_n(f) := I(f_n).$$

f_n deve ser tal que $I(f_n)$ possa ser calculado facilmente. O erro de integração será calculado a partir do erro da função aproximadora f_n em relação a f:

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f) = I(f - f_n).$$

A maior parte das fórmulas de integração numérica usam para funções aproximadoras f_n os polinómios interpoladores p_n ou funções interpoladoras seccionalmente polinomiais. Estudaremos seguidamente:

- ◇ as fórmulas de integração de Newton-Cotes, em que os polinómios interpoladores são suportados em nós igualmente espaçados;
- ◇ as fórmulas de integração de Gauss, em que os polinómios interpoladores são suportados em nós cuidadosamente escolhidos, e que não são igualmente espaçados; estas fórmulas são óptimas num certo sentido e têm convergência muito rápida.
- ◇ as fórmulas compostas correspondentes.

As fórmulas de integração numérica assim obtidas têm a forma

$$I_n(f) = \sum_{j=0}^{n} w_{j,n} f(x_{j,n}), \qquad n \in \mathbb{N}.$$

Os coeficientes $w_{j,n}$ são chamados os **pesos de integração** ou **pesos de quadratura**; os pontos $x_{j,n}$ são chamados os **nós de integração** ou **nós de quadratura**, normalmente escolhidos em $[a, b]$. A dependência em n é em geral suprimida, escrevendo-se w_j e x_j, mas subentendida implicitamente. Os métodos usuais de integração numérica têm nós e pesos com forma simples ou que são fornecidos em tabelas facilmente acessíveis. Não há em geral necessidade de construir explicitamente as funções aproximadoras f_n, embora seja útil ter presente o seu papel em definir $I_n(f)$.

Fórmulas de quadratura interpolatória polinomial (FQIP)

Proposição. Seja $f \in C([a, b])$ e $p_n \in \mathcal{P}_n$ o polinómio interpolador de f nos pontos $x_0, x_1, \ldots, x_n$ distintos do intervalo $[a, b]$. A FQIP de ordem n de f é definida por:

$$I_n(f) := I(p_n),$$

e tem a forma

$$I_n(f) = \sum_{j=0}^{n} w_{j,n} f(x_{j,n}),$$

com pesos

$$w_{j,n} = I(l_{j,n}) = \int_a^b \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}} \frac{x - x_{i,n}}{x_{j,n} - x_{i,n}} \, dx.$$

Dem.: $(\cdots)$

Notas. (i) $\mathcal{P}_n$ designa o conjunto de polinómios de grau menor ou igual a n.

(ii) $\displaystyle\sum_{j=0}^{n} w_{j,n} = b - a$

(iii) Sendo $f \in \mathcal{P}_n$, f coincide com o seu polinómio interpolador $p_n \in \mathcal{P}_n$ e, portanto,

$$I_n(f) = I(p_n) = I(f).$$

Proposição. Dados $n + 1$ pontos distintos $x_0, x_1, \ldots, x_n$ do intervalo $[a, b]$ a FQIP de ordem n é unicamente determinada pela propriedade de que integra exactamente todos os polinómios de grau menor ou igual a n, isto é,

$$I_n(q) = I(q), \qquad \forall q \in \mathcal{P}_n.$$

Dem.: $(\cdots)$

Nota. Esta condição traduz-se no sistema de equações

$$I_n(x^k) = I(x^k), \qquad k = 0, 1, \ldots, n.$$

Trata-se de um sistema de equações lineares nos pesos de integração. Este método de determinar as FQIP é muitas vezes designado por *método dos coeficientes indeterminados*.

Exemplo. Determinar as FQIP de ordens 1 e 2 pelas duas vias indicadas nas duas proposições, isto é, integração dos polinómios de Lagrange e método dos coeficientes indeterminados. Obtém-se:

(a) $n = 1, \ \ a \le x_0 < x_1 \le b$

$$I_1(f) = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1)$$

$$w_0 = \frac{(b-a)(a+b-2x_1)}{2(x_0-x_1)}, \qquad w_1 = \frac{(b-a)(a+b-2x_0)}{2(x_1-x_0)}$$

Em particular: $x_0 = a, \ \ x_1 = b$ (**Fórmula do trapézio**)

$$I_1(f) = \frac{b-a}{2}\,[f(a) + f(b)]$$

(b) $n = 2, \ \ a \le x_0 < x_1 < x_2 \le b$

$$I_2(f) = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2)$$

$$w_0 = \frac{(b-a)[2(a^2+b^2+ab) + 6x_1x_2 - 3(a+b)(x_1+x_2)]}{6(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

$$w_1 = \frac{(b-a)[2(a^2+b^2+ab) + 6x_2x_0 - 3(a+b)(x_2+x_0)]}{6(x_1-x_2)(x_1-x_0)}$$

$$w_2 = \frac{(b-a)[2(a^2+b^2+ab) + 6x_0x_1 - 3(a+b)(x_0+x_1)]}{6(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

Em particular: $x_0 = a, \ \ x_1 = \dfrac{a+b}{2}, \ \ x_2 = b$ (**Fórmula de Simpson**)

$$I_2(f) = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]$$

Fórmulas de Newton-Cotes fechadas e abertas

Proposição. A FQIP de ordem $n \in \mathbb{N}_1$ com nós de integração equidistantes

$$x_{j,n} = a + jh_n, \qquad j = 0, 1, \ldots, n,$$

onde

$$h_n = \frac{b-a}{n},$$

é chamada a **fórmula de Newton-Cotes fechada de ordem** n. Os seus pesos de integração são dados por

$$w_{j,n} = h_n \frac{(-1)^{n-j}}{j!(n-j)!} \int_0^n \prod_{\substack{i=0 \\ i \ne j}}^{n} (t-i)\, dt,$$

e têm a simetria,

$$w_{j,n} = w_{n-j,n}, \qquad j = 0, 1, \ldots, n.$$

Exemplo. $I_1(f)$ e $I_2(f)$ foram calculados no exemplo anterior. $I_3(f), I_4(f), I_5(f), I_6(f), I_7(f)$ estão disponíveis no Formulário.

Proposição (Teorema do Valor Médio para Integrais). Seja $f \in C([a,b])$ e $u \in L^1([a,b])$, $u(x) \geq 0$, $\forall x \in [a,b]$. Então:

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

para algum $\xi \in [a,b]$.

Proposição. Seja $f \in C^2([a,b])$. O erro de integração para a fórmula do trapézio é dado por

$$E_1(f) = I(f) - I_1(f) = -\frac{h^3}{12} f''(\xi),$$

onde $h = b - a$ e $\xi \in]a,b[$.

Dem.: $(\cdots)$

Proposição. Seja $f \in C^4([a,b])$. O erro de integração para a fórmula de Simpson é dado por

$$E_2(f) = I(f) - I_2(f) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi),$$

onde $h = \dfrac{b-a}{2}$ e $\xi \in]a,b[$.

Dem.: $(\cdots)$

Proposição. Seja $f \in C^{n+\nu_n}([a,b])$, onde $\nu_n = 1 + \dfrac{1}{2}\,[1 + (-1)^n]$; isto é, $\nu_n = 1$ para n ímpar e $\nu_n = 2$ para n par. Então o erro de integração para a fórmula de Newton-Cotes fechada de ordem n é dado por

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f) = C_n h_n^{n+1+\nu_n} f^{(n+\nu_n)}(\xi),$$

onde

$$C_n = \frac{1}{(n+\nu_n)!} \int_0^n t^{\nu_n - 1} \prod_{i=0}^{n} (t-i)\, dt,$$

$h_n = \dfrac{b-a}{n}$ e $\xi \in]a,b[$.

Nota. Mostra-se que $C_n < 0$, $\forall n \in \mathbb{N}_1$.

Exemplo. $E_3(f), \ldots, E_7(f)$ estão disponíveis no Formulário.

Definição. Uma fórmula de integração numérica $I_n(f)$ que aproxima $I(f)$ diz-se de **grau**

de precisão m se:

(1) $I_n(q) = I(q), \quad \forall q \in \mathcal{P}_m;$

(2) $I_n(q) \neq I(q), \quad$ para algum $q \in \mathcal{P}_{m+1}.$

Proposição. As fórmulas de Newton-Cotes fechadas de ordem n têm grau de precisão $n + \nu_n - 1$, isto é, têm grau de precisão

(1) n, para n ímpar; (2) $n + 1$, para n par.

Proposição. A FQIP de ordem $n \in \mathbb{N}$ com nós de integração equidistantes

$$x_{j,n} = a + (j+1)h_n, \qquad j = 0, 1, \ldots, n,$$

onde

$$h_n = \frac{b-a}{n+2},$$

é chamada a **fórmula de Newton-Cotes aberta de ordem** n. Os seus pesos de integração são dados por

$$w_{j,n} = h_n \frac{(-1)^{n-j}}{j!(n-j)!} \int_{-1}^{n+1} \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} (t-i)\, dt,$$

e têm a simetria,

$$w_{j,n} = w_{n-j,n}, \qquad j = 0, 1, \ldots, n.$$

Exemplo.

(a) $n = 0, \;\; h = \dfrac{b-a}{2}$ (**Fórmula do ponto médio**):

$$I_0(f) = (b-a)\, f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

(b) As fórmulas de Newton-Cotes abertas de ordens 1 e 2 estão disponíveis no Formulário.

Proposição. Seja $f \in C^{n+\nu_n}([a,b])$, onde $\nu_n = 1 + \dfrac{1}{2}\,[1 + (-1)^n]$. Então o erro de integração para a fórmula de Newton-Cotes aberta de ordem n é dado por

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f) = C_n h_n^{n+1+\nu_n} f^{(n+\nu_n)}(\xi),$$

onde

$$C_n = \frac{1}{(n+\nu_n)!} \int_{-1}^{n+1} t^{\nu_n - 1} \prod_{i=0}^{n} (t-i)\, dt,$$

$h_n = \dfrac{b-a}{n+2}$ e $\xi \in [a,b]$.

Nota. Mostra-se que $C_n > 0, \;\; \forall n \in \mathbb{N}$.

Exemplo.

(a) $n = 0$, $h = \dfrac{b-a}{2}$ (Fórmula do ponto médio):

$$E_0(f) = I(f) - I_0(f) = \frac{h^3}{3} f''(\xi), \quad \xi \in]a, b[$$

(b) Os erros para as fórmulas de Newton-Cotes abertas de ordens 1 e 2 estão disponíveis no Formulário.

Proposição. As fórmulas de Newton-Cotes abertas de ordem n têm grau de precisão $n + \nu_n - 1$, isto é, têm grau de precisão

(1) n, para n ímpar; (2) $n + 1$, para n par.

Proposição. Seja $f \in C^{n+\nu_n}([a, b])$, onde $\nu_n = 1 + \dfrac{1}{2}\,[1 + (-1)^n]$. Então o erro de integração para a fórmula de Newton-Cotes, fechada ou aberta, de ordem n é dado por

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f) = \frac{E_n\left((x-a)^{n+\nu_n}\right)}{(n+\nu_n)!}\, f^{(n+\nu_n)}(\xi),$$

onde $\xi \in]a, b[$.

Exemplo. Erro da fórmula de Simpson.

Fórmulas de Newton-Cotes fechadas e abertas compostas

• Uma vez que os erros das fórmulas de Newton-Cotes são proporcionais a potências de $b - a$, se esta quantidade não for suficientemente pequena, as fórmulas deixam de ter utilidade. Neste caso o que se deve fazer é dividir o intervalo $[a, b]$ em subintervalos e aplicar a cada um dos integrais assim obtidos uma das fórmulas de Newton-Cotes.

Proposição. Seja $I_n(f; [a, b])$ a fórmula de Newton-Cotes de ordem n, fechada ou aberta, para obter um valor aproximado do integral

$$I(f; [a, b]) = \int_a^b f(x)\, dx,$$

anteriormente designadas simplesmente por $I_n(f)$ e $I(f)$, respectivamente. Sejam $x_0, x_1, \ldots, x_M$ os pontos do intervalo $[a, b]$ definidos por

$$x_j = a + jh_M, \quad j = 0, 1, \ldots, M, \qquad h_M = \frac{b-a}{M},$$

onde $M \in \mathbb{N}_1$ é um múltiplo de $n + \mu$, onde $\mu = 0$ no caso das fórmulas fechadas, e $\mu = 2$, no caso das fórmulas abertas. Então a fórmula de Newton-Cotes, fechada ou aberta, de ordem n, composta, com M subintervalos, para obter um valor aproximado do integral $I(f)$, é

$$I_n^{(M)}(f) = \sum_{j=1}^{M/(n+\mu)} I_n(f; [x_{(n+\mu)(j-1)}, x_{(n+\mu)j}]).$$

Exemplo.

(a) Fórmula do trapézio composta $(\mu = 0, \ \ n = 1)$

$$I_1^{(M)}(f) = \frac{h_M}{2}\left[f_0 + f_M + 2\sum_{j=1}^{M-1} f_j\right]$$

onde $f_j = f(x_j), \ j = 0, 1, \ldots, M$.

(b) As fórmulas de Newton-Cotes fechadas compostas para $n = 2, \ldots, 7$ estão disponíveis no Formulário.

(c) A fórmula de Newton-Cotes aberta composta para $n = 0$ está disponível no Formulário.

Proposição. Seja $f \in C^2([a, b])$. O erro de integração para a fórmula do trapézio composta é dado por

$$E_1^{(M)}(f) = I(f) - I_1^{(M)}(f) = -\frac{b-a}{12}\, h_M^2 f''(\xi),$$

onde $h_M = \dfrac{b-a}{M}$ e $\xi \in]a, b[$.

Proposição. Seja $f \in C^{n+\nu_n}([a, b])$ onde $\nu_n = 1 + \dfrac{1}{2}\,[1 + (-1)^n]$. Seja $M \in \mathbb{N}_1$ um múltiplo de $n + \mu$, onde $\mu = 0$ no caso das fórmulas fechadas, e $\mu = 2$ no caso das fórmulas abertas. O erro de integração para a fórmula de Newton-Cotes de ordem n, fechada ou aberta, composta, com M subintervalos de integração, é dado por

$$E_n^{(M)}(f) = I(f) - I_n^{(M)}(f) = (b-a) h_M^{n+\nu_n}\, \frac{C_n^\mu}{n+\mu}\, f^{(n+\nu_n)}(\xi),$$

onde $h_M = \dfrac{b-a}{M}$ e $\xi \in]a, b[$. Os coeficientes C_n^μ foram obtidos anteriormente em ambos os casos.

Exemplo. Os erros de integração para as fórmulas de Newton-Cotes fechadas compostas de ordens $2, \cdots, 7$ e abertas de ordem 0 estão disponíveis no Formulário.

Fórmulas de integração de Gauss

• Dados os nós de integração $x_{0,n}, x_{1,n}, \ldots, x_{n,n}$ em $[a, b]$, os pesos de integração $w_{0,n}, w_{1,n}, \ldots, w_{n,n}$ das FQIP

$$I_n(f) = \sum_{j=0}^{n} w_{j,n} f(x_{j,n}),$$

são determinados por forma a que todos os polinómios de grau $\leq n$ sejam integrados exactamente, isto é,

$$I_n(p) = I(p), \qquad \forall p \in \mathcal{P}_n.$$

Vamos agora considerar o problema de escolher os nós $x_{0,n}, x_{1,n}, \ldots, x_{n,n}$ por forma a que a FQIP integre exactamente os polinómios de maior grau $m \geq n$ possível, isto é,

$$I_n(p) = I(p), \qquad \forall p \in \mathcal{P}_m,$$

e determinar esse grau.

Os nós e os pesos de quadratura, num total de $2n+2$ incógnitas, devem satisfazer ao sistema de equações não-lineares

$$I_n(x^k) = I(x^k), \qquad k = 0, 1, \ldots, m.$$

Veremos que é efectivamente para $m = 2n+1$, valor para o qual o número de equações coincide com o número de incógnitas, que este sistema tem uma única solução e que para esta solução os pontos $x_{0,n}, x_{1,n}, \ldots, x_{n,n}$ são distintos. São os zeros do polinómio de grau $n+1$ de um sistema de polinómios ortogonais com respeito ao produto interno definido por

$$\langle f, g\rangle = I(fg), \qquad \forall f, g \in C([a,b]).$$

Para ganharmos alguma sensibilidade para a dificuldade do problema consideremos o seguinte exemplo:

Exemplo. No caso do integral

$$I(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx,$$

determinar as FQIP que integram exactamente todos os polinómios de grau menor ou igual a $2n+1$, para $n = 0, 1, 2$.

O sistema de $2n+2$ equações não lineares a resolver é:

$$\sum_{j=0}^{n} w_{j,n} x_{j,n}^k = \frac{1-(-1)^{k+1}}{k+1}, \qquad k = 0, 1, \ldots, 2n+1,$$

isto é,

$$\sum_{j=0}^{n} w_{j,n} x_{j,n}^k = \begin{cases} 0, & k = 1, 3, \ldots, 2n+1 \\ \dfrac{2}{k+1}, & k = 0, 2, \ldots, 2n \end{cases}.$$

$$n = 0: \begin{cases} w_{0,0}x_{0,0} = 0 \\ w_{0,0} = 2 \end{cases} \qquad \begin{cases} x_{0,0} = 0 \\ w_{0,0} = 2 \end{cases}$$

$$I_0(f) = 2f(0)$$

$$n = 1: \begin{cases} w_{0,1}x_{0,1} + w_{1,1}x_{1,1} = 0 \\ w_{0,1}x_{0,1}^3 + w_{1,1}x_{1,1}^3 = 0 \\ w_{0,1} + w_{1,1} = 2 \\ w_{0,1}x_{0,1}^2 + w_{1,1}x_{1,1}^2 = \dfrac{2}{3} \end{cases} \qquad \begin{cases} x_{0,1} = -\dfrac{\sqrt{3}}{3} \\ x_{1,1} = \dfrac{\sqrt{3}}{3} \\ w_{0,1} = 1 \\ w_{1,1} = 1 \end{cases}$$

$$I_1(f) = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

$$n = 2 : \begin{cases} w_{0,2}x_{0,2} + w_{1,2}x_{1,2} + +w_{2,2}x_{2,2} = 0 \\ w_{0,2}x_{0,2}^3 + w_{1,2}x_{1,2}^3 + w_{2,2}x_{2,2}^3 = 0 \\ w_{0,2}x_{0,2}^5 + w_{1,2}x_{1,2}^5 + w_{2,2}x_{2,2}^5 = 0 \\ w_{0,2} + w_{1,2} + w_{2,2} = 2 \\ w_{0,2}x_{0,2}^2 + w_{1,2}x_{1,2}^2 + w_{2,2}x_{2,2}^2 = \frac{2}{3} \\ w_{0,2}x_{0,2}^4 + w_{1,2}x_{1,2}^4 + w_{2,2}x_{2,2}^4 = \frac{2}{3} \end{cases} \qquad \begin{cases} x_{0,2} = -\sqrt{\frac{3}{5}} \\ x_{1,2} = 0 \\ x_{2,2} = \sqrt{\frac{3}{5}} \\ w_{0,2} = \frac{5}{9} \\ w_{1,2} = \frac{8}{9} \\ w_{2,2} = \frac{5}{9} \end{cases}$$

$$I_2(f) = \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

• A solução do sistema torna-se rapidamente demasiado complicada. A solução do problema passa pois por uma outra via.

• No estudo das fórmulas de quadratura de Gauss vamos considerar com mais generalidade o integral

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

onde w é uma *função de peso*, anteriormente definida.

Definição. Uma FQIP

$$I_n(f) = \sum_{j=0}^{n} w_{j,n} f(x_{j,n}),$$

com $n+1$ nós de quadratura distintos $x_{0,n}, \ldots, x_{n,n}$ é chamada uma **fórmula de quadratura de Gauss** se integra exactamente todos os polinómios de grau menor ou igual a $2n+1$, isto é,

$$I_n(p) = I(p), \qquad \forall p \in \mathcal{P}_{2n+1}.$$

Proposição. Para cada $n \in \mathbb{N}$ existe uma única fórmula de quadratura de Gauss. Os seus nós de quadratura são os zeros do polinómio de grau $n+1$ pertencente ao sistema de polinómios ortogonais $\{\varphi_k\}$ com respeito ao produto interno

$$\langle f, g\rangle = I(fg), \qquad \forall f, g \in C([a,b]).$$

Os seus pesos de quadratura são determinados pelas fórmulas

$$w_{j,n} = I(l_{j,n}), \qquad j = 0, 1, \ldots, n,$$

onde $l_{0,n}, \ldots, l_{n,n}$ são os polinómios de Lagrange de grau n suportados nos nós de integração, ou, por qualquer dos sistemas (lineares) de $n+1$ equações:

$$\text{(a)} \quad \sum_{j=0}^{n} w_{j,n} x_{j,n}^k = I(x^k), \qquad k = 0, 1, \ldots, n;$$

$$\text{(b)} \quad \sum_{j=0}^{n} w_{j,n} \varphi_k(x_{j,n}) = I(\varphi_k), \qquad k = 0, 1, \ldots, n.$$

Proposição. A fórmula de quadratura de Gauss de ordem n tem grau de precisão $2n+1$.

Dem.: $(\cdots)$

Proposição. Os pesos da fórmula de quadratura de Gauss de ordem n são dados por

$$w_{j,n} = I(l_{j,n}^2), \qquad j = 0, 1, \ldots, n.$$

Em particular

$$w_{j,n} > 0, \qquad j = 0, 1, \ldots, n.$$

Dem.: $(\cdots)$

Proposição. Os pesos da fórmula de quadratura de Gauss de ordem n são dados por

$$w_{j,n} = -\frac{I(\Phi_{n+1}^2)}{\Phi'_{n+1}(x_{j,n})\Phi_{n+2}(x_{j,n})}, \qquad j = 0, 1, \ldots, n$$

onde Φ_n é o elemento de grau n do sistema de polinómios mónicos ortogonais em relação ao produto interno

$$\langle f, g \rangle = I(fg), \qquad \forall f, g \in C([a, b]).$$

Proposição. Seja $f \in C^{2n+2}([a, b])$. Então o erro da fórmula de quadratura de Gauss de ordem n é dado por

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f) = \frac{I(\Phi_{n+1}^2)}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi),$$

para algum $\xi \in]a, b[$.

Dem.: $(\cdots)$

Exemplo. **Fórmulas de Gauss-Legendre** $([a, b] = [-1, 1], \ \ w(x) \equiv 1)$

$$I(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\, dx \ \approx \ I_n(f) = \sum_{j=0}^{n} w_{j,n} f(x_{j,n})$$

$x_{j,n}, \;\; j = 0, 1, \ldots, n$: zeros do polinómio de Legendre $\; P_{n+1}$

$$w_{j,n} = -\frac{2}{(n+2)P'_{n+1}(x_{j,n})P_{n+2}(x_{j,n})}, \qquad j = 0, 1, \ldots, n$$

$$E_n(f) = \frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3}\, f^{(2n+2)}(\xi), \qquad f \in C^{2n+2}([-1,1]), \quad \xi \in]a,b[$$

As fórmulas de Gauss-Legendre de ordens 0, 1, 2 foram apresentadas anteriormente. Os respectivos erros são

$$E_0(f) = \frac{1}{3}\, f''(\xi), \qquad E_1(f) = \frac{1}{135}\, f^{(4)}(\xi), \qquad E_2(f) = \frac{1}{15750}\, f^{(6)}(\xi).$$

Proposição. Seja $f \in C^{2n+2}([a,b])$ uma função tal que

$$\sup_{k\geq 0} M_k < \infty, \qquad M_k := \max_{x\in[-1,1]} \frac{\left|f^{(k)}(x)\right|}{k!}.$$

Então o erro da fórmula de quadratura de Gauss-Legendre de ordem n satisfaz a

$$|E_n(f)| \leq \frac{\pi}{4^{n+1}}\, M_{2n+2}, \qquad n \to \infty.$$

Nota. Este resultado mostra que $E_n(f) \to 0, \; n \to \infty$, com um decrescimento exponencial. Compare-se com o decrescimento da forma $1/M^{n+\nu_n}, \;\; M \to \infty$, para as fórmulas de Newton-Cotes compostas de ordem n.

Exemplo. **Fórmulas de Gauss-Chebyshev** $\left([a,b] = [-1,1], \;\; w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}\right)$:

$$I(f) = \int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\, dx \;\;\approx\;\; I_n(f) = \sum_{j=0}^{n} w_{j,n} f(x_{j,n})$$

$$x_{j,n} = -\cos\left(\frac{2j+1}{2n+2}\,\pi\right), \qquad w_{j,n} = \frac{\pi}{n+1}, \qquad j = 0, 1, \ldots, n$$

$$E_n(f) = \frac{\pi}{2^{2n+1}(2n+2)!}\, f^{(2n+2)}(\xi), \qquad \xi \in]a,b[$$

Fórmula de Gauss-Legendre composta

Proposição (da mudança de variável). Seja

$$I_n(f;[-1,1]) = \sum_{j=0}^{n} w_{j,n} f(x_{j,n})$$

uma FQIP para obter um valor aproximado do integral

$$I(f;[-1,1]) = \int_{-1}^{1} f(t)\, dt.$$

Então a FQIP

$$I_n(f;[a,b]) = \sum_{j=0}^{n} w^*_{j,n} f(x^*_{j,n}),$$

onde

$$w^*_{j,n} = \frac{b-a}{2}\, w_{j,n}, \qquad x^*_{j,n} = a + \frac{b-a}{2}(x_{j,n}+1),$$

permite obter um valor aproximado para o integral

$$I(f;[a,b]) = \int_a^b f(x)\,dx.$$

Dem.: $(\cdots)$

Proposição. Seja

$$I_n(f;[-1,1]) = \sum_{j=0}^{n} w_{j,n} f(x_{j,n}),$$

a fórmula de Gauss-Legendre para obter um valor aproximado do integral

$$I(f;[-1,1]) = \int_{-1}^{1} f(t)\,dt.$$

Então a **fórmula de Gauss-Legendre composta** com M subintervalos para obter um valor aproximado do integral

$$I(f;[a,b]) = \int_a^b f(x)\,dx.$$

é dada por

$$I_n^{(M)}(f;[a,b]) = \frac{h_M}{2} \sum_{j=0}^{n} w_{j,n} \sum_{m=1}^{M} f\left(x_{j,n}^{(m)}\right),$$

onde

$$x_{j,n}^{(m)} = a + h_M(m-1) + \frac{h_M}{2}\left(x_{j,n}+1\right), \qquad h_M = \frac{b-a}{M}.$$

Dem.: $(\cdots)$

Proposição. Seja $f \in C^{2n+2}([a,b])$. O erro de integração da fórmula de Gauss-Legendre composta de ordem n com M subintervalos de integração é dado por

$$E_n^{(M)}(f) = \frac{b-a}{2}\left(\frac{h_M}{2}\right)^{2n+2} E_n(f),$$

onde

$$E_n(f) = \frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3}\, f^{(2n+2)}(\xi), \qquad \xi \in]a,b[$$

Convergência de fórmulas de quadratura

Definição. Diz-se que uma sucessão de fórmulas de quadratura que aproxima o integral $I(f)$ é **convergente** se

$$I_n(f) \to I(f), \quad n \to \infty, \qquad \forall f \in C([a,b]).$$

Proposição. Seja

$$I_n(f) = \sum_{j=0}^{n} w_{j,n} f(x_{j,n}),$$

uma sucessão de fórmulas de quadratura que aproxima o integral $I(f)$ tal que:

(1) $I_n(p) \to I(p), \quad n \to \infty,$ para qualquer polinómio p;

(2) $w_{j,n} > 0, \quad \forall j, \ \forall n.$

Então a sucessão é convergente.

Proposição.

(1) As fórmulas de quadratura de Newton-Cotes fechadas compostas de ordens 1 a 7 são convergentes, isto é,

$$I_n^{(M)}(f) \to I(f), \quad M \to \infty, \qquad \forall f \in C([a,b]).$$

(2) As fórmulas de quadratura de Gauss de ordem n são convergentes, isto é,

$$I_n(f) \to I(f), \quad n \to \infty, \qquad \forall f \in C([a,b]).$$

Nota. As fórmulas de quadratura de Newton-Cotes de ordem n não são convergentes, isto é,

$$I_n(f) \not\to I(f), \quad n \to \infty, \qquad f \in C([a,b]).$$