

Polinômios Ortogonais e Quadratura Gaussiana

A ideia principal da Expansão do Caos Polinomial (ECP) reside na aproximação de uma função quadraticamente integrável (que representa a saída de um modelo físico) por meio de uma soma finita de funcionais ortogonais. Isto quer dizer que uma função $\mathcal{M}(x)$ pode ser representada como uma soma de um conjunto único de coeficientes, a_i , junto com uma base de polinômios ortogonais apropriada, $\{\Phi_i\}_{i=0}^{\infty}$, tal que

$$\mathcal{M}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \Phi_i(x).$$

A representação acima, assume que a base de polinômios é ortogonal no intervalo $[a, b]$, com respeito a uma função peso $w(x)$, tal que

$$\langle \Phi_n; \Phi_m \rangle = \int_a^b \Phi_n(x) \Phi_m(x) w(x) dx = \delta_{nm}, \quad (3-1)$$

onde

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 0 & \text{se } n \neq m, \\ 1 & \text{se } i = j. \end{cases}$$

representa a delta de Kronecker.

Logo, podemos relacionar os polinômios ortogonais com o conceito de quadratura Gaussiana. De fato, as integrais da eq. (3-1) podem ser calculadas através de uma quadratura Gaussiana associada ao ECP. Note que o cálculo dessas integrais ocorre por meio de uma seleção reduzida de pontos em que a função \mathcal{M} será avaliada. Além da preocupação com o custo computacional, os resultados obtidos usando quadratura de Gauss são mais exatos em relação às técnicas de integração numérica tradicionais, como por exemplo, Regra de Simpson ou a regra trapezoidal.

Portanto, neste capítulo, vamos introduzir o conceito de sequência de polinômios ortogonais, logo destacaremos os polinômios ortogonais clássicos, e em seguida abordaremos as quadraturas de Gauss associadas a estes polinômios: Gauss-Legendre, Gauss-Laguerre, e Gauss-Hermite. Nosso foco é o caso de uma dimensão, isto quer dizer, polinômios em \mathbb{R} .

3.1 Polinômios Ortogonais

Os polinômios ortogonais têm origem de um certo tipo de frações contínuas, que carrega o nome de Stieltjes. Apesar da proximidade dos conceitos de frações contínuas e o problema de momentos, frações contínuas têm sido gradualmente abandonadas. Em seu lugar, a propriedade de ortogonalidade em si mesma tem sido tomada como básica (Szegő, 1939).

Nesta seção definiremos os polinômios ortogonais e algumas de suas propriedades. Especificamente, serão expostos os principais resultados dos polinômios ortogonais com relação à quadratura de Gauss. Começemos por definir o conceito de momentos de uma distribuição e, em seguida, o conceito de ortogonalidade.

Definição 3.1 *Seja $-\infty \leq a \leq b \leq \infty$ (um intervalo $[a, b]$). Considere $\alpha(x)$ uma função $\alpha(x) : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ real limitada, tal que α não é constante no intervalo aberto (a, b) . Os momentos de uma distribuição são definidos da seguinte maneira:*

$$\mu_k = \int_a^b x^k d\alpha(x), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Se os momentos μ_k são finitos, então $d\alpha(x)$ é chamada de distribuição (medida positiva) no intervalo aberto (a, b) .

Seja $w : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ uma função peso, se w for contínua, então $d\alpha(x) = w(x)dx, \forall x \in (a, b)$. Portanto, $w(x)dx \geq 0$ em (a, b) . Ao longo desta dissertação w sempre será uma função contínua.

Seja \mathbb{P}_n o espaço linear de todas as combinações lineares de polinômios de grau no máximo n , é dizer,

$$\mathbb{P}_n = \text{span}\{x^k : k = 0, 1, \dots, n\}.$$

Os elementos de \mathbb{P}_n também chamados de polinômios de grau n , denotados por $P_n(x)$, podem ser escritos como

$$P_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n = \sum_{k=0}^n a_kx^k, \quad a_n \neq 0.$$

Definição 3.2 (Sequência de Polinômios Ortogonais- SPO) *Seja $P_n(x)$ um elemento de \mathbb{P}_n , dizemos que a sequência de polinômios, $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$, é ortogonal com relação à função peso $w(x)$ no intervalo aberto (a, b) se:*

$$\langle P_n ; P_m \rangle = \int_a^b P_n(x)P_m(x)\omega(x)dx = 0, \text{ quando } n \neq m. \quad (3-2)$$

Na Definição 3-2 os polinômios são avaliados em uma variável x contínua. Por outro lado, esta pode ser reescrita para o caso discreto. Daí, que a eq. (3-2) pode ser redefinida como

$$\langle P_n(x) ; P_m(x) \rangle = \sum_{i=1}^M P_n(x_i)P_m(x_i)\omega(x_i). \quad (3-3)$$

Observe que em quaisquer das duas representações, eq. (3-2) e eq. (3-3), $\omega(x)$ é uma função peso positiva. Além disso, os limites de integração a e b na eq. (3-2), e o limite M na eq. (3-3), podem ser finitos ou infinitos.

Por outro lado, uma das maneiras de construir uma sequência de polinômios ortogonais, $P_0(x), P_1(x), \dots, P_j(x)$, com relação ao produto interno 3-2 é através do Processo de Ortogonalização de Gram- Schmidt (Hoffman & Kunze, 1961) como visto no na Seção 9.3 do Apêndice. De fato, considere o conjunto de potências n não negativas de x

$$\{1, x, x^2, x^3, x^4, \dots, x^n\},$$

linearmente independente (l.i.). Em seguida, calculamos os polinômios $P_0(x), P_1(x), P_2(x), \dots, P_n(x)$, da seguinte forma:

$$P_0(x) = 1,$$

e para $n = 1, 2, 3, \dots$,

$$P_n(x) = x^n + \alpha_0 P_0(x) + \alpha_1 P_1(x) + \dots + \alpha_{n-1} P_{n-1}(x),$$

onde os α_i são os coeficientes escalares da expansão por polinômios dados por

$$\alpha_k = -\frac{\langle x^k ; P_k \rangle}{\langle P_k ; P_k \rangle}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

Definição 3.3 (Sequência de polinômios ortonormais) *Considere o cenário da Definição 3.2. Uma sequência $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ é uma sequência de polinômios ortonormais se:*

$$\langle P_n ; P_m \rangle = \begin{cases} 0 & \text{se } n \neq m, \\ 1 & \text{se } n = m. \end{cases}$$

A sequência de polinômios ortonormais será denotada por $\{P_n^*(x)\}_{n=1}^{\infty}$.

A continuação são apresentadas algumas propriedades interessantes dos polinômios ortogonais.

Teorema 3.1 *Os polinômios $P_0(x), P_1(x), \dots, P_n(x)$, pertencentes a uma sequência de polinômios ortogonais $\{P_k(x)\}_{k=0}^n$ em \mathbb{P}_n são l.i. no \mathbb{P}_n .*

Demonstração: Ver, e.g., Kubrusly, 2011, p. 63 e p.349. \square

O fato que o espaço \mathbb{P}_n seja gerado pelas potências x^k com $k = 1, \dots, n$, junto com o Teorema 3.1, nos diz que os polinômios ortogonais $P_k(x)$, onde $k = 0, 1, 2, \dots, n$, com $P_k(x) \in \mathbb{P}_n$ formam uma base para o espaço linear \mathbb{P}_n . Por outro lado, o Teorema 3.2 mostra que os polinômios de duas sequências de polinômios ortogonais, que tenham o mesmo grau, definidas com a mesma função peso $w(x)$ no intervalo $[a, b]$ são iguais, exceto por um fator constante.

Teorema 3.2 *Sejam $\{P_n(x)\}_{n=0}^\infty$ e $\{Q_n(x)\}_{n=0}^\infty$ duas sequências de polinômios ortogonais com relação a função peso $w(x)$ no intervalo $[a, b]$. Então,*

$$P_n(x) = c_n Q_n(x),$$

com $c_n \in \mathbb{R}^*$, $n \in \mathbb{N}$.

Demonstração: Ver, e.g., Chihara, 1978, p. 9. \square

A sua vez, a norma de um polinômio $P_n(x)$ em $\{P_n(x)\}_{n=0}^\infty$, pode ser definida como

$$\|P_n(x)\| = \sqrt{\langle P_n(x); P_n(x) \rangle}.$$

Logo, para encontrar a sequência de polinômios ortonormais $\{P_n^*(x)\}_{n=1}^\infty$, basta dividir cada polinômio por sua norma:

$$P_n^*(x) = \frac{P_n(x)}{\|P_n(x)\|}.$$

Por outro lado, existe uma maneira de construir qualquer polinômio ortogonal (que pode representar uma forma eficiente do ponto de vista computacional) por meio de uma relação de recorrência, na qual só precisamos dos primeiros três polinômios para ter definida qualquer SPO. Isto, é formalmente definido no seguinte teorema.

Teorema 3.3 (Relação de Recorrência de 3 Termos) *Se $\{P_n(x)\}_{n=0}^\infty$ é uma sequência de polinômios ortogonais no intervalo aberto (a, b) relativa à função peso $w(x)$, então:*

$$P_{n+1}(x) = (\alpha_n x - \beta_n)P_n(x) - \gamma_n P_{n-1}(x), n \geq 0, \quad (3-4)$$

com

$$P_{-1}(x) = 0, P_0(x) = a_0.$$

Além disso, os termos α_n, β_n e γ_n são constantes, para $n \geq 0$, definidos por:

$$\alpha_n = \frac{a_n}{a_{n-1}} \neq 0; \beta_n = \gamma_n \frac{\langle xP_n; P_n \rangle}{\langle P_n; P_n \rangle},$$

$$\text{e } \gamma_n = \frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}} \frac{\langle P_n; P_n \rangle}{\langle P_{n-1}; P_{n-1} \rangle} \neq 0.$$

Demonstração: Ver, e.g., Gautschi, 2004, p. 8. □

Para construirmos a sequência de polinômios ortogonais mônicos, representados por $\{\bar{P}_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$, a partir dos polinômios ortogonais $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ com relação a função peso $w(x)$, basta dividirmos cada P_n pelo correspondente coeficiente principal, ou seja,

$$\bar{P}_n(x) = \frac{P_n(x)}{a_n}, n \geq 1.$$

De maneira similar, podemos apresentar um resultado equivalente ao Teorema 3.3 só que para polinômios mônicos $\{P_n(x)\}$.

Teorema 3.4 *Se $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ é uma sequência de polinômios ortogonais no intervalo aberto (a, b) com respeito à função peso $w(x)$, então:*

$$\bar{P}_n(x) = (x - \beta_n)\bar{P}_n(x) - \gamma_n \bar{P}_{n-1}(x), \quad (3-5)$$

com $\bar{P}_{-1}(x) = 0, \bar{P}_0(x) = 1$, e onde β_n, γ_n são constantes para $n \geq 1$, tal que

$$\beta_n = \frac{\langle x\bar{P}_n; \bar{P}_n \rangle}{\langle \bar{P}_n; \bar{P}_n \rangle},$$

e

$$\gamma_n = \frac{\langle \bar{P}_n; \bar{P}_n \rangle}{\langle \bar{P}_{n-1}; \bar{P}_{n-1} \rangle} \neq 0.$$

Demonstração: A prova deste teorema é imediata da definição dos polinômios ortogonais mônicos e do Teorema 3.3. □

Os zeros dos polinômios ortogonais têm um papel fundamental no cálculo das integrais de interesse. Com efeito, os produtos internos, vistos no capítulo anterior, são definidos por meio de integrais, as quais podem ser calculadas numericamente por meio de quadraturas Gaussianas (que serão vistas ao final deste capítulo). Além disso, estas quadraturas utilizam os zeros dos polinômios ortogonais como os pontos da aproximação desta integral. Dito isso, vamos estabelecer então algumas propriedades dos zeros dos polinômios ortogonais. Em seguida, vamos enunciar o Teorema de Separação.

Teorema 3.5 *Se $P_n(x) \in \mathbb{P}_n(x)$ é uma SPO no intervalo aberto (a, b) com relação a função peso $w(x)$, então os zeros de $P_n(x)$ são reais, distintos e pertencem ao intervalo (a, b) .*

Demonstração: Ver, e.g., Chihara, 1978, p. 27. □

Teorema 3.6 (Teorema de Separação) *Se $x_0 = a, x_{n+1} = b$ e $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ são zeros dos polinômios P_n , então existe um único zero de P_{n+1} para cada subintervalo aberto (x_j, x_{j+1}) , $j = 0, 1, \dots, n$.*

Demonstração: Ver, e.g., Chihara, 1978, p. 28. □

A seguir apresentamos um algoritmo eficiente para calcular os zeros dos polinômios ortogonais, chamado o Método dos Autovalores.

Teorema 3.7 *Os zeros $\{x_i\}_{i=0}^n$ do polinômio ortogonal $P_{n+1}(x)$ são os autovalores da seguinte matriz Jacobiana simétrica tri-diagonal:*

$$J_{n+1} = \begin{pmatrix} \delta_0 & \epsilon_1 & & & \\ \epsilon_1 & \delta_1 & \epsilon_2 & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \epsilon_{n-1} & \delta_{n-1} & \epsilon_n \\ & & & \epsilon_n & \delta_n \end{pmatrix}$$

onde $\alpha_j, \beta_j, \gamma_j$ são os coeficientes da relação de recorrência da form. (3-4) tais que $\delta_j = \frac{\beta_j}{\alpha_j}$, $j \geq 0$; $\epsilon_j = \frac{1}{\alpha_{j-1}} \sqrt{\frac{\alpha_{j-1}\gamma_j}{\alpha_j}}$, $j \geq 1$.

Demonstração: Ver, e.g., Shen et al., 2011, p. 55. □

No caso de polinômios mônicos, os zeros podem ser obtidos pela seguinte matriz:

$$J_{n+1} = \begin{pmatrix} \beta_0 & \sqrt{\gamma_1} & & & \\ \gamma_1 & \beta_1 & \sqrt{\gamma_2} & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \sqrt{\gamma_{n-1}} & \beta_{n-1} & \sqrt{\gamma_n} \\ & & & \sqrt{\gamma_n} & \beta_n \end{pmatrix}$$

onde β_j e γ_j são os termos que aparecem na eq. (3-5). Além disso, se $W_{n+1}^\top W = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{n+1})$, onde W^\top representa a matriz transposta de W , e $W^\top W = I$ é a matriz identidade $n + 1 \times n + 1$, então os zeros dos polinômios são $x_j = \lambda_j$.

3.2

Polinômios Ortogonais Clássicos

Com a teoria de polinômios ortogonais, o próximo passo será estabelecer a classe de polinômios ortogonais que será utilizada neste trabalho. Especialmente, vamos destacar os polinômios contínuos de Legendre, Laguerre, e Hermite definidos num intervalo $a \leq x \leq b$ específico. Tais polinômios foram considerados por Szego (1939) como polinômios ortogonais clássicos.

Os polinômios de Legendre, denotados por $\{Le_n(x)\}$, $n = 0, 1, 2, \dots$, formam uma base ortogonal para $L^2[-1, 1]$ com respeito à função peso $\omega(x) = 1$, a qual é associada com a densidade da distribuição Uniforme (Le Maitre & Knio, 2010). Estes polinômios podem ser definidos de diversas maneiras. O Teorema 3-4 garante que podemos defini-los por meio da fórmula recursiva:

$$Le_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1}xLe_n(x) - \frac{n}{n+1}Le_{n-1}(x); \quad n > 0, \quad (3-6)$$

com $Le_0(x) = 1$ e $Le_1(x) = x$, tal que o coeficiente principal é dado por:

$$a_n = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}. \quad (3-7)$$

Daí, a relação de ortogonalidade para os polinômios de Legendre Le_n é

$$\langle Le_n, Le_m \rangle = \int_{-1}^1 Le_n(x)Le_m(x)dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{nm}.$$

A seguir, apresentamos os sete primeiros polinômios de Legendre, que são representados graficamente na figura 3.1.

- $Le_0 = 1$
- $Le_1 = x$
- $Le_2 = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$

- $Le_3 = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$
- $Le_4 = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$
- $Le_5 = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$
- $Le_6 = \frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)$.

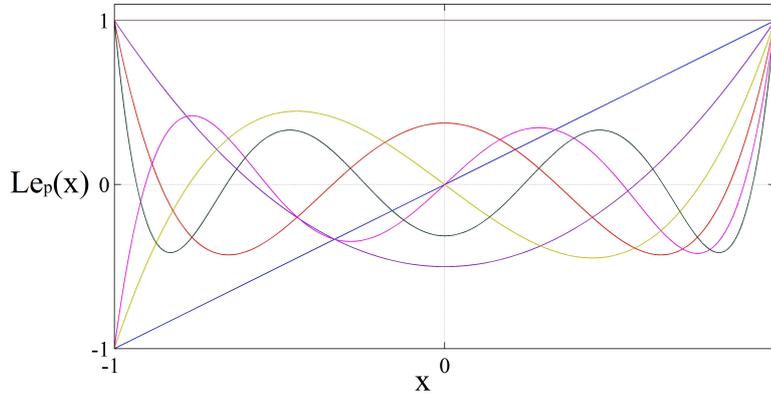


Figura 3.1: Polinômios de Legendre

A sua vez, podemos usar a relação de recorrência mônica da eq. (3-5). Neste caso, usamos a eq. (3-6) e o coeficiente principal eq. (3-7) associado a estes polinômios obtendo:

$$\bar{L}e_{n+1}(x) = (x - 0)\bar{L}e_n(x) - \frac{n^2}{4n^2 - 1}\bar{L}e_{n-1}(x), \quad (3-8)$$

onde $\beta_n = 0$ e $\gamma_n = \frac{1}{4-n^2}$.

A seguir, descrevemos os polinômios de Laguerre, denotados por $La_n(x)$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Estes polinômios formam uma base ortogonal para $L^2[0, \infty]$ com respeito à função peso $\omega(x) = \exp(-x)$, a qual é associada com a densidade da distribuição Exponencial (Le Maitre & Knio, 2010). Equivalente ao análise feito para os polinômios de Legendre, podemos definir os polinômios de Laguerre de maneira recursiva dada no Teorema 3-4. Sejam $La_0(x) = 1$ e $La_1(x) = 1 - x$, segue que:

$$La_{n+1}(x) = \frac{(2n + 1 - x)}{n + 1}La_n(x) - nLa_{n-1}(x), \quad (3-9)$$

onde o coeficiente principal é dado por:

$$a_n = \frac{(-1)^n}{(n!)}. \quad (3-10)$$

Com isto, podemos mostrar que os polinômios de Laguerre La_n formam uma base ortonormal, isto porque

$$\langle La_n, La_m \rangle = \int_0^\infty La_n(x)La_m(x) \exp(-x)dx = \delta_{nm}.$$

A seguir enunciamos os primeiros sete polinômios de Laguerre, os quais são representados graficamente na figura 3.2.

- $La_0 = 1$
- $La_1 = 1 - x$
- $La_2 = \frac{1}{2}(x^2 - 4x + 2)$
- $La_3 = \frac{1}{6}(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6)$
- $La_4 = \frac{1}{24}(x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24)$
- $La_5 = \frac{1}{120}(-x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 600x + 120)$
- $La_6 = \frac{1}{720}(x^6 - 36x^5 + 450x^4 - 2400x^3 + 5400x^2 - 4320x + 720)$.

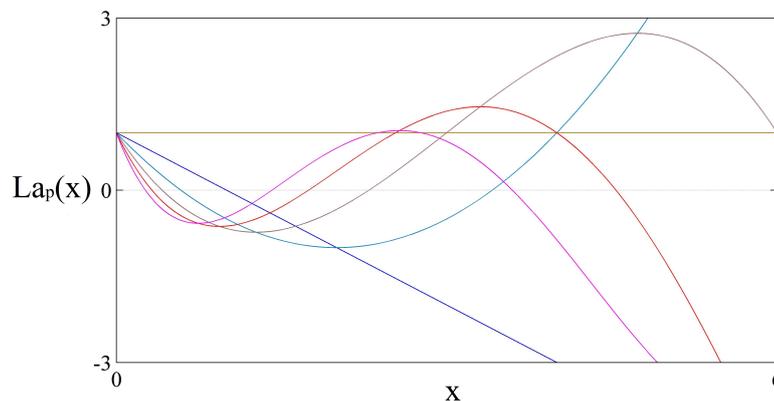


Figura 3.2: Polinômios de Laguerre

Os polinômios mônicos são obtidos por meio do coeficiente principal da eq. (3-10), de tal forma que $\bar{La}_n(x) = \frac{La_n(x) \cdot n!}{(-1)^n}$. Daí, aplicando o Teorema 3.4 podemos obter relação mônica de recorrência:

$$\bar{La}_{n+1}(x) = (x - (2n + 1))\bar{La}_n(x) - n\bar{La}_{n-1}(x), \quad (3-11)$$

com $\beta_n = 2n + 1$ e $\gamma_n = n^2$.

Por fim, definimos os polinômios de Hermite. Existem dois tipos de polinômios de Hermite: os probabilísticos e os físicos. O “tipo” do polinômio está ligado a função peso que o caracteriza. Começemos por definir os polinômios Hermite físicos. Estes são denotados por $H_n(x)$, e têm a função peso dada por:

$$\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2),$$

onde o x é definido sobre os reais. Note que, esta função peso apresenta uma similitude com a densidade de uma distribuição Normal. Estes polinômios podem ser definidos a partir da seguinte relação recursiva da eq. (3-4), de tal forma que:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \quad (3-12)$$

com $H_0(x) = 1$ e $H_1(x) = 2x$; onde o coeficiente principal é dado por:

$$a_n = 2^n. \quad (3-13)$$

Além disso, a norma quadrada dos polinômios de Hermite H_n é dada por:

$$h_n = \langle H_n, H_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} [H_n(x)]^2 \exp(-x^2) dx = 2^n n!$$

Os primeiros sete polinômios de Hermite físicos são os seguintes:

- $H_0 = 1$
- $H_1 = 2x$
- $H_2 = 4x^2 - 2$
- $H_3 = 8x^3 - 12x$
- $H_4 = 16x^4 - 48x^2 + 12$
- $H_5 = 32x^5 - 160x^3 + 120$
- $H_6 = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$.

Se tomarmos a eq. (3-12) e dividirmos pelo coeficiente principal 2^{n+1} obtemos que $\frac{H_{n+1}(x)}{2^{n+1}} = 2x \frac{H_n(x)}{2^{n+1}} - 2n \frac{H_{n-1}(x)}{2^{n+1}}$. Logo, por meio do Teorema 3.4 podemos obter relação mônica de recorrência a seguir com $\beta_n = 0$ e $\gamma_n = \frac{n}{2}$

$$\bar{H}_{n+1}(x) = (x - 0)\bar{H}_n(x) - \frac{n}{2}\bar{L}a_{n-1}(x). \quad (3-14)$$

Por outro lado, os polinômios de Hermite probabilísticos são denotados por $He_n(x)$. Neste caso, a função peso é

$$\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$$

onde x é definido sobre os reais. Observe que para este caso, a função peso é exatamente igual à densidade de uma distribuição Normal. Estes polinômios podem ser definidos a partir da relação recursiva do Teorema 3.3 como:

$$He_{n+1}(x) = xHe_n(x) - He_{n-1}(x), \quad (3-15)$$

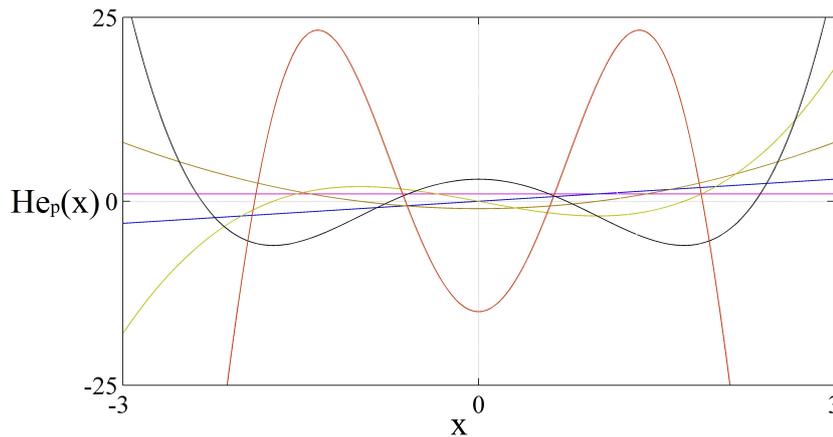


Figura 3.3: Polinômios de Hermite probabilísticos

com $He_0(x) = 1$ e $He_1(x) = x$.

A sua vez, temos os sete primeiros polinômios de Hermite probabilísticos podem ser visualizados na figura 3.3.

- $He_0 = 1$
- $He_1 = x$
- $He_2 = x^2 - 1$
- $He_3 = x^3 - 3x$
- $He_4 = x^4 - 6x^2 + 3$
- $He_5 = x^5 - 10x^3 + 15x$
- $He_6 = x^6 - 15x^4 + 45x^2 - 15$.

Em particular, as famílias de polinômios ortogonais apresentadas anteriormente são membros do chamado esquema Askey de polinômios (Askey & Wilson, 1985) que pode ser visualizado na figura 3.4. Este esquema classifica polinômios ortogonais hiper-geométricos contínuos e discretos que obedecem certas diferenças e equações diferentes. Um aspecto importante da família Askey é que as funções peso de alguns de esses polinômios correspondem a distribuições de probabilidade frequentemente usadas; que a sua vez têm uma quadratura Gaussiana associada para avaliar facilmente os produto internos.

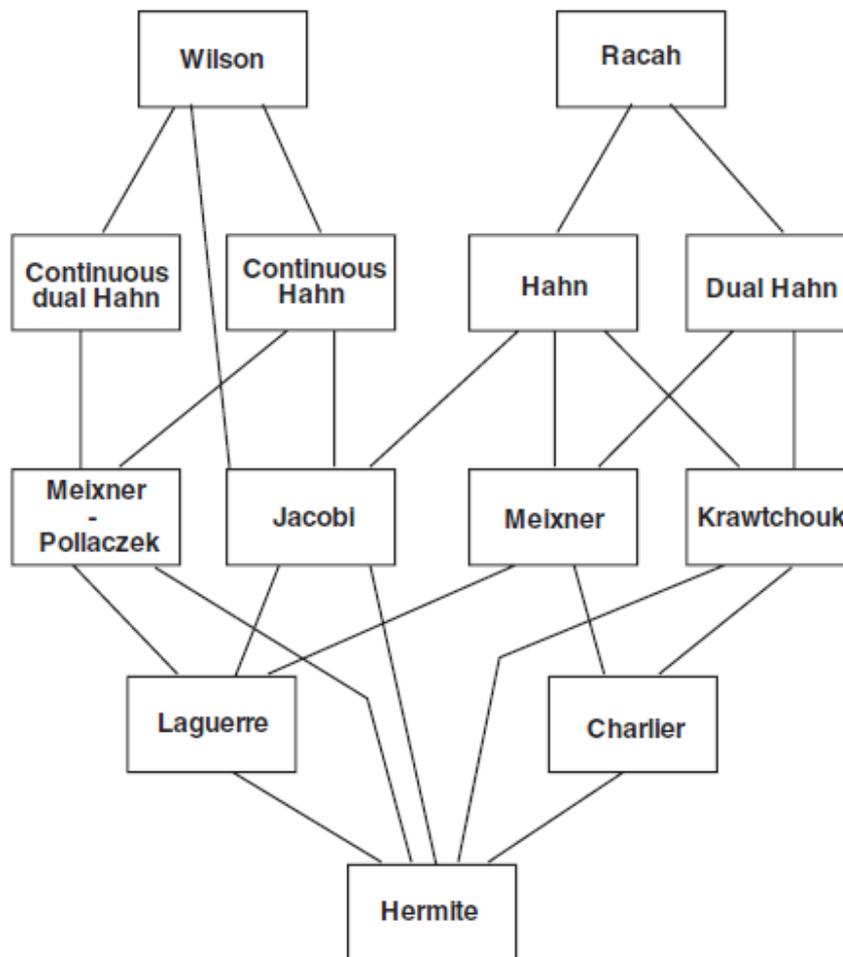


Figura 3.4: Esquema Askey

3.3 Quadraturas Gaussianas

Em algum momento, matemáticos e cientistas são confrontados com integrais definidas que não são fáceis de calcular analiticamente (mesmo que uma função $f(x)$ seja conhecida). Para superar essa dificuldade são usados métodos numéricos. Integração numérica envolve a substituição de uma integral por uma soma ponderada. O termo quadratura é usado como sinônimo de integração numérica em uma dimensão. Seja $f(x)$ uma função definida em um intervalo $[a, b]$ e no conjunto de pontos diferentes $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$, então a integração numérica por aproximação pode ser definida como

$$\int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=0}^n w_i f(x_i), \quad (3-16)$$

onde os w_i são os pesos da quadratura e x_i os pontos da quadratura. Particularmente, na aplicação deste trabalho é preciso avaliar os momentos de uma função, que são representados por meio de integrais definidas. Existem

diferentes métodos de integração numérica para a avaliação de integrais definidas. Os métodos mais usuais são as fórmulas de Newton Cotes e as regras de quadratura Gaussianas, esta segunda técnica tem boa exatidão e, portanto, vamos utilizá-la para calcular as integrais envolvidas nos produtos internos que precisamos aproximar.

O matemático Gauss tentando aperfeiçoar as técnicas de Newton-Cotes formulou a regra de quadratura, que hoje leva seu nome para o caso em que $w(x) = 1$, usando frações contínuas (Stoer et al., 2002). A generalização para funções com pesos arbitrários surgiu mais tarde, em 1877, com a contribuição de Christoffel e Chebyshev (Gautschi, 2004).

Antes de definir a quadratura de Gauss, precisamos falar um pouco sobre os polinômios de interpolação de Lagrange. Seja $x \in [a, b]$ e $\{t_1, t_2, \dots, t_n\}_{n \geq 1}$ um conjunto de números distintos, tal que:

$$F(x) = \prod_{i=1}^n (x - t_i).$$

Daí, $F(x)/(x - t_i)$ é um polinômio de grau $n - 1$ e

$$\lim_{x \rightarrow t_k} \frac{F(x)}{x - t_k} = F'(t_k) \neq 0.$$

A partir de um polinômio de grau $n - 1$, definido por:

$$l_k(x) = \frac{F(x)}{(x - x_k)F'(x_k)},$$

com a propriedade $l_k(x) = \delta_{jk}$, vamos definir os polinômios de Lagrange.

Sejam $\{y_1, \dots, y_n\}$ um conjunto de escalares, então o polinômio de interpolação de Lagrange de ordem n pode ser definido como:

$$L_n(x) = \sum_{k=1}^n y_k l_k(x),$$

onde $L_n(x)$ tem grau menor ou igual a $n - 1$ e satisfaz a propriedade abaixo

$$L_n(x_j) = \sum_{k=1}^n y_k \delta_k(x) = y_j, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Este polinômio tem relevância, pois através dele podemos construir um polinômio de grau no máximo $n - 1$ cujo gráfico passe através dos pontos

$$(x_i, y_i), \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

onde $L_n(x)$ é a única solução (Chihara, 1978).

Observe que as fórmulas de Newton-Cotes tem uma seleção simples dos pontos onde a função $f(x)$ será avaliada no intervalo $[a, b]$. Esta família de métodos estão baseados em pontos x_i que são definidos a partir de uma partição uniforme do intervalo $[a, b]$, o que representa uma deficiência do método. Portanto, a ideia da quadratura Gaussiana é ter liberdade de escolher os pontos de avaliação x_i para ganhar mais exatidão no cálculo de aproximação das integrais. Em outras palavras, alguém poderia se perguntar se é possível integrar exatamente um polinômio grau $2n - 1$ com n avaliações. A resposta para esta pergunta é afirmativa, e veremos que isto é possível com as regras de integração Gaussianas, também chamadas fórmulas de quadratura Gaussiana (ver, e.g., Le Maitre & Knio (2010); Monaham (2011); Stroud & Secrest (1966); Stoer et al. (2002)).

As regras de quadratura são baseadas em valores especiais de pesos, ω_i , e abscisas, x_i . As abscisas são geralmente chamadas de *pontos*, *nós* ou *pontos de Gauss*, e são normalmente pré-calculados e disponíveis em tabelas. Por outro lado, estes valores também podem ser calculados por meio de algoritmos e códigos.

Exemplo 3.1 *A regra de quadratura de dois pontos de Gauss para uma função $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ pode ser avaliada por*

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2).$$

Daí, precisamos encontrar 4 variáveis desconhecidas: x_1, x_2, ω_1 e ω_2 . Tais variáveis podem ser determinadas integrando um polinômio geral de ordem 3, $f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$, o qual tem 4 coeficientes. \square

Note que uma maior exatidão da integral demanda um número maior de pontos de Gauss. A quadratura de Gauss com n pontos está expressado abaixo:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2) + \dots + \omega_n f(x_n).$$

A seleção do n nem sempre é clara, pelo que experimentos são úteis para observar a influência da escolha do número de pontos.

A integração Gaussiana está baseada no uso de polinômios para aproximar o integrando $f(t)$ sobre o intervalo $[-1, 1]$. Assim, a exatidão dos resultados depende da seleção do polinômio. Por outro lado, em muitos casos temos que avaliar integrais em um intervalo mais geral. Usaremos a variável x no intervalo $[a, b]$, e uma transformação linear para mapear este intervalo para

x em intervalo $[-1, 1]$ para t . Se a integral não está sobre o intervalo $[-1, 1]$, então podemos aplicar uma mudança de variável para re-escrever qualquer integral sobre $[a, b]$ como uma integral sobre $[-1, 1]$. Em outras palavras, seja $x = mt + c$, note que se $x = a$ e $x = b$, então $t = -1$ e $t = 1$, respectivamente. Daí:

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2},$$

e portanto, obtemos:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right) \frac{b-a}{2} dt.$$

A forma simples da quadratura Gaussiana usa uma ponderação uniforme sobre o intervalo. Os pontos particulares que temos que avaliar $f(t)$ são raízes de uma classe particular de polinômios Legendre os quais serão vistos na próxima seção.

Se I_n é uma regra de quadratura, e assumimos que esta é exata para todos os polinômios de grau $\leq p$, então dizemos que I_n tem grau de precisão p . Na quadratura Gaussiana tanto os pontos como os pesos são escolhidos para maximizar o grau de precisão. O grau do polinômio aumenta proporcionalmente como o número de pontos usados na regra da quadratura. O grau do polinômio é $\leq 2n - 1$, onde n é o número de pontos e este polinômio tem $2n$ coeficientes. Assim, o número de incógnitas (i.e., $2n$) é igual ao número de equações para obter a solução exata.

Com a finalidade de relacionar as seções anteriores, lembremos que os polinômios ortogonais são classes de polinômios $P_n(x)$ definidos num intervalo $[a, b]$ que satisfazem a relação de ortogonalidade do Teorema 3-2. Portanto, sem perda de generalidade, vamos considerar integrais da forma

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

onde $w(x)$ é a função peso não negativa no intervalo $[a, b]$. Mais uma vez, cabe destacar que nosso interesse se encontra apenas em avaliar integrais de funções de polinômios definidas nos intervalos onde são definidos as famílias de polinômios ortogonais de Legendre, Laguerre e Hermite discutidas anteriormente.

No Exemplo 3.1 fizemos menção de um polinômio geral, mas faltou falar quem era esse polinômio. Sejam $a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq b$, n pontos distintos no intervalo $[a, b]$. Pela fórmula de Lagrange podemos construir o polinômio de interpolação da função $f(x)$ sobre os n pontos distintos x_k , $k = 1, 2, \dots, n$,

obtendo:

$$\begin{aligned}
 I(f) &= \int_a^b f(x)w(x)dx \\
 &= \int_a^b \left[\sum_{k=1}^n \frac{P(x)}{(x-x_k)P'(x_k)} + R_{n-1}(c) \right] w(x)dx \\
 &= \sum_{k=1}^n \left\{ \left[\frac{1}{P'(x_k)} \int_a^b \frac{P(x)}{x-x_k} w(x)dx \right] f(x_k) \right\} + \int_a^b R_{n-1}w(x)dx.
 \end{aligned}$$

Logo, podemos re-escrever $I(f)$ como:

$$I(f) = \int_a^b f(x)w(x)dx = \sum_{k=1}^n f(x_k)\omega_k + E_n(f), \quad (3-17)$$

cujos pesos ω_k , $k = 1, 2, \dots, n$, são dados por

$$\omega_k = \frac{1}{P'(x_k)} \int_a^b \frac{P(x)}{x-x_k} w(x)dx. \quad (3-18)$$

Neste caso, o erro de aproximação da função seria:

$$E_n(f) = \int_a^b R_{n-1}w(x)dx.$$

Teorema 3.8 *A fórmula de quadratura da eq. (3-17) com pesos dados pela eq. (3-18) é exata para polinômios de grau no máximo $2n - 1$.*

Demonstração: Ver, e.g., Gautschi, 2004, p. 20. □

Assim, as fórmulas de quadratura que satisfazem o Teorema 3.8 são conhecidas como fórmulas de quadratura Gaussianas.

3.4 Alguns exemplos de quadraturas Gaussianas

Com base nos conceitos definidos nas seções anteriores, apresentaremos alguns exemplos de quadraturas Gaussianas. Lembrando, que para o problema que estamos interessados (i.e, simulação de reservatórios de petróleo) decidimos investigar as quadraturas Gaussianas associadas aos polinômios de Legendre, Laguerre e Hermite. Isto porque as características de algumas variáveis que descrevem os reservatórios como por exemplo, porosidade e permeabilidade,

tomam valores nos intervalos onde estão definidos os polinômios ortogonais em questão.

O primeiro exemplo será a quadratura de Gauss-Legendre. Neste caso, trabalhamos com os polinômios de Legendre $Le_n(x)$ que foram definidos na eq. (3-6). Lembre que tais polinômios são ortogonais com relação à função peso $w(x) = 1$ no intervalo $[-1, 1]$, que a sua vez é associada à densidade de uma distribuição Uniforme. Para construirmos uma fórmula de quadratura Gaussiana para este caso, devemos utilizar os zeros desses polinômios como nós e calcular os pesos através dos polinômios de Legendre. Assim, consideremos a seguinte fórmula de quadratura

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) + R_n, \quad (3-19)$$

onde

$$R_n = \frac{2^{n+1}(n!)^4}{(2n+1)[(2n)!]^3} f^{2n}(\xi), \quad -1 < \xi < 1. \quad (3-20)$$

E n representa o número de pontos de colocação, x_i denota a coordenada do i -ésimo ponto de colocação, e ω_i o correspondente peso. Por sua vez, R_n denota o resto da quadratura; isto indica que a fórmula é precisa se o grau maior do polinômio menor que $2n$.

Enfatizando, temos que as coordenadas x_i são os zeros dos polinômios de Legendre $Le_n(x)$, e os pesos são dados por

$$\omega_i = \frac{2}{(1-x_i^2)[Le'_n(x_i)]^2}. \quad (3-21)$$

No Exemplo 3.2 calculamos uma integral definida em um intervalo $[a, b]$ de uma função arbitrária por meio do uso da quadratura de Gauss-Legendre.

Exemplo 3.2 *Consideremos o caso em que $n = 3$. O cálculo dos nós e dos pesos são feitos por meio da fórmula de quadratura da eq. (3-19). Como foi mencionado, os nós x_1, x_2 e x_3 são os zeros do polinômio $Le_3(x)$. Da relação de recorrência da eq. (3-6) temos que:*

$$Le_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x).$$

Os zeros desse polinômios são:

$$x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \quad x_2 = 0 \quad e \quad x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}.$$

Logo, podemos substituir na eq. (3-21) os nós anteriores, de forma tal que:

$$\omega_1 = \frac{5}{9}, \omega_2 = \frac{8}{9} \text{ e } \omega_3 = \frac{5}{9}.$$

Portanto, a fórmula de quadratura

$$\int_b^a f(x)dx = \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + E_3$$

é precisa para polinômios de grau no máximo 5, isto é, $E_3 = 0$ se $f(x) \in \mathbb{P}_5$.

No exemplo anterior, os zeros e pesos de qualquer polinômio de Legendre podem ser encontrados repetindo o processo anterior para qualquer n , onde foi utilizado a eq. (3-21). No entanto, decidiu-se implementar o método dos Autovalores, pois segundo Shen (2011) o método é considerado mais elegante na obtenção dos zeros e pesos da quadratura Gaussiana. Neste caso, pela eq. (3-8) temos que $\beta_n = 0$ e $\gamma_n = \frac{1}{4-n^2}$. Em particular, a Tabela 3.1 contém os zeros e os pesos da quadratura de Gauss-Legendre para diferentes valores de n .

n = 5		n = 10		n = 15	
x_i	w_i	x_i	w_i	x_i	w_i
-0.906180	0.236927E+00	-0.973907	0.666713E-01	-0.987993	0.307532E-01
-0.538469	0.478629E+00	-0.865063	0.149451E+00	-0.937273	0.703660E-01
0.000000	0.568889E+00	-0.679410	0.219086E+00	-0.848207	0.107159E+00
0.538469	0.478629E+00	-0.433395	0.269267E+00	-0.724418	0.139571E+00
0.906180	0.236927E+00	-0.148874	0.295524E+00	-0.570972	0.166269E+00
-	-	0.148874	0.295524E+00	-0.394151	0.186161E+00
-	-	0.433395	0.269267E+00	-0.201194	0.198431E+00
-	-	0.679410	0.219086E+00	0.000000	0.202578E+00
-	-	0.865063	0.149451E+00	0.201194	0.198431E+00
-	-	0.973907	0.666713E-01	0.394151	0.186161E+00
-	-	-	-	0.570972	0.166269E+00
-	-	-	-	0.724418	0.139571E+00
-	-	-	-	0.848207	0.107159E+00
-	-	-	-	0.937273	0.703660E-01
-	-	-	-	0.987993	0.307532E-01

Tabela 3.1: Zeros e pesos para quadratura de Gauss-Legendre

Agora, realizamos uma análise similar para a quadratura de Gauss-Legendre, só que para o caso da quadratura de Gauss-Laguerre. Em particular, lembremos da Seção 3.2, que os polinômios de Laguerre $La_n(x)$ são ortogonais com relação à função peso $w(x) = \exp(-x)$ no intervalo $[0, \infty)$.¹ Daí, para

¹Função peso associada com a densidade da distribuição Exponencial.

construirmos uma fórmula de quadratura Gaussiana, devemos utilizar os zeros desses polinômios como nós e calcular os pesos através dos polinômios de Laguerre. Considere a seguinte fórmula de quadratura

$$\int_0^{\infty} f(x) \exp(-x) dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) + R_n, \quad (3-22)$$

onde

$$R_n = \frac{(n!)^2}{(2n)!} f^{2n}(\xi), \quad 0 < \xi < \infty. \quad (3-23)$$

Com n representando o número de pontos de colocação, e x_i e ω_i representando, respectivamente, os zeros e os pesos. Da eq. (3-23), segue que a quadratura para a eq. (3-22) é exata quando a ordem do polinômio, f , é menor que $2n$. As coordenadas x_i são os zeros dos polinômios de Laguerre $La_n(x)$, e os pesos são dados por:

$$\omega_i = \frac{(2n!)^2 x_i}{(n+1)^2 [La_{n+1}(x_i)]^2}. \quad (3-24)$$

Como no caso anterior, implementamos uma função que representa o Método dos Autovalores para a obtenção dos zeros e pesos da quadratura Gauss-Laguerre. Note que pela eq. (3-14) temos que $\beta_n = 2n + 1$ e $\gamma_n = n^2$. Na Tabela 3.2 mostramos os zeros e pesos para valores selecionados de n .

n = 5		n = 10		n = 15	
x_i	w_i	x_i	w_i	x_i	w_i
0.263560	0.521756E+00	0.137793	0.308441E+00	0.093308	0.218235E+00
1.413403	0.398667E+00	0.729455	0.401120E+00	0.492692	0.342210E+00
3.596426	0.759424E-01	1.808343	0.218068E+00	1.215595	0.263028E+00
7.085810	0.361176E-02	3.401434	0.620875E-01	2.269950	0.126426E+00
12.64080	0.233700E-05	5.552497	0.950152E-02	3.667623	0.402069E-01
-	-	8.330153	0.753008E-03	5.425337	0.856388E-02
-	-	11.84379	0.282592E-04	7.565916	0.121244E-02
-	-	16.27926	0.424931E-06	10.120228	0.111674E-03
-	-	21.99659	0.183956E-08	13.130282	0.645993E-05
-	-	29.92070	0.991183E-012	16.654407	0.222632E-06
-	-	-	-	20.776479	0.422743E-08
-	-	-	-	25.623894	0.392190E-10
-	-	-	-	31.407519	0.145652E-12
-	-	-	-	38.530683	0.148303E-15
-	-	-	-	48.026086	0.148303E-19

Tabela 3.2: Zeros e pesos para quadratura de Gauss-Laguerre

Encerremos esta seção com a quadratura de Gauss-Hermite. Esta qua-

dratura pode ser escrita como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-x^2) dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) + R_n, \quad (3-25)$$

onde

$$R_n = \frac{n! \sqrt{\pi}}{2^n [(2n)!]} f^{2n}(\xi), \quad (3-26)$$

para algum ξ finito. Assim a fórmula é precisa se a função $f(x)$ tem um ordem menor que $2n$. Por outro lado, as coordenadas x_i são os zeros dos polinômios de Hermite $H_n(x)$, e os pesos são dados pela equação:

$$\omega_i = \frac{2^{n-1} n! \sqrt{\pi}}{n^2 [H_{n-1}(x_i)]^2}. \quad (3-27)$$

A Tabela 3.3 mostra os zeros e pesos que aparecem na eq. (3-25) selecionando vários valores de n .

n = 5		n = 10		n = 15	
x_i	w_i	x_i	w_i	x_i	w_i
-2.020183	0.199532E-01	-3.436159	0.764043E-05	-4.499991	0.152248E-08
-0.958572	0.393619E+00	-2.532732	0.134365E-02	-3.669950	0.105912E-06
0.000000	0.945309E+00	-1.756684	0.338744E-01	-2.967167	0.100000E-03
0.958572	0.393619E+00	-1.036611	0.240138E+00	-2.325732	0.277807E-02
2.020183	0.199532E-01	-0.342901	0.610863E+00	-1.719993	0.307800E-01
-	-	0.342901	0.610863E+00	-1.136116	0.158489E+00
-	-	1.036611	0.240138E+00	-0.565070	0.412027E+00
-	-	1.756684	0.338744E-01	0.000000	0.564100E+00
-	-	2.532732	0.134365E-02	0.565070	0.412029E+00
-	-	3.436159	0.764043E-05	1.136116	0.158489E+00
-	-	-	-	1.719996	0.307800E-01
-	-	-	-	2.325732	0.277807E-02
-	-	-	-	2.967167	0.100004E-03
-	-	-	-	3.669950	0.105912E-05
-	-	-	-	4.499991	0.152248E-08

Tabela 3.3: Zeros e pesos para quadratura de Gauss-Hermite Físicos

Em algumas aplicações é utilizado a família de polinômios de Hermite probabilísticos He_n . Portanto, a quadratura usada na eq. (3-25) não coincide com a medida positiva no correspondente espaço de Hilbert. Ou seja, para o caso dos polinômios de Hermite probabilísticos a quadratura Gaussiana na qual estamos interessados pode ser expressado como

$$I(f) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) dy. \quad (3-28)$$

Logo, para conseguir interpretar os resultados anteriores, fazemos a seguinte mudança de variável $y = \sqrt{2}x$ de forma tal que transformamos a eq. (3-28) em:

$$I(f) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\sqrt{2}x) \exp(-x^2) dx. \quad (3-29)$$

Conseqüentemente, usando a quadratura de Hermite física à integral anterior obtemos uma aproximação do tipo:

$$I(f) \approx \sum_{i=1}^n \omega'_i f(x'_i), \quad (3-30)$$

onde $\omega'_i \equiv \omega_i/\sqrt{\pi}$ e $x'_i \equiv \sqrt{2}x_i$. daí, a Tabela 3.4 mostra valores desses zeros e pesos para diferentes escolhas de n .

n = 5		n = 10		n = 15	
x_i	w_i	x_i	w_i	x_i	w_i
-2.856970	0.112574E-01	-4.859463	0.431065E-05	-6.363948	0.858965E-09
-0.355626	0.222076E+00	-3.581823	0.758071E-03	-5.190094	0.597542E-06
0.000000	0.533333E+00	-2.484326	0.191116E-01	-4.196208	0.564215E-04
1.355626	0.222076E+00	-1.465989	0.135484E+00	-3.289082	0.156736E-02
2.856970	0.112574E-01	-0.484936	0.344642E+00	-2.432437	0.173658E-01
-	-	0.484935	0.344642E+00	-1.606710	0.894178E-01
-	-	1.465989	0.135484E+00	-0.799129	0.232462E+00
-	-	2.484326	0.191116E-01	0.000000	0.318260E+00
-	-	3.581823	0.758071E-03	0.799129	0.232462E+00
-	-	4.859463	0.431065E-05	1.606710	0.894178E-01
-	-	-	-	2.432437	0.173658E-01
-	-	-	-	3.289082	0.156736E-02
-	-	-	-	4.196208	0.564215E-04
-	-	-	-	5.190094	0.597542E-06
-	-	-	-	6.363948	0.858965E-09

Tabela 3.4: Zeros e pesos para quadratura de Gauss-Hermite Probabilísticos

Além disso, no caso que estejamos trabalhando com variáveis aleatórias Lognormal podemos utilizar a quadratura de Gauss-Hermite. Por exemplo, fazendo a substituição:

$$z = \frac{\ln(x) - \mu}{\sqrt{2}\sigma},$$

obtemos a integral

$$I[f] = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\exp(\sqrt{2}\sigma z + \mu)) \exp(-z^2) dz,$$

que representa a quadratura de Gauss-Hermite para polinômios físicos.

Com o material apresentado nos capítulos 1 e 2, temos a ferramenta matemática necessária para desenvolver a técnica da Expansão de Caos Polinomial. Esse material é fundamental para alcançarmos nosso objetivo final, isto é, a propagação de incertezas em reservatórios de petróleo.