

4 Técnicas de Integração Numérica

Em alguns casos para estimar os parâmetros de um determinado modelo e principalmente, em cálculo de probabilidades, nos deparamos com uma integral definida denotada por

$$\int_a^b f(x)dx \quad (1)$$

em que f é uma função contínua no intervalo $[a, b]$. Em geral, para calcular a integral em (1), utilizamos o seguinte teorema:

Teorema Fundamental do Cálculo: se $f(x)$ é uma função contínua em $[a, b]$ e existe uma primitiva $F(x)$ neste intervalo tal que

$$F'(x) = \frac{d}{dx}F(x) = f(x).$$

Então, a integral definida em (1) pode ser determinada por

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a).$$

No entanto, em algumas situações, f não é função que possa ser integrada analiticamente ou o valor de $f(x)$ é conhecido apenas em alguns pontos num intervalo $[a, b]$. Uma alternativa é a utilização de métodos numéricos para obter uma aproximação para o valor da integral (1), cujo o procedimento envolvido nessa aproximação é denominado de quadratura numérica. Nesse contexto, podemos aproximar a integral em (1) utilizando uma combinação linear de valores de $f(x)$ como a seguinte expressão

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i), \quad x_i \in [a, b], \quad (2)$$

em que $a \leq x_1 < \dots < x_n \leq b$ são os pontos (ou nós) e $w_i (i = 1, \dots, n)$ são os pesos (ou coeficientes) e da quadratura. A expressão em (2) é conhecida como fórmula de quadratura.

Nessa Seção, apresentaremos duas técnicas de integração, quadratura Gaussiana e Laplace, para obtenção dos pontos e pesos para a quadratura numérica. Em cada caso, vamos supor que temos uma função $f(x)$ e um intervalo $[a, b]$ e o objetivo é determinar uma fórmula de quadratura para aproximar o valor de uma integral definida.

4.1 Aproximação de Quadratura de Gauss

Na fórmula de quadratura de Gauss, os pontos e os pesos da quadratura são determinados de forma a minimizar o erro da aproximação em (2) e de modo que a mesma seja exata para polinômios de grau menor ou igual à $2n + 1$. Dessa forma, a ideia da quadratura de Gauss é substituir a função $f(x)$ por um polinômio ortogonal que se aproxime razoavelmente no intervalo $[a, b]$.

Definição: Sejam $P_0(x), P_1(x), P_2(x), \dots$ de graus $0, 1, 2, \dots$. Se

$$\begin{cases} \langle P_i(x), P_j(x) \rangle = 0 & \text{se } i \neq j \\ \langle P_i(x), P_i(x) \rangle \neq 0 & \text{se } P_i(x) \neq 0 \end{cases}$$

então os polinômios $P_0(x), P_1(x), P_2(x), \dots$ são ortogonais.

Então, os pontos da quadratura de Gauss são as raízes do polinômio ortogonal de grau n . As fórmulas da quadratura de Gauss baseada nos polinômios ortogonais mais conhecidos são:

► Gauss-Legendre

Sejam $f : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua e a integral definida dada por

$$\int_{-1}^1 f(x)dx.$$

Então, a fórmula da quadratura de Gauss-Legendre para integrais da forma (3) é dada por

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i),$$

em que os pontos x_i são zeros do polinômio de Legendre denotado por

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (3)$$

e os pesos definidos por

$$w_i = \frac{2}{(1 - x_i^2)[P'_n(x_i)]^2},$$

com $P'_n(x_i)$ sendo a derivada do polinômio de Legendre (3).

► Gauss-Laguerre

Sejam $f : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua e a integral definida dada por

$$\int_0^\infty f(x) e^{-x} dx$$

Assim, a fórmula da quadratura de Gauss-Legendre para integrais do tipo (3) é expressa por

$$\int_0^\infty f(x) e^{-x} dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i),$$

em que os pontos x_i são zeros do polinômio de Laguerre dado por

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n) \quad (4)$$

e os pesos definidos por

$$w_i = \frac{(n!)^2}{x_i [L'_n(x_i)]^2},$$

com $L'_n(x_i)$ sendo a derivada do polinômio de Laguerre (4).

► Gauss-Hermite

Sejam $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua e a integral definida dada por

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

Logo, a fórmula da quadratura de Gauss-Hermite para integrais da forma (3) é denotada por

$$\int_{-\infty}^\infty f(x) e^{-x^2} dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i),$$

em que os pontos x_i são zeros do polinômio de Hermite definidos por

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (5)$$

e os pesos expressos por

$$w_i = \frac{2^{n+1} (n!) \sqrt{\pi}}{[H'_n(x_i)]^2},$$

com $H'_n(x_i)$ sendo a derivada do polinômio de Hermite (5).

★ **Observação:** Os pontos e os pesos para quadratura de Gauss podem ser determinadas pelo pacote `statmod` do R da seguinte forma

```
library(statmod)
gauss.quad(n, 'polinômio')
```

em que `n` é o número de pontos da fórmula da quadratura e `polinômio` é nome do polinômio utilizado para aproximar a integral definida.

Dessa forma, um roteiro para calcular um valor aproximado de uma integral definida usando a fórmula de quadratura de Gauss com polinômios ortogonais é dado por:

- P1) Fixar n pontos da quadratura;
- P2) Determinar as raízes x_1, \dots, x_n do n -ésimo polinômio ortogonal;
- P3) Calcular os pesos w_1, \dots, w_n ;
- P4) Calcular $f(x_i)$ para $i = 1, \dots, n$;
- P5) Calcular $\sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$.

4.2 Aproximação de Laplace

Sejam $g : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função duas vezes diferenciável e λ uma constante. Suponha que $g(x)$ tem um único mínimo global em $x_0 \in [a, b]$, então:

- $g'(x_0) = 0$;
- $g''(x_0) > 0$.

Agora, seja $h : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $h(x_0) \neq 0$ e $h'(x_0) = 0$. Dessa forma, a aproximação de Laplace é uma técnica utilizada para obter o comportamento assintótico de integrais da seguinte forma

$$I(\lambda) = \int_a^b e^{-\lambda g(x)} h(x) dx \quad (6)$$

quando λ é suficientemente grande.

Para determina uma aproximação para a integral (6), vamos utilizar a expansão de Taylor de ordem 2 na função $g(x)$ em torno de x_0 , então

$$g(x) \approx g(x_0) + g'(x_0)(x - x_0) + \frac{g''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 = g(x_0) + \frac{g''(x_0)}{2}(x - x_0)^2.$$

Logo, a integral (6) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= \int_a^b \exp \left[-\lambda \left(g(x_0) + \frac{g''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 \right) \right] h(x) dx = \\ &= \exp [-\lambda g(x_0)] \int_a^b \exp \left[-\frac{\lambda g''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 \right] h(x) dx. \end{aligned}$$

Mas, utilizando a expansão de Taylor de ordem 1 na função $h(x)$ em torno de x_0 , temos

$$h(x) \approx h(x_0) + h'(x_0)(x - x_0) = h(x_0).$$

Dessa forma,

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= \exp [-\lambda g(x_0)] \int_a^b \exp \left[-\frac{\lambda g''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 \right] h(x_0) dx = \\ &= \exp [-\lambda g(x_0)] h(x_0) \underbrace{\int_a^b \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(x - x_0)^2}{(\lambda g''(x_0))^{-1}} \right] dx}_A. \end{aligned} \quad (7)$$

Por meio da expressão (7), podemos observar que A tem as seguintes características:

- A decai rapidamente à medida que afastamos x de x_0 , ou seja, não faria diferença os limites de integração serem $[-\infty, \infty]$ ao invés de $[a, b]$ quando λ é suficientemente grande;
- A tem o núcleo da distribuição normal com parâmetro $\mu = x_0$ e $\sigma^2 = [\lambda g''(x_0)]^{-1}$.

Então, a expressão (7) pode ser reescrita como

$$I(\lambda) \approx \exp[-\lambda g(x_0)] h(x_0) \frac{\sqrt{2\pi[\lambda g''(x_0)]^{-1}}}{\sqrt{2\pi[\lambda g''(x_0)]^{-1}}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(x-x_0)^2}{(\lambda g''(x_0))^{-1}}\right] dx =$$

$$\exp[-\lambda g(x_0)] h(x_0) \sqrt{2\pi[\lambda g''(x_0)]^{-1}} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi[\lambda g''(x_0)]^{-1}}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(x-x_0)^2}{(\lambda g''(x_0))^{-1}}\right] dx}_{1}.$$

Portanto, uma aproximação do valor da integral (6) é dada por

$$I(\lambda) = \int_a^b e^{-\lambda g(x)} h(x) dx \approx \exp[-\lambda g(x_0)] h(x_0) \sqrt{2\pi[\lambda g''(x_0)]^{-1}} \text{ quando } \lambda \rightarrow \infty.$$