Quadratura Gauss-Legendre

Ben Dêivide

5 de maio de 2022

1 Introdução

A idéia básica consiste em escrever a fórmula geral da quadratura da seguinte maneira:

$$\int_a^b g(x)dx = \int_a^b w(x)f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{s} w_k f(x_k), \tag{1}$$

em que o integrando é escrito $g(x) \equiv w(x)f(x)$, sendo que $w(x)$ possa desempenhar a função peso na fórmula gaussiana. Assim, determina-se o conjunto $\{x_k, w_k\}$ de tal forma que a expressão (1) vale para qualquer polinômio de grau $\leq s$. Em princípio, esta escolha não introduz vantagem nenhuma em relação ao uso dos polinômios de Legendre, usados nas fórmulas de Newton-Côtes. A vantagem consiste na escolha de um conjunto de polinômios ortogonais e nas suas raízes para as abscissas. A equação (1) será exata para polinômios de grau $\leq 2s-1$, que segue um pseudocódigo

1. Determinar o número de pontos s que se deve tomar para resolver a integral, segundo o polinômio $p_s(x)$;
2. Determinar os nós (x_k) e os pesos (w_k) da quadratura, usando função:

   `SMR:::GaussLegendre(s)`,

   do pacote R, `SMR`, sendo `s` os pontos da quadratura;
3. Determinar $g(x_k) = f(x_k)$, isto é, a função de interesse aplicada nos nós (x_k);
4. Calcular, finalmente,
$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{s} w_k g(x_k).$$

Como exemplo, será calculado a integral $\int_{-1}^{1}(x^3-5x)dx$ via quadratura. É claro que para resolver esta integral não seria necessário usar algum método numérico. Entretanto, este exemplo servirá para ilustrar como resolver uma integral usando o procedimento da quadratura, que segue a solução:

1. Serão necessários $s = 2$ pontos de quadratura para resolver a integral;
2. Usando `SMR:::GaussLegendre(2)`, temos:

```
> SMR:::GaussLegendre(2)
$nodes
[1] -0.5773503  0.5773503
$weights
[1] 1 1
```

3. Determinando,

$$\begin{aligned} g(x) &= f(x) \\ \{g(x_1), g(x_2)\} &= \{2,694301,\ -2,694301\} \end{aligned}$$

4. Calcular, finalmente,

$$\begin{aligned} \int\limits_a^b f(x)dx &\approx \sum_{k=1}^{s} w_k g(x_k) \\ \int\limits_{-1}^{1} (x^3 - 5x)dx &= 1 \times 2,694301 + 1 \times (-2,694301) = 0. \end{aligned}$$

Observe que

$$\int\limits_{-1}^{+1} (x^3 - 5x)dx = \left[\frac{x^4}{4} - \frac{5x^2}{2}\right]_{-1}^{+1} = \frac{1}{4} - \frac{5}{2} - \frac{1}{4} + \frac{5}{2} = 0,$$

como mostrado pelo método da quadratura.

2 Transformação dos limites de integração

Quando a função a ser integrada não está entre -1 e 1, devemos fazer transformar esses limites para o intervalo desejado.

Para limites de integração envolvendo uma variável infinita, ou integrais impróprias, pode-se utilizar o recurso de transformação de variáveis e obter um intervalo de integração finito.

A fórmula padrão da mudança de variável do cálulo de integral utilizando a transformação $x = g(t)$ é

$$\int\limits_{g(c)}^{g(t)} f(x)dx = \int\limits_{c}^{d} f(g(t))|g'(t)|dt, \tag{2}$$

em que $|g'(t)|$ é o jacobiano da transformação.

Para integrais do tipo

$$\int\limits_{a}^{\infty} f(x)dx, \tag{3}$$

com $a \in \mathbb{R} > -\infty$, utilizando as transformações

$$\begin{aligned} t &= e^{-x}, & (4) \\ t &= \frac{x-a}{1+(x-a)}, & (5) \\ t &= \frac{x}{(1+x)}, & (6) \\ t &= \frac{1}{x-a+1}. & (7) \end{aligned}$$

Para (3), usando a transformação (4), e isolando x,

$$t = e^{-x} \Rightarrow ln(t) = ln(e^{-x}) \Rightarrow -x = ln(t) \Rightarrow x = -ln(t),$$

consequentemente, o jacobiano da transformação será,

$$\left|\frac{dx}{dt}\right| = \left|(-ln(t))'\right| = \left|-\frac{1}{t}\right|.$$

De forma resumida,

$$t = e^{-x}, \quad x = -ln(t) \text{ e } \frac{dx}{dt} = \frac{1}{t}.$$

Os limites de integração são observados na tabela 1. Para o limite superior,

$$x \to \infty \Rightarrow t = \lim_{x\to\infty} e^{-x} \Rightarrow t = 0,$$

para o limite inferior,

$$x = a \Rightarrow t = e^{-a}.$$

LIMITES DE INTEGRAÇÃO	x	t
Limite inferior	$x \to \infty$	$t = 0$
Limite superior	$x = a$	$t = e^{-a}$

Tabela 1: Limites de integração para a transformação $t = e^{-x}$.

Portanto,

$$\int_a^\infty f(x)dx = \int_0^{e^{-a}} f(-ln(t))\frac{1}{t}dt. \tag{8}$$

Para (3), usando a transformação (5), e isolando x,

$$t = \frac{x-a}{1+(x-a)} \Rightarrow t + xt - at = x - a \Rightarrow xt - x = at - a - t \Rightarrow$$

$$x(t-1) = a(t-1) - t \Rightarrow x = \frac{a(t-1)}{(t-1)} - \frac{t}{t-1} \Rightarrow x = a + \frac{t}{1-t}.$$

O jacobiano da transformação que será,

$$\left|\frac{dx}{dt}\right| = \left|\left(a + \frac{t}{1-t}\right)'\right| = \left|\frac{1(1-t)+1(t)}{(1-t)^2}\right| = \left|\frac{1}{(1-t)^2}\right|.$$

De forma resumida,

$$t = \frac{x-a}{1+(x-a)}, \quad x = a + \frac{t}{1-t} \text{ e } \tfrac{dx}{dt} = \frac{1}{(1-t)^2}.$$

LIMITES DE INTEGRAÇÃO	x	t
Limite inferior	$x \to \infty$	$t = 1$
Limite superior	$x = a$	$t = 0$

Tabela 2: Limites de integração para a transformação $t = \frac{x-a}{1+(x-a)}$.

Os limites de integração são observados na tabela 1. Para o limite superior,

$$x \to \infty \Rightarrow t = \lim_{x\to\infty} \frac{x-a}{1+x-a} = \lim_{x\to\infty} \frac{\left(1-\frac{a}{x}\right)\cancel{x}}{\left(\frac{1}{x}+1-\frac{a}{x}\right)\cancel{x}} \Rightarrow t = 1,$$

para o limite inferior,

$$x = a \Rightarrow t = \frac{a-a}{1+a-a} = \frac{0}{1} \Rightarrow t = 0.$$

Portanto,

$$\int_a^\infty f(x)dx = \int_0^1 f\left(a + \frac{t}{1-t}\right)\frac{1}{(1-t)^2}dt. \quad (9)$$

Para (3), usando a transformação (6), e isolando x,

$$t = \frac{x}{1+x} \Rightarrow xt - x = -t \Rightarrow x(t-1) = -t \Rightarrow x = \frac{-t}{t-1},$$

o jacobiano da transformação,

$$\left|\frac{dx}{dt}\right| = \left|\left(\frac{-t}{t-1}\right)'\right| = \left|\frac{-1(t-1)+t}{(t-1)^2}\right| = \left|\frac{1}{(t-1)^2}\right|.$$

De forma resumida,

$$t = \frac{x}{1+x}, \quad x = \frac{-t}{t-1} \quad \text{e} \quad \frac{dx}{dt} = \frac{1}{(t-1)^2}.$$

Os limites de integração são observados na tabela 3. Para o limite superior,

$$x \to \infty \Rightarrow t = \lim_{x\to\infty} \frac{x}{1+x} = \lim_{x\to\infty} \frac{\cancel{x}}{\left(\frac{1}{x}+1\right)\cancel{x}} = \lim_{x\to\infty} \frac{1}{\frac{1}{x}+1} = 1,$$

para o limite inferior,

$$x = a \Rightarrow t = \frac{a}{1+a}.$$

LIMITES DE INTEGRAÇÃO	x	t
Limite inferior	$x \to \infty$	$t = 1$
Limite superior	$x = a$	$t = \frac{a}{1+a}$

Tabela 3: Limites de integração para a transformação $t = \frac{x}{1+x}$.

Portanto,

$$\int\limits_{a}^{\infty} f(x)dx = \int\limits_{\frac{a}{1+a}}^{1} f\left(\frac{-t}{t-1}\right)\frac{1}{(t-1)^2}dt \tag{10}$$

Se $a = 0$ para nas equações (8) e (10), então, tem-se respectivamente,

$$\int\limits_{a}^{\infty} f(x)dx = \int\limits_{0}^{1} f(-ln(t))\frac{1}{t}dt. \tag{11}$$

e

$$\int\limits_{a}^{\infty} f(x)dx = \int\limits_{0}^{1} f\left(\frac{-t}{t-1}\right)\frac{1}{(t-1)^2}dt. \tag{12}$$

A integral (3), usando a transformação para o caso (7), tem-se que x,

$$t = \frac{1}{x-a+1} \Rightarrow t(x-a+1) = 1 \Rightarrow tx - ta + t = 1 \Rightarrow x = a + \frac{1-t}{t},$$

o jacobiano da transformação,

$$\left|\frac{dx}{dt}\right| = \left|\left(a + \frac{1-t}{t}\right)'\right| = \left|\frac{-t-1+t}{t^2}\right| = \left|\frac{-1}{t^2}\right|.$$

Resumindo,

$$t = \frac{1}{x-a+1}, \quad x = a + \frac{1-t}{t} \quad \text{e} \quad \frac{dx}{dt} = \frac{1}{t^2}.$$

Os limites de integração são observados na tabela 4. Sendo

$$x \to \infty \Rightarrow t = \lim_{x \to -\infty} \frac{1}{x-a-1} = 0.$$

e para,

$$x = a \Rightarrow t = \frac{1}{a-a+1} = 1,$$

preferencialmente colocada no mesmo local onde ela apareceu no texto.

LIMITES DE INTEGRAÇÃO	x	t
Limite inferior	$x \to \infty$	$t = 0$
Limite superior	$x = a$	$t = 1$

Tabela 4: Limites de integração para a transformação $t = \frac{1}{x-a+1}$.

Portanto,

$$\int\limits_{a}^{\infty} f(x)dx = \int\limits_{0}^{1} f\left(a + \frac{1-t}{t}\right)\frac{1}{t^2}.dt \tag{13}$$

Similarmente, para a integral

$$\int\limits_{-\infty}^{b} f(x)dx, \tag{14}$$

com,

$$t = \frac{1}{x-b+1}, \quad x = b - \frac{1-t}{t} \quad \text{e} \quad \frac{dx}{dt} = \frac{1}{t^2},$$

tem-se,

$$\int\limits_{-\infty}^{b} f(x)dx = \int\limits_{0}^{1} f\left(b - \frac{1-t}{t}\right)\frac{1}{t^2}dt \tag{15}$$

Um caso interessante em (3), é usar a transformação $t = \dfrac{1-x+a}{-1-x+a}$, isolando x,

$$t = \frac{1-x-a}{-1-x+a} \Rightarrow t(-1-x+a) = 1-x+a \Rightarrow -t-tx+ta = 1-x+a \Rightarrow$$

$$-tx+x = 1+a+t-ta \Rightarrow x(1-t) = a(1-t)+(1+t) \Rightarrow x = a + \frac{1+t}{1-t},$$

encontrando o jacobiano da transformação,

$$\left|\frac{dx}{dt}\right| = \left|\left(a+\frac{1+t}{1-t}\right)'\right| = \left|\frac{1(1-t)+1(1+t)}{(1-t)^2}\right| = \left|\frac{2}{(1-t)^2}\right|.$$

De forma resumida,

$$t = \frac{1-x-a}{-1-x+a}, \quad x = a + \frac{1+t}{1-t} \quad \text{e} \quad \frac{dx}{dt} = \frac{2}{(1-t)^2}.$$

Os limites de integração são observados na tabela 5. Para o limite superior,

$$x \to \infty \Rightarrow t = \lim_{x\to\infty}\frac{1-x-a}{-1-x+a} = \lim_{x\to\infty}\frac{\left(\frac{1}{x}-1+\frac{a}{x}\right)x}{\left(\frac{-1}{x}-1+\frac{a}{x}\right)x} = \frac{-1}{-1} = 1,$$

para o limite inferior,

$$x = a \Rightarrow t = \frac{1-a+a}{-1-a+a} = -1.$$

LIMITES DE INTEGRAÇÃO	x	t
Limite inferior	$x \to \infty$	$t = 1$
Limite superior	$x = a$	$t = -1$

Tabela 5: Limites de integração para a transformação $t = \frac{1-x-a}{-1-x+a}$.

Portanto,

$$\int\limits_{a}^{\infty} f(x)dx = \int\limits_{-1}^{1} f\left(a+\frac{1+t}{1-t}\right)\frac{2}{(1-t)^2}dt. \tag{16}$$

Para o caso da integral,

$$\int\limits_{-\infty}^{a} f(x)dx, \tag{17}$$

pode-se usar as seguintes tranformações,

$$t = \frac{a-x}{x-a-1}, \tag{18}$$

isolando x,

$$t = \frac{a-x}{x-a-1} \Rightarrow t(x-a-1) = a-x \Rightarrow xt - at - t = a - x$$

$$\Rightarrow x + xt - a - at - t = 0 \Rightarrow (x-a)(1+t) = t \Rightarrow$$

$$x - a = \frac{t}{1+t} \Rightarrow x = a + \frac{t}{1+t},$$

o jacobiano da transformação,

$$\left|\frac{dx}{dt}\right| = \left|\left(\frac{1(1+t) - 1(t)}{(1+t)^2}\right)'\right| = \left|\frac{1+t-1}{(1+t)^2}\right| = \frac{1}{(1+t)^2}.$$

Em resumo,

$$t = \frac{a-x}{x-a-1}, \quad x = a + \frac{t}{1+t} \quad \text{e} \quad \frac{dx}{dt} = \frac{1}{(1+t)^2}.$$

Os limites de integração são observados na tabela 6. Para o limite superior,

$$x = a \Rightarrow t = \frac{a-a}{a-a-1} = 0,$$

para o limite inferior,

$$x \to -\infty \Rightarrow t = \lim_{x\to-\infty} \frac{a-x}{x-a-1} = \lim_{x\to-\infty} \frac{\left(\frac{a}{x} - 1\right) \cancel{x}}{\left(1 - \frac{a}{x} - \frac{1}{x}\right) \cancel{x}} = -1.$$

LIMITES DE INTEGRAÇÃO	x	t
Limite inferior	$x = a$	$t = 1$
Limite superior	$x \to \infty$	$t = 0$

Tabela 6: Limites de integração para a transformação $t = \frac{1-x-a}{-1-x+a}$.

Portanto,

$$\int_a^{+\infty} f(x)dx = \int_{-1}^{0} f\left(a + \frac{t}{1+t}\right) \frac{1}{(1+t)^2}. \tag{19}$$

2.1 Transformação de um intervalo canônico

Para transformar um regra de quadratura para um intervalo canônico de integração, escolhida aqui como $[-1, 1]$, a uma regra de quadratura em um intervalo geral de integração $[a, b]$. Uma possibilidade é escolher a transformação $g(t)$ como a linha reta de interpolação do pontos $(-1, a)$ e $(1, b)$, isto é,

$$g(t) = a\frac{t-(+1)}{(-1)-(+1)} + b\frac{t-(-1)}{(+1)-(-1)} = \frac{(b-a)}{2}t + \frac{(b+a)}{2},$$

assim, a transformação $g(t)$ mapeia o intervalo canônico para o intervalo de interesse.

Para essa transformação $g(t)$, o jacobiano da transformação será $g'(t) = \dfrac{b-a}{2}$, e assim,

$$\int\limits_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\int\limits_{-1}^{1} f\left(\frac{(b-a)}{2}t + \frac{(b+a)}{2}\right)dt \tag{20}$$

Agora, assumindo que o intervalo canônico seja $[-1,1]$, tem-se a seguinte regra de quadratura

$$I^*(h) \equiv \int\limits_{-1}^{+1} h(t)dt \approx \sum_{i=0}^{N} w_i^* h(t_i^*) \equiv R^*(h), \tag{21}$$

fazendo $h(t) = f(g(t))$, tem-se

$$\begin{aligned} I(f) \equiv \int\limits_a^b f(x)dx &= \frac{(b-a)}{2}\int\limits_{-1}^{+1} f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)dt, \\ &= \frac{(b-a)}{2} I^*(f\circ g) \approx \frac{(b-a)}{2} R^*(f\circ g), \\ &= \frac{(b-a)}{2}\sum_{i=0}^{N} w_i^* f\left(\frac{(b-a)}{2}t_i^* + \frac{b+a}{2}\right) = \sum_{i=0}^{N} w_i f(x_i), \\ &= R(f), \end{aligned}$$

em que $R(f)$ tem pesos $w_i = \dfrac{(b-a)}{2}w_i^*$ e nós $x_i = \dfrac{(b-a)}{2}t_i^* + \dfrac{b+a}{2}$.

Assim, a quadratura se comporta:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} w_i^* f\left(\frac{b-a}{2}t_i^* + \frac{a+b}{2}\right). \tag{22}$$

2.2 Quadro resumo

O quadro resumo das transformações, observado na tabela 7, servirá de consulta para todas as transformações apresentadas de variáveis .

3 Quadratura Gauss-Legendre e transformação dos limites de integração

Vamos usar a integral como exemplo:

$$\int_0^3 x^2 dx.$$

Devemos transformar o intervalo $[0,2]$ para $[-1,1]$, para uso da quadratura Gauss-Legendre. A transformação desejada é essa:

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{(b-a)}{2}t + \frac{(b+a)}{2}\right)dt \\
\int_0^2 x^2 dx &= \frac{3-0}{2}\int_{-1}^{1}\left(\frac{(3-0)}{2}x_k + \frac{(3+0)}{2}\right)^2 dx_k \\
&= \frac{3}{2}\int_{-1}^{1}\left(\frac{3x_k}{2} + \frac{3}{2}\right)^2 dx_k
\end{aligned}
$$

sendo x_k, o k-ésimo nó da quadratura.

Usando a quadratura, como $2s - 1 = 3$, pelo fato da função de interesse ser de grau 3, então $s = 2$. Assim, temos:

$$
\frac{3}{2}\int_{-1}^{1}\left(\frac{3x_k}{2} + \frac{3}{2}\right)^2 dx_k \approx \frac{3}{2} \times \sum_{k=1}^{2} w_k \times \left(\frac{3x_k}{2} + \frac{3}{2}\right)^2,
$$

sendo que em R, teremos

```
> (x <- SMR:::GaussLegendre(2))
$nodes
[1] -0.5773503  0.5773503

$weights
[1] 1 1

> fx3 <- function(x) (1.5 * x + 1.5)^2 # para x^3 [0, 2]
> # Para fx3 temos
> 1.5 * sum(x$weights * fx3(x$nodes))
[1] 9
```

Tabela 7: Quadro resumo das transformações dos limites de integração, envolvendo uma variação infinita, em um intervalo de integração finito.

t	x	Transformação
e^{-x}	$-ln(t)$	$\int\limits_{a}^{\infty} f(x)dx = \int\limits_{0}^{e^{-a}} f(-ln(t))\frac{1}{t}dt$
$\dfrac{x-a}{1+x-a}$	$a+\dfrac{t}{1-t}$	$\int\limits_{a}^{\infty} f(x)dx = \int\limits_{0}^{1} f\left(a+\frac{t}{1-t}\right)\frac{1}{(1-t)^2}dt$
$\dfrac{b-x}{x-b-1}$	$b+\dfrac{t}{1+t}$	$\int\limits_{-\infty}^{b} f(x)dx = \int\limits_{-1}^{0} f\left(b+\frac{t}{1+t}\right)\frac{1}{(1+t)^2}dt$
$\dfrac{x}{1+x}$	$\dfrac{-t}{t-1}$	$\int\limits_{a}^{\infty} f(x)dx = \int\limits_{\frac{a}{1+a}}^{1} f\left(\frac{-t}{t-1}\right)\frac{1}{(t-1)^2}dt$
$\dfrac{1}{x-a+1}$	$a+\dfrac{1-t}{t}$	$\int\limits_{a}^{\infty} f(x)dx = \int\limits_{0}^{1} f\left(a+\frac{1-t}{t}\right)\frac{1}{t^2}.dt$
$\dfrac{1}{x-b+1}$	$b-\dfrac{1-t}{t}$	$\int\limits_{-\infty}^{b} f(x)dx = \int\limits_{0}^{1} f\left(b-\frac{1-t}{t}\right)\frac{1}{t^2}dt$
$\dfrac{\sqrt{1+4x^2}-1}{2x}$	$\dfrac{t}{1-t^2}$	$\int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = \int\limits_{-1}^{1} f\left(\frac{t}{1-t^2}\right)\frac{1+t^2}{(1-t^2)^2}dt$
$\dfrac{1-x+a}{-1-x+a}$	$a+\dfrac{1+t}{1-t}$	$\int\limits_{a}^{\infty} f(x)dx = \int\limits_{-1}^{1} f\left(a+\frac{1+t}{1-t}\right)\frac{2}{(1-t)^2}dt$
$\dfrac{1+x-b}{-1+x-b}$	$b+\dfrac{1+t}{t-1}$	$\int\limits_{-\infty}^{b} f(x)dx = \int\limits_{-1}^{1} f\left(b+\frac{1+t}{t-1}\right)\frac{2}{(t-1)^2}dt$
$\dfrac{2x-b-a}{b-a}$	$\dfrac{(b-a)}{2}t+\dfrac{(b+a)}{2}$	$\int\limits_{a}^{b} f(x)dx = \frac{b-a}{2}\int\limits_{-1}^{1} f\left(\frac{(b-a)}{2}t+\frac{(b+a)}{2}\right)dt$