

Integração Numérica

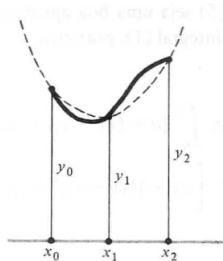
Márcio Antônio de Andrade Bortoloti

Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas - DCET
Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia - UESB

Cálculo Numérico
Curso de Física

Integração Numérica - Regra de Simpson

- A Regra de Simpson resulta da integração em $[a, b]$ do polinômio de Lagrange de grau dois.



- Considerando os pontos x_0, x_1, x_2 igualmente espaçados, o polinômio interpolante de Lagrange de grau dois é dado por

$$\begin{aligned} P_2(x) &= \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) \\ &+ \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) \\ &+ \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2) \end{aligned}$$

Portanto

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x) \, dx &= \int_{x_0}^{x_2} \left(\frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) \right. \\ &+ \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) \\ &+ \left. \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2) \right) dx \\ &+ \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)}{6} f^{(3)}(\xi(x)) \, dx\end{aligned}$$

Uma Estimativa mais precisa...

Suponha que f possa ser expandida em série de Taylor em torno de $x = x_1$.

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1) + \frac{f''(x_1)}{2}(x - x_1)^2 \\ &+ \frac{f'''(x_1)}{6}(x - x_1)^3 + \frac{f^{(iv)}(\xi(x))}{24}(x - x_1)^4, \end{aligned}$$

com

$$\xi(x) \in (x_0, x_2) \quad \text{e} \quad f \in \mathcal{C}^4(x_0, x_2).$$

Portanto

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_2} f(x) \, dx &= \int_{x_0}^{x_2} \left(f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1) + \frac{f''(x_1)}{2}(x - x_1)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{f'''(x_1)}{6}(x - x_1)^3 \right) dx + \int_{x_0}^{x_2} \frac{f^{(iv)}(\xi(x))}{24}(x - x_1)^4 \, dx, \\ &= f(x_1)(x_2 - x_0) + \frac{f'(x_1)}{2} \left((x_2 - x_1)^2 - (x_0 - x_1)^2 \right) \\ &\quad + \frac{f''(x_1)}{6} \left((x_2 - x_1)^3 - (x_0 - x_1)^3 \right) \\ &\quad + \frac{f'''(x_1)}{24} \left((x_2 - x_1)^4 - (x_0 - x_1)^4 \right) \\ &\quad + \int_{x_0}^{x_2} \frac{f^{(iv)}(\xi(x))}{24}(x - x_1)^4 \, dx\end{aligned}$$

Analizando o termo do “erro”...

O Teorema do Valor Médio para Integrais implica que existe um $\xi_1 \in (x_0, x_2)$ tal que

$$\int_{x_0}^{x_2} \frac{f^{(iv)}(\xi(x))}{24} (x - x_1)^4 dx = \frac{f^{(iv)}(\xi_1)}{24} \int_{x_0}^{x_2} (x - x_1)^4 dx$$

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_2} \frac{f^{(iv)}(\xi(x))}{24} (x - x_1)^4 dx = \frac{f^{(iv)}(\xi_1)}{120} (x - x_1)^5 \Big|_{x_0}^{x_2}}$$

Agora note que, $x_2 - x_1 = x_1 - x_0 = h$. Logo

$$(x_2 - x_1)^2 - (x_0 - x_1)^2 = (x_2 - x_1)^4 - (x_0 - x_1)^4 = 0$$

$$(x_2 - x_1)^3 - (x_0 - x_1)^3 = 2h^3$$

$$(x_2 - x_1)^5 - (x_0 - x_1)^5 = 2h^5$$

Segue que

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = 2hf(x_1) + h^3 \frac{f''(x_1)}{3} + h^5 \frac{f^{(iv)}(\xi_1)}{60}$$

Vamos analisar o termo associado à derivada de segunda ordem.

Integração Numérica - Regra de Simpson

De fato,

A expansão em Série de Taylor de f em torno de x_1 é dada por

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1) + \frac{f''(x_1)}{2}(x - x_1)^2 + \frac{f'''(x_1)}{6}(x - x_1)^3 \\ &\quad + \frac{f^{(iv)}(\zeta)}{24}(x - x_1)^4 \text{ para algum } \zeta \in (x_0, x_2) \end{aligned}$$

Logo, para $\xi_2, \xi_3 \in (x_0, x_2)$ temos

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x_1) + f'(x_1)h + \frac{1}{2}f''(x_1)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x_1)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(\xi_2)h^4 \\ f(x-h) &= f(x_1) - f'(x_1)h + \frac{1}{2}f''(x_1)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x_1)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}(\xi_3)h^4 \end{aligned}$$

$$\implies f(x_1+h) + f(x_1-h) = 2f(x_1) + f''(x_1)h^2 + \frac{1}{24}h^4 \left(f^{(iv)}(\xi_2) + f^{(iv)}(\xi_3) \right)$$

Integração Numérica - Regra de Simpson

De onde tem-se

$$f''(x_1) = \frac{1}{h^2} \left(f(x_1 + h) + f(x_1 - h) - 2f(x_1) \right) - \frac{1}{24} h^2 \left(f^{(iv)}(\xi_2) + f^{(iv)}(\xi_3) \right)$$
$$\implies f''(x_1) = \frac{1}{h^2} \left(f(x_2) + f(x_0) - 2f(x_1) \right) - \frac{1}{24} h^2 \left(f^{(iv)}(\xi_2) + f^{(iv)}(\xi_3) \right)$$

Assim

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_2} f(x) \, dx &= 2hf(x_1) + h^3 \frac{f''(x_1)}{3} + \frac{h^5}{60} f^{(iv)}(\xi_1) \\ &= 2hf(x_1) + \frac{h^3}{3} \left[\frac{1}{h^2} \left(f(x_2) + f(x_0) - 2f(x_1) \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{24} h^2 \left(f^{(iv)}(\xi_2) + f^{(iv)}(\xi_3) \right) \right] + \frac{h^5}{60} f^{(iv)}(\xi_1) \end{aligned}$$

Integração Numérica - Regra de Simpson

Logo

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_2} f(x) \, dx &= 2hf(x_1) + \frac{h}{3}f(x_0) - 2\frac{h}{3}f(x_1) + \frac{h}{3}f(x_2) \\ &+ h^5 \left(\frac{f^{(iv)}(\xi_1)}{60} - \frac{f^{(iv)}(\xi_2)}{24} - \frac{f^{(iv)}(\xi_3)}{24} \right)\end{aligned}$$

Existe $\xi \in (x_0, x_2)$ tal que

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) \, dx = \frac{h}{3} \left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \right) + h^5 \left(\frac{f^{(iv)}(\xi)}{60} - 2\frac{f^{(iv)}(\xi)}{24} \right)$$

$$\Rightarrow \boxed{\int_{x_0}^{x_2} f(x) \, dx = \frac{h}{3} \left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \right) - \frac{h^5}{90} f^{(iv)}(\xi)}$$

Portanto

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) \, dx \approx \frac{h}{3} \left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \right)$$

$$R(f) = -\frac{h^5}{90} f^{(iv)}(\xi)$$

Integração Numérica - Regra de Simpson Repetida

Considere uma partição $\mathcal{P} = \{x_0 = a < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b\}$ (n par) de $[a, b]$ com pontos igualmente espaçados.

$$\begin{aligned}\int_{a=x_0}^{b=x_n} f(x) \, dx &= \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} \int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x) \, dx \\ &= \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} \frac{h}{3} \left[f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2}) \right] - \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} \frac{h^5}{90} f^{(iv)}(\zeta_i)\end{aligned}$$

para $\zeta_i \in (x_{2i}, x_{2i+2})$.

Integração Numérica - Regra de Simpson Repetida

Analisando o termo do erro, temos

$$\sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} \frac{h^5}{90} f^{(iv)}(\zeta_i) = \frac{h^5}{90} f^{(iv)}(\zeta) \frac{n}{2}, \quad \zeta \in (x_0, x_n)$$

Como $\frac{b-a}{n/2} = h \implies n = \frac{2(b-a)}{h}$ temos

$$\sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} \frac{h^5}{90} f^{(iv)}(\zeta) = \frac{h^4(b-a)}{90} f^{(iv)}(\zeta)$$

Logo

$$\int_{a=x_0}^{b=x_n} f(x) dx = \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} \frac{h}{3} \left[f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2}) \right] - \frac{h^4(b-a)}{90} f^{(iv)}(\zeta),$$

para $\zeta \in (x_0, x_n)$.

Integração Numérica - Regra de Simpson Repetida

Assim,

$$\int_{a=x_0}^{b=x_n} f(x) \, dx \approx \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} \frac{h}{3} \left[f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2}) \right]$$

com

$$|E(f)| = \frac{h^4 |b-a|}{90} |f^{(iv)}(\zeta)| \leq h^4 \frac{|b-a|}{90} \max_{x \in [a,b]} |f^{(iv)}(x)|$$

Integração Numérica - Regra de Simpson Repetida

Análise erro na aproximação de $\int_0^1 e^x dx$ usando Regra do Trapézio e regra de Simpson.

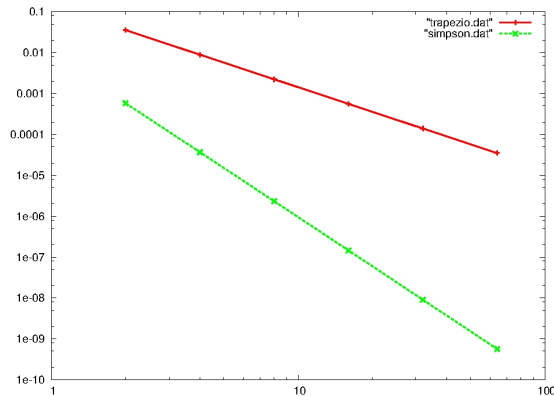


Figura: Trapézio \times Simpson