Integração Numérica

Introdução

- Vamos estudar métodos numéricos para calcular uma aproximação para a integral de uma função com uma variável real em um intervalo $[a, b]$.

- O problema consiste em encontrar

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

onde f é uma função contínua com derivadas contínuas em $[a, b]$.

- Importante, pois

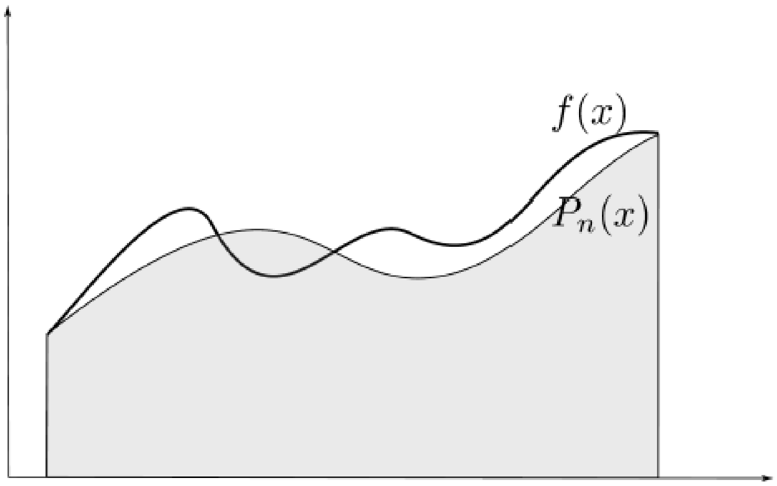
  - Nem sempre é possível determinar uma primitiva $F(x)$ tal que $F'(x) = f(x)$;
  - A primitiva pode ser complexa;
  - Em certos casos, apenas alguns valores de f são conhecidos.

Introdução

- A ideia básica da integração numérica é a substituição da função f por um polinômio que a aproxime no intervalo $[a, b]$.

- Desta forma,

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



Fórmulas Fechadas de Newton-Cotes

Fórmulas Fechadas de Newton-Cotes

- As **fórmulas fechadas de Newton-Cotes** consistem em aproximar $f(x)$ por polinômios interpoladores em pontos de $[a,b]$ igualmente espaçados $x_0, x_1, \dots, x_n$ e de modo que $x_0 = a$ e $x_n = b$.

- Considerando a partição do intervalo $[a,b]$ em n subintervalos de comprimento h, temos que:

$$h = \frac{b-a}{n} \Rightarrow x_i = x_0 + ih, \qquad i = 0,1,\dots,n$$

- Vamos utilizar a Forma de Lagrange para o polinômio interpolador.

- Veremos as seguintes fórmulas de Newton-Cotes:
    - Regra do Trapézio
    - Regra $1/3$ de Simpson

Regra do Trapézio

Regra do Trapézio

- Consideremos o intervalo $[a, b]$ tal que $x_0 = a$ e $x_n = b$.

- Seja $p_n(x)$ um polinômio que interpole a função $y = f(x)$ sobre $n + 1$ pontos. Pela fórmula de Lagrange, temos que:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \mathrm{L}_k(x) f(x_k)$$

- Portando a integral aproximada é dada por:

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

$$I \cong \int_a^b \sum_{k=0}^{n} \mathrm{L}_k(x) f(x_k)\, dx \cong \sum_{k=0}^{n} \left[\int_a^b \mathrm{L}_k(x) dx \right] f(x_k)$$

- Na Regra do Trapézio considera-se o polinômio $p_1(x)$ que interpola $f(x)$ em x_0 e x_1.

$$I_T = \sum_{k=0}^{1} \left[\int_a^b \mathrm{L}_k(x)dx \right] f(x_k)$$

$$I_T = \int_{x_0}^{x_1} \mathrm{L}_0(x) f(x_0)dx + \int_{x_0}^{x_1} \mathrm{L}_1(x) f(x_1)dx$$

$$I_T = \int_{x_0}^{x_1} \frac{(x-x_1)}{(x_0-x_1)} f(x_0)dx + \int_{x_0}^{x_1} \frac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)} f(x_1)dx$$

- Para fazer a integração consideremos os pontos igualmente espaçados de h e a variável auxiliar u:

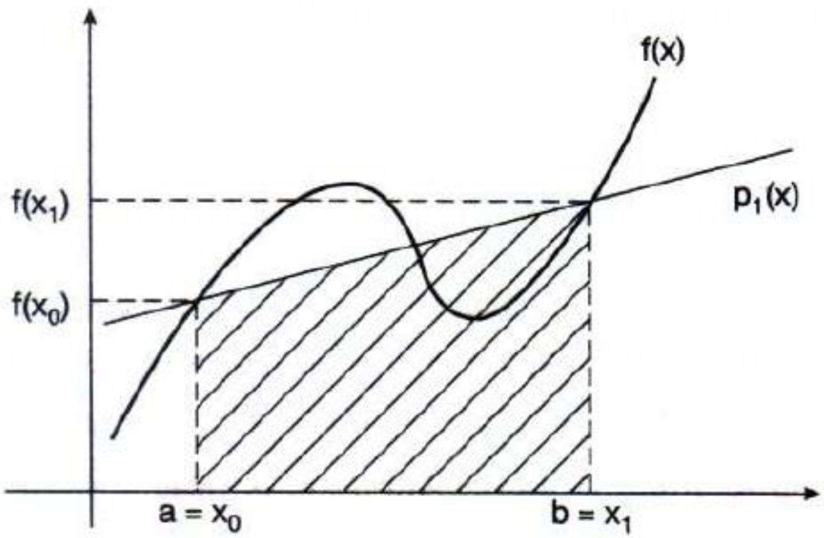
$$u = \frac{(x-x_0)}{h} \quad \Rightarrow \quad dx = h\, du$$

$$x_0 \le x \le x_1 \quad \Rightarrow \quad 0 \le u \le n = 1$$

$$I_T = \int_0^1 \frac{u-1}{0-1} f(x_0)h \; du + \int_0^1 \frac{u-0}{1-0} f(x_1)h \; du$$

$$I_T = \int_0^1 (1-u) f(x_0)h \; du + \int_0^1 u \; f(x_1)h \; du$$

$$\boxed{I_T = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right]}$$



Esta equação representa a área do trapézio de altura h e bases $f(x_0)$ e $f(x_1)$.

Estimativa para o Erro da Regra do Trapézio

$$|E_T| \leq \frac{h^3}{12} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

ou

$$|E_T| \leq \frac{(b-a)^3}{12} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

Exemplo 1:

a) Calcular $\int_1^7 \frac{1}{x^2}\,dx$ utilizando a Regra do Trapézio.

b) Calcular uma estimativa para o erro.

Resolução: Utilizando a Equação de I_T O polinômio de grau 1 (m=1) que passa pelos pontos com abscissas $a = x_0 = 1$ e $b = x_1 = 7$, assim, $h = (7-1)/1 = 6$, logo temos:

$$I_T = \frac{6}{2}\left(\frac{1}{1^2} + \frac{1}{7^2}\right) = 3.0612245$$

Calculando a estimativa para o erro, teremos: $|E_T| \le \frac{6^3}{12} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$

Como a derivada segunda de $f(x)$ é $f''(x) = 6x^{-4}$ $\longrightarrow$

x	$\|f''(x)\|$
1	6
2	0.375
3	0.074074
4	0.023438
5	0.0096
6	0.00463
7	0.002499

logo

$$|E_T| \le \frac{6^3}{12} \times 6 = 108$$

Erro muito grande!!

Exemplo 2: Calcular $\int_1^9 \sqrt{6x-5}\,dx$ usando a Regra do Trapézio.

Determine uma estimativa para o erro deste procedimento.

Solução:

Nesse caso temos $x_0=1$ e $x_1=9$, portanto $h=(9-1)/1=8$

Então a integral aproximada pelo método do trapézio será: $I_T=\frac{8}{2}\left(\sqrt{6\times1-5}+\sqrt{6\times9-5}\right)=32$

Calculando a estimativa para o erro, teremos: $|E_T|\le\frac{8^3}{12}\max\limits_{x\in[a,b]}|f''(x)|$

Como a derivada segunda de $f(x)$ é $f''(x)=-9(6x-5)^{-3/2}$ $\longrightarrow$

x	$f''(x)$	$\lvert f''(x)\rvert$
1	-9	9
2	-0.48298	0.482977
3	-0.18601	0.186006
4	-0.10434	0.104335
5	-0.0636	0.0636
6	-0.04607	0.046072
7	-0.02999	0.029994
8	-0.01596	0.015959
9	-0.01312	0.01312

O valor máximo de $|f''(x)|=9$ ocorre quando $x=1$.

logo

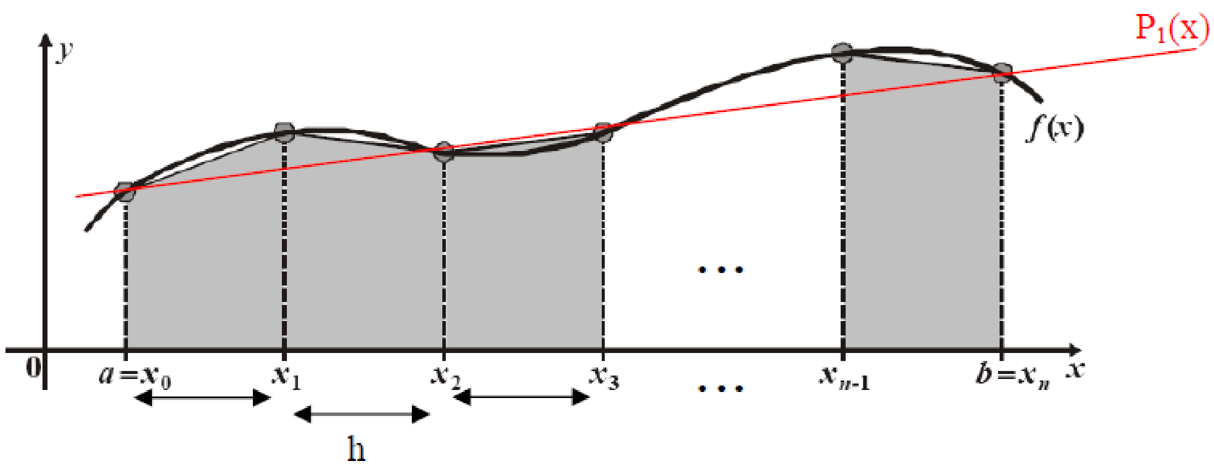
$$|E_T|\le\frac{8^3}{12}\times9=384$$

Erro muito grande!!

Regra do Trapézio Repetida

Regra do Trapézio Repetida

A regra do trapézio é uma aproximação um pouco grosseira para o valor da integral o que pode ser verificado tanto graficamente quanto pela expressão do erro. Contudo, se aplicarmos dentro de um certo intervalo [a,b] a regra do trapézio repetidas vezes a aproximação será melhor conforme podemos observar na figura abaixo.



Dividindo o intervalo [a,b] em subdivisões iguais de largura $\boldsymbol{h = x_{i+1} - x_i}$, i = 0, 1, 2, 3, ...n

ou ainda, $h = \dfrac{b-a}{n}$, com n sendo o número de subdivisões do intervalo $[a, b]$.

Os valores de cada um dos pontos x_i das subdivisões podem ser obtidas a partir da expressão:

$$x_i = x_0 + i \times h$$

Dessa forma podemos escrever a integral de f(x) como sendo a soma das áreas dos n trapézios pequenos contidos dentro do intervalo [a,b] como é mostrado na figura acima.

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_1 + A_2 + A_3 + \ldots + A_n \text{ tal que } A_i = \text{área do trapézio } i \text{, com } i = 1,2,\ldots,n\,.$$

$$A_i = \frac{h}{2}[f(x_{i-1}) + f(x_i)]$$

Logo, o valor numérico da integral calculada segundo a regra do trapézio repetida será:

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_n) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)] = I_{TR}}$$

Estimativa do Erro para a Regra do Trapézio Repetida

$$|E_{TR}| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

n sendo o número de subdivisões do intervalo $[a,b]$

Comparando com a regra do trapézio!

$$|E_T| \leq \frac{(b-a)^3}{12} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

$$E_{TR} = \frac{E_T}{n^2}$$

Observação: Se quisermos saber quantas subdivisões são necessárias para atingir uma certa precisão dada, fazemos o seguinte cálculo:

$$n > \sqrt{\frac{(b-a)^3}{12|E_{TR}|} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|} \qquad (n \text{ inteiro})$$

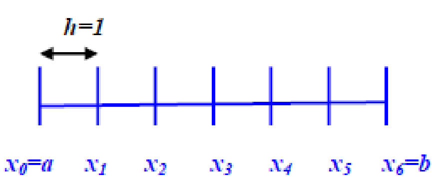
Exemplo 3:

A) Calcule o valor numérico da integral do exemplo 1, $\int_1^7 \frac{1}{x^2}dx$, usando a regra do trapézio repetida considerando 6 subdivisões.
B) Calcule, em seguida, uma estimativa para o erro usando a regra do trapézio repetida.
C) Quantas subdivisões deveríamos fazer para que o erro neste processo fosse menor do que 0,001 = 10^{-3}?

Solução:
Inicialmente calculamos a largura de cada subdivisão, ou seja, o valor de $h = \frac{b-a}{n} = \frac{7-1}{6} = \frac{6}{6} = 1$

Agora encontramos o valor de cada subdivisão.

A fórmula geral para encontrar o valor de cada subdivisão é $\boxed{x_i = x_{i-1} + h = x_0 + i\,h}$
Nesse caso temos 6 subdivisões igualmente espaçados por h.



$x_0 = 1;\ x_1=2;\ x_2=3;\ x_3=4;\ x_4=5;\ x_5=6;\ x_6=7$

O valor numérico da integral calculada segundo a regra do trapézio repetida será:

$$I_{TR} = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_n) + 2\cdot\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right] = \frac{h}{2}\left[\frac{1}{x_0^{\,2}} + \frac{1}{x_6^{\,2}} + 2\left(\frac{1}{x_1^{\,2}} + \frac{1}{x_2^{\,2}} + \frac{1}{x_3^{\,2}} + \frac{1}{x_4^{\,2}} + \frac{1}{x_5^{\,2}}\right)\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{1^2} + \frac{1}{7^2} + 2\left(\frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{4^2} + \frac{1}{5^2} + \frac{1}{6^2}\right)\right] = 1{,}00159$$

Para estimarmos o erro do processo temos que calcular o valor maximo de $|f''(x)|$ dentro do intervalo [a,b]. Como $f(x)=1/x^2 = x^{-2} \rightarrow f'(x) = -2x^{-3} \rightarrow f''(x) = 6x^{-4} \rightarrow |f''(x)| = 6x^{-4}$

Jogado valores de x dentro do intervalo [a,b] para $|f''(x)|$ encontramos o valor máximo igual a 6 (ver tabela ao lado)

x	$\|f''(x)\|$
1	6
2	0.375
3	0.074074
4	0.023438
5	0.0096
6	0.00463

Dessa forma o erro nesse caso será:

$$|E_{TR}| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| = \frac{(7-1)^3}{12\times 6^2}\times 6 = 3$$

O número de subdivisões para que o erro fosse menor do que 0,001 = 10^{-3} pode ser obtido por:

$$n > \sqrt{\frac{(b-a)^3}{12|E_{TR}|}\max_{x\in[a,b]}|f''(x)|} = \sqrt{\frac{(7-1)^3}{12\times 10^{-3}}\times 6} = 328.63 \longrightarrow \mathbf{n=329}$$

Lembre que n é um numero inteiro!

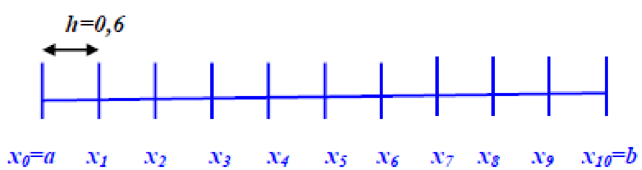
Exemplo 4:

A) Calcule o valor numérico da integral do exemplo 1, $\int_1^7 \frac{1}{x^2}dx$, usando a regra do trapézio repetida considerando 10 subdivisões.
B) Calcule, em seguida, uma estimativa para o erro usando a regra do trapézio repetida.

Solução:
Nesse caso temos que n=10.
Inicialmente calculamos a largura de cada subdivisão, ou seja, o valor de $h = \frac{b-a}{n} = \frac{7-1}{10} = \frac{6}{10} = 0{,}6$

Agora encontramos o valor de cada subdivisão.

A fórmula geral para encontrar o valor de cada subdivisão é $\boxed{x_i = x_{i-1} + h = x_0 + i\,h}$
Nesse caso temos 10 subdivisões igualmente espaçados por h.



$x_0 = 1$; $x_1=1{,}6$; $x_2=2{,}2$; $x_3=2{,}8$; $x_4=3{,}4$; $x_5=4$; $x_6=4{,}6$; $x_7=5{,}2$; $x_8=5{,}8$; $x_9=6{,}4$; $x_{10}=7$

O valor numérico da integral calculada segundo a regra do trapézio repetida será:

$$_{TR}= \frac{h}{2}\left[f(x_0)+f(x_n)+2\cdot\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)\right] = \frac{h}{2}\left[\frac{1}{x_0^{\,2}}+\frac{1}{x_{10}^{\,2}}+2\left(\frac{1}{x_1^{\,2}}+\frac{1}{x_2^{\,2}}+\frac{1}{x_3^{\,2}}+\frac{1}{x_4^{\,2}}+\frac{1}{x_5^{\,2}}+\frac{1}{x_6^{\,2}}+\frac{1}{x_7^{\,2}}+\frac{1}{x_8^{\,2}}+\frac{1}{x_9^{\,2}}\right)\right]$$

$$=0,3\left[\frac{1}{1^2}+\frac{1}{7^2}+2\left(\frac{1}{1,6^2}+\frac{1}{2,2^2}+\frac{1}{2,8^2}+\frac{1}{3,4^2}+\frac{1}{4^2}+\frac{1}{4,6^2}+\frac{1}{5,2^2}+\frac{1}{5,8^2}+\frac{1}{6,4^2}\right)\right]=0,9134$$

Para estimarmos o erro do processo temos que calcular o valor máximo de $|f''(x)|$ dentro do intervalo [a,b]. Como $f(x)=1/x^2=x^{-2} \rightarrow f'(x)=-2x^{-3} \rightarrow f''(x)=6x^{-4} \rightarrow |f''(x)|=6x^{-4}$

Jogado valores de x dentro do intervalo [a,b] para $|f''(x)|$ encontramos o valor máximo igual a 6 (ver tabela ao lado)

x	*|f''(x)|*
1	6
2	0.375
3	0.074074
4	0.023438
5	0.0096
6	0.00463

Dessa forma o erro nesse caso será:

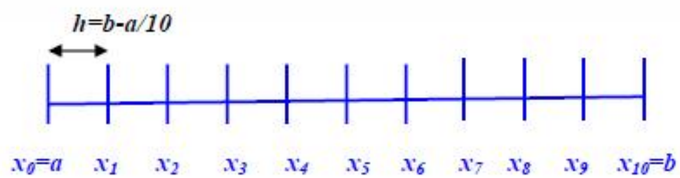
$$|E_{TR}| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2}\max_{x\in[a,b]}|f''(x)| = \frac{(7-1)^3}{12\times 10^2}\times 6 = 1,08$$

Exemplo 5:

Seja $I = \int_0^1 e^x \, dx$

a) Calcule uma aproximação para I usando 10 subintervalos e a regra dos Trapézios repetida. Estime o erro cometido.

b) Qual o número mínimo de subdivisões de modo que o erro seja inferior a 10^{-3}?



Solução:

(*a*) Os pontos $x_i = 0.1i$, $i = 0, 1, ..., 10$ dividirão o intervalo [0, 1] em subintervalos com h = 0.1. Aplicando a regra dos Trapézios repetida, teremos

$$\int_0^1 e^x \, dx \approx \frac{0.1}{2} \Big(\underset{f(x_0)}{e^0} + \underbrace{2e^{0.1} + 2e^{0.2} + \ldots + 2e^{0.7} + 2e^{0.8} + 2e^{0.9}}_{2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)} + \underset{f(x_n)}{e} \Big) = 1.719713$$

Calculando a estimativa para o erro, teremos: $\left|E_{TR}\right| \leq \dfrac{(b-a)^3}{12n^2} \max\limits_{x\in[a,b]}\left|f''(x)\right| = \dfrac{(1-0)^3}{12\times 10^2} \max\limits_{x\in[a,b]}\left|f''(x)\right|$

Como a derivada segunda de *f(x)* é $f''(x) = e^x$ →

x	| f''(x)|
0	1
0.1	1.105171
0.2	1.221403
0.3	1.349859
0.4	1.491825
0.5	1.648721
0.6	1.822119
0.7	2.013753
0.8	2.225541
0.9	2.459603
1	2.718282

O valor máximo de $|f''(x)| = 2.7182$ ocorre quando $x=1$.

logo

$$\left|E_{TR}\right| \leq \frac{1}{1200} \times 2.7182 \approx 0.00227$$

Erro bem pequeno!!

b) $$\left|E_{TR}\right| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} \max_{x\in[a,b]}\left|f''(x)\right| = 10^{-3}$$

Logo

$$n > \sqrt{\frac{(b-a)^3}{12\times E_{TR}} \max_{x\in[a,b]}\left|f''(x)\right|} = \sqrt{\frac{(1-0)^3}{12\times 10^{-3}} 2.7182} = 15.0504706$$

Lembrando que *n* é um numero inteiro, devemos ter n = 16 subintervalos dentro de [0,1] para que o erro seja menor que 10^{-3}.

Exercícios:

(1) Considere a integral $\int_{1}^{9} \sqrt{6x-5}\, dx$.

a) Calcule essa integral usando a Regra do Trapézio Repetida com 8 subdivisões.

b) Determine uma estimativa para o erro.

c) Quantas subdivisões devemos ter para que o erro seja menor do que 10^{-4}?

Respostas: a) 37.8181, b) 6, c) 1960

(2) Considere a integral $\int_2^8 5x^3 + \frac{1}{x}\, dx$.

a) Calcule essa integral usando a Regra do Trapézio Repetida com 6 subdivisões.

b) Determine uma estimativa para o erro.

c) Quantas subdivisões devemos ter para que o erro seja menor do que 10^{-3}?

Respostas: a) 5176.4054, b) 120.0019, c) 2079

(3) Considere a integral $\int_0^{\pi} sen\, x + x\, dx$.

a) Calcule essa integral usando a Regra do Trapézio Repetida com 6 subdivisões.

b) Determine uma estimativa para o erro.

c) Quantas subdivisões devemos ter para que o erro seja menor do que 10^{-6}?

Respostas: a) 6.8888, b) 0.0717, c) 1608

Regra 1/3 de Simpson

Regra 1/3 de Simpson

- Aproximando $f(x)$ por um polinômio interpolador $P_2(x)$, então

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \int_{x_0}^{x_2} P_2(x)\mathrm{d}x$$

- A Forma de Lagrange do Polinômio interpolador é dada por

$$P_2(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + f(x_2)L_2(x)$$

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

$$L_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

$$L_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

- Assim,

$$\int_{x_0}^{x_2} P_2(x)\mathrm{d}x = f(x_0)\int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\mathrm{d}x + f(x_1)\int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\mathrm{d}x + f(x_2)\int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

- Sabe-se que $x_1 = x_0 + h$ e $x_2 = x_0 + 2h$

- Cada integral da soma é então determinada trocando

$$x = x_0 + zh; \quad z \in [0;2]$$
$$\mathrm{d}x = h\mathrm{d}z$$

$$
\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\mathrm{d}x &= \int_0^2 \frac{(x_0+zh-x_0-h)(x_0+zh-x_0-2h)}{(-h)(-2h)}h\mathrm{d}z \\
&= \int_0^2 \frac{(zh-h)(zh-2h)}{2h}\mathrm{d}z \\
&= \frac{h^2}{2h}\int_0^2 (z-1)(z-2)\mathrm{d}z \\
&= \frac{h}{2}\int_0^2 (z^2-3z+2)\mathrm{d}z \\
&= \frac{h}{2}\left(\frac{z^3}{3}-\frac{3z^2}{2}+2z\right)\Bigg|_0^2 \\
&= \frac{h}{2}\left(\frac{(2)^3}{3}-\frac{3(2)^2}{2}+2(2)\right) \\
&= \frac{h}{6}(8-18+12) = \frac{h}{3}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\mathrm{d}x &= \int_0^2 \frac{(x_0+zh-x_0)(x_0+zh-x_0-2h)}{(h)(-h)}h\mathrm{d}z \\
&= \int_0^2 \frac{(zh)(zh-2h)}{-h}\mathrm{d}z \\
&= \frac{h^2}{-h}\int_0^2 z(z-2)\mathrm{d}z \\
&= -h\left(\frac{z^3}{3}-\frac{2z^2}{2}\right)\Bigg|_0^2 \\
&= -h\left(\frac{(2)^3}{3}-(2)^2\right) \\
&= \frac{-h}{3}(8-12) \\
&= \frac{4h}{3}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\mathrm{d}x &= \int_0^2 \frac{(x_0+zh-x_0)(x_0+zh-x_0-h)}{(2h)(h)}h\mathrm{d}z \\
&= \int_0^2 \frac{(zh)(zh-h)}{2h}\mathrm{d}z \\
&= \frac{h^2}{2h}\int_0^2 z(z-1)\mathrm{d}z \\
&= \frac{h}{2}\left(\frac{z^3}{3}-\frac{z^2}{2}\right)\Bigg|_0^2 \\
&= \frac{h}{2}\left(\frac{(2)^3}{3}-\frac{(2)^2}{2}\right) \\
&= \frac{h}{12}(16-12) \\
&= \frac{h}{3}
\end{aligned}
$$

- Sendo

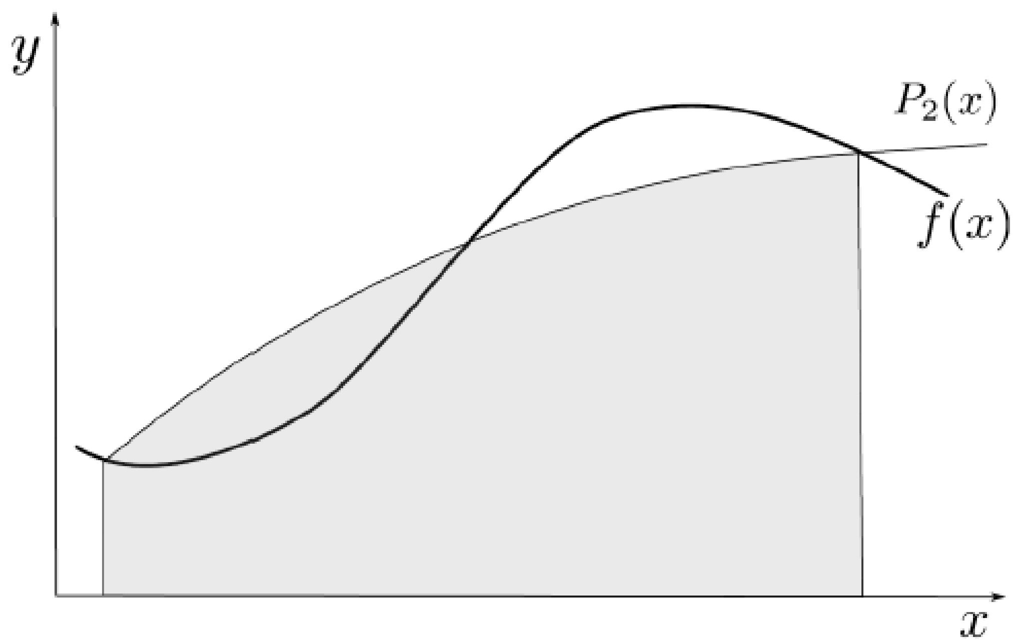
$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_2} P_2(x)\mathrm{d}x = & f(x_0)\int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\mathrm{d}x + \\ & f(x_1)\int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\mathrm{d}x + \\ & f(x_2)\int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\end{aligned}$$

- Obtém-se então

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_2} P_2(x)\mathrm{d}x &= f(x_0)\frac{h}{3} + f(x_1)\frac{4h}{3} + f(x_2)\frac{h}{3} \\ &= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]\end{aligned}$$

Portanto, a Regra 1/3 de Simpson é dada por:

$$\boxed{I_S = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]}$$



Estimativa para o Erro da Regra 1/3 de Simpson

$$\boxed{|E_S| = \frac{h^5}{90} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|}$$

Considerando $h = \dfrac{b-a}{2} \Rightarrow h^5 = \dfrac{(b-a)^5}{32}$, tem-se:

$$\boxed{|E_S| \leq \frac{(b-a)^5}{2880} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|}.$$

Exemplo 6:

a) Calcular $\int_1^7 \frac{1}{x^2}\,dx$ utilizando a Regra 1/3 de Simpson.

b) Calcular uma estimativa para o erro.

Solução:
Temos nesse caso 3 pontos a considerar dentro do intervalo [a,b]=[1,7], são eles: $x_0=1$ e $x_1=(1+7)/2=4$ e $x_2=7$

Como agora temos $n=2$ subdivisões dentro do intervalo [a,b] teremos $h= (b-a)/2 = (7-1)/2 = 3$

O valor numérico da integral será:

$$I_s = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right] = \frac{3}{3}\left[\frac{1}{1^2} + 4\frac{1}{4^2} + \frac{1}{7^2}\right] = 1.27$$

Calculando a estimativa para o erro, teremos: $|E_{1/3S}| \leq \dfrac{(7-1)^5}{2880} \max_{x\in[a,b]} \left|f^{(4)}(x)\right|$

Derivando *f(x)* temos

$$f'(x) = -2x^{-3}$$

$$f''(x) = 6x^{-4}$$

$$f^{(3)}(x) = -24x^{-5}$$

$$f^{(4)}(x) = 120x^{-6} \longrightarrow$$

x	$\left\|f^{(4)}(x)\right\|$
1	120
2	1.875
3	0.164609
4	0.029297
5	0.00768
6	0.002572
7	0.00102

logo

$$|E_{1/3S}| \leq \frac{6^5}{2880} \times 120 = 324$$

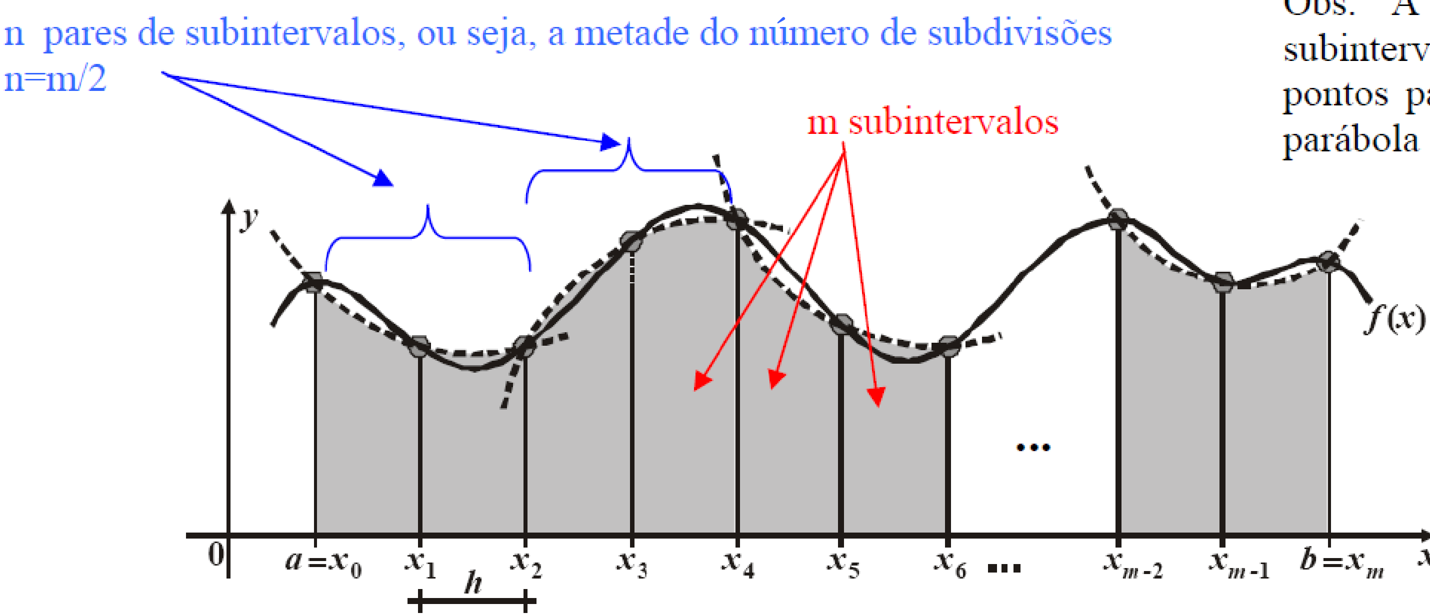
Erro grande!!

Regra 1/3 Simpson Repetida

Regra 1/3 de Simpson Repetida

Vamos repetir o procedimento anterior para n pares de subintervalos. Desse modo, seja $m = 2n$ o número de subintervalos.

Obs. A cada par de subintervalos temos 3 pontos para ajustar uma parábola ($P_2(x)$)



Consideremos que os pontos $x_0, x_1, \dots, x_m$ são igualmente espaçados, de modo que:

$$h = \frac{b-a}{m}, \text{ com } m = 2n \ (m \text{ é par}).$$

Aplicando a Regra 1/3 de Simpson nos pares de subintervalos de $[a, b] = [x_0, x_m]$, obtemos:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_m} f(x)dx$$

$$\approx \frac{h}{3}[y_0 + 4y_1 + y_2] + \frac{h}{3}[y_2 + 4y_3 + y_4] + \ldots + \frac{h}{3}[y_{m-2} + 4y_{m-1} + y_m]$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}[y_0 + y_m + 2(y_2 + y_4 + \ldots + y_{m-2}) + 4(y_1 + y_3 + \ldots + y_{m-1})]$$

Logo, a Regra 1/3 de Simpson Repetida é dada por:

Valor da função nos subintervalos de índices IMPARES dentro do intervalo [a,b], excluindo as extremidades.

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + f(x_m) + 2\sum_{i=1}^{\frac{m}{2}-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} f(x_{2i-1}) \right] = I_{SR}$$

Valor da função nas extremidades inicial e final do intervalo ou seja nos pontos a e b.

Valor da função nos subintervalos de índices PARES dentro do intervalo [a,b], excluindo as extremidades.

Estimativa para o Erro da Regra 1/3 de Simpson Repetida

$$\boxed{|E_{SR}| \leq n \cdot \frac{h^5}{90} \cdot \max_{x\in[a,b]} |f^4(x)|}$$

Considerando $h = \dfrac{b-a}{m} \Rightarrow h^5 = \dfrac{(b-a)^5}{32n^5}$, tem-se:

$$\boxed{|E_{SR}| \leq \frac{(b-a)^5}{2880n^4} \cdot \max_{x\in[a,b]} |f^4(x)|}$$

***n=m/2* é a metade de subdivisões do intervalo [a,b]**

Comparando com a regra 1/3 de Simpson!

$$\boxed{|E_S| \leq \frac{(b-a)^5}{2880} \cdot \max_{x\in[a,b]} |f^4(x)|}.$$

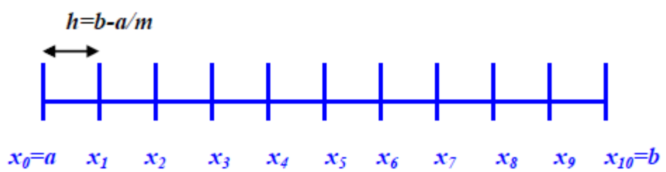
$$E_{SR} = \frac{E_S}{n^4}$$

Observação: O total de subintervalos para a aplicação da Regra 1/3 de Simpson Repetida deve ser par.

Exemplo 7: Calcular $\int_1^7 \frac{1}{x^2}\,dx$ utilizando a Regra 1/3 de Simpson Repetida considerando 10 subdivisões do intervalo e dar uma estimativa para o erro.

Obs.: *m* vai ser sempre um número par.

Resolução:
Temos nesse ***m=2n* = *10* subdivisões** dentro o intervalo $[a,b]=[x_0,x_m]=[1,7]$, portanto, temos que considerar 11 pontos igualmente espaçados por $h=(b-a)/2n=(7-1)/10=0,6$. São eles:



$x_0= 1;\ \ x_1=1,6;\ x_2=2,2;\ x_3=2,8;\ x_4=3,4;\ x_5=4;\ x_6=4,6;\ x_7=5,2;\ x_8=5,8;\ x_9=6,4;\ x_{10}=7$

O valor numérico da integral será:

$$I_{SR} = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + f(x_m) + 2\sum_{i=1}^{\frac{m}{2}-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} f(x_{2i-1}) \right]$$

Temos que:

$m = 10 \rightarrow \frac{10}{2} - 1 = 4$

Valor da função nos subintervalos de índices PARES dentro do intervalo [a,b], excluindo as extremidades.

$$\sum_{i=1}^{\frac{m}{2}-1} f(x_{2i}) = f(x_2) + f(x_4) + f(x_6) + f(x_8) = \frac{1}{2{,}2^2} + \frac{1}{3{,}4^2} + \frac{1}{4{,}6^2} + \frac{1}{5{,}8^2} = 0{,}3701$$

$m = 10 \rightarrow \frac{10}{2} = 5$

Valor da função nos subintervalos de índices IMPARES dentro do intervalo [a,b], excluindo as extremidades.

$$\sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} f(x_{2i-1}) = f(x_1) + f(x_3) + f(x_5) + f(x_7) + f(x_9) = \frac{1}{1{,}6^2} + \frac{1}{2{,}8^2} + \frac{1}{4^2} + \frac{1}{5{,}2^2} + \frac{1}{6{,}4^2} = 0{,}642$$

Logo

$$I_{SR} = \frac{0.6}{3}\left[\frac{1}{1^2} + \frac{1}{7^2} + 2 \times 0.3701 + 4 \times 0.6420\right] \approx 0{,}8657$$

Calculando a estimativa para o erro, teremos: $|E_{SR}| \le \dfrac{(7-1)^5}{2880n^4} \max\limits_{x\in[a,b]} |f^4(x)|$

Derivando *f(x)* temos

$$f'(x) = -2x^{-3}$$
$$f''(x) = 6x^{-4}$$
$$f^3(x) = -24x^{-5}$$
$$f^4(x) = 120x^{-6}$$

x	$\|f^4(x)\|$
1	120
2	1.875
3	0.164609
4	0.029297
5	0.00768
6	0.002572
7	0.00102

logo

$$|E_{SR}| \le \frac{6^5}{2880 \times 5^4} \times 120 = 0{,}5184$$

Erro pequeno!!

Exercícios:

(1) Considere a integral $\int_0^1 e^x \, dx$.

a) Calcule essa integral usando a Regra 1/3 de Simpson Repetida com 10 subdivisões.

b) Determine uma estimativa para o erro.

c) Quantas subdivisões devemos ter para que o erro seja menor do que 10^{-3}?

R: a) 1.718, b) 1.51×10^{-6}, c) $m = 2$

(2) Seja a integral $I = \int_0^{0.6} e^{5x} + x^2 \, dx$.

a) Calcule o valor aproximado de I pela Regra 1/3 de Simpson Repetida usando 4 e 6 subintervalos. Compare os valores encontrados.

b) Quantas subdivisões devemos ter para que o erro seja menor do que 10^{-9} utilizando a Regra 1/3 de Simpson Repetida?

R: a) 3.8953 e 3.8903   b) 272

(3) Seja a integral $I = \int_8^{13} 3xe^{2x} \, dx$.

a) Calcule o valor de I com 8 subintervalos na Regra do Trapézio Repetida e na Regra 1/3 de Simpson Repetida.

b) Qual dos dois métodos numéricos possui uma menor estimativa para o erro?

(4) Calcule as integrais a seguir usando as regras do Trapézio e de 1/3 de Simpson Repetidas com $m = 4$ subintervalos de $[a, b]$.

(a) $\int_1^2 e^x dx$ ($I_{trapezio} = 4,69508$; $I_{Simpson} = 4,67092$)

(b) $\int_1^4 \sqrt{x} dx$ ($I_{trapezio} = 4,6551$; $I_{Simpson} = 4,6663$)

(c) $\int_2^{14} \frac{1}{\sqrt{x}} dx$ ($I_{trapezio} = 4,7684$; $I_{Simpson} = 4,6764$)

(5) Fazer a implementação no Scilab das Regras do Trapézio e de 1/3 de Simpson Repetidas. (Apresentar o print das telas.)

Observações:

i) Das expressões obtidas para o erro na regra dos Trapézios e na de Simpson, concluímos que a regra dos Trapézios integra sem erro polinômios de grau $n \leqslant 1$ e a de Simpson polinômios de grau $n \leqslant 3$.

ii) As demais fórmulas de integração numérica, do tipo fórmulas fechadas de Newton-Cotes, são deduzidas de maneira análoga trabalhando com polinômios de grau $n = 3$, $n = 4$ etc.

Introdução à Quadratura Gaussiana

Quadratura Gaussiana

- Vimos que, de maneira geral, uma fórmula fechada de Newton-Cotes que aproxima $f(x)$ por seu polinômio interpolador em $x_0, x_1, \dots, x_n$ é exata para polinômios de grau $\leq n$.

- É possível deduzir outras fórmulas com o mesmo formato que as de Newton-Cotes, isto é,

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx A_0 f(x_0) + \dots + A_n f(x_n)$$

onde $x_0, x_1, \dots, x_n$ são $n+1$ pontos distintos e que são exatas para polinômios de grau $\leq 2n+1$.

- Tais fórmulas são conhecidas como **Quadratura Gaussiana**.

Nas fórmulas de Newton-Cotes, os pontos $x_0, \ldots, x_n$ sobre os quais são construídos os polinômios $L_k(x)$ são pontos igualmente espaçados, prefixados em [a, b]. Na Quadratura Gaussiana deixamos $x_0, x_1, \ldots, x_n$ indeterminados e assim conseguimos fórmulas do mesmo tipo:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx A_0 f(x_0) + \ldots + A_n f(x_n), \text{ onde}$$

$$A_k = \int_a^b L_k(x)\,dx \text{ e que são exatas para polinômios de grau } \leqslant 2n+1.$$

Veremos a seguir a construção da fórmula da Quadratura Gaussiana para $n = 1$, ou seja, queremos determinar x_0, x_1, A_0 e A_1, tais que

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) \text{ seja exata para polinômios de grau } \leqslant 3.$$

Para simplicidade de cálculos, determinaremos esta fórmula considerando $[a, b] = [-1, 1]$.

Dizer que a fórmula é exata para polinômios de grau ≤ 3 equivale a dizer que a fórmula é exata para

$g_0(t) \equiv 1$, $g_1(t) = t$, $g_2(t) = t^2$ e $g_3(t) = t^3$, ou seja,

$$2 = \int_{-1}^{1} 1\, dt = A_0 g_0(t_0) + A_1 g_0(t_1) = A_0 + A_1$$

$$0 = \int_{-1}^{1} t\, dt = A_0 g_1(t_0) + A_1 g_1(t_1) = A_0 t_0 + A_1 t_1$$

$$\frac{2}{3} = \int_{-1}^{1} t^2\, dt = A_0 g_2(t_0) + A_1 g_2(t_1) = A_0 t_0^2 + A_1 t_1^2$$

$$0 = \int_{-1}^{1} t^3\, dt = A_0 g_3(t_0) + A_1 g_3(t_1) = A_0 t_0^3 + A_1 t_1^3 .$$

Temos então o sistema não linear com quatro equações e quatro incógnitas:

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 t_0 + A_1 t_1 = 0 \\ A_0 t_0^2 + A_1 t_1^2 = 2/3 \\ A_0 t_0^3 + A_1 t_1^3 = 0\,. \end{cases}$$

Resolvendo, temos

$t_0 = -\sqrt{3}/3,\ t_1 = \sqrt{3}/3$ e $A_0 = A_1 = 1.$

Assim, se a função do integrando for um polinômio de grau até três, então a expressão

$$\int_{-1}^{1} f(t)\,dt = I_2 = A_0 f(t_0) + A_1 f(t_1)$$

considerando t_0, t_1, A_0 e A_1 com os valores obtidos acima, fornecerá o valor exato da integral.

Exemplo: Calcular $\int_{-1}^{1} 4t^3 + 3t^2 + t + 1\, dt$ usando a fórmula de Quadratura Gaussiana, obtida anteriormente.

Solução: Temos que $I_2 = A_0 f(t_0) + A_1 f(t_1)$, com $t_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}$, $t_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$, $A_0 = 1$ e $A_0 = 1$. Logo,

$$I_2 = 1f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + 1f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

$$= 1\left[4\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^3 + 3\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2 - \frac{\sqrt{3}}{3} + 1\right] + 1\left[4\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^3 + 3\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2 + \frac{\sqrt{3}}{3} + 1\right]$$

$$= 4.$$

A integral analítica é

$$\int_{-1}^{1} 4t^3 + 3t^2 + t + 1\, dt = \left[t^4 + t^3 + \frac{1}{2}t^2 + t\right]\Big|_{-1}^{1} = 4.$$

Observação:

No caso de um intervalo [a, b] genérico, efetuamos a mudança de variáveis: para $t \in [-1, 1]$ corresponde $x \in [a, b]$ onde

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

Exemplo:

Seja calcular $\int_0^{10} e^{-x}\,dx$. Neste caso, $[a, b] = [0,10]$, $x = 5 + 5t$, $dx = 5dt$, $f(x) = e^{-x}$ e $g(t) = e^{-5-5t}$. Usando a fórmula da Quadratura Gaussiana com dois pontos temos

$$\int_0^{10} e^{-x}\,dx = 5\int_{-1}^{1} e^{-5-5t}\,dt = I$$

$$t_0 = -\sqrt{3}/3 = -0.577350 \quad e \quad t_1 = \sqrt{3}/3 = 0.577350$$

$$A_0 = A_1 = 1.$$

Então,

$$I \approx 5[A_0 g(t_0) + A_1 g(t_1)] = 5[e^{-5+5\sqrt{3}/3} + e^{-5-5\sqrt{3}/3}] =$$

$$= 5\,[e^{-2.113249} + e^{-7.886751}] = 0.606102.$$

Observação:

O procedimento que fizemos para obter uma fórmula de Quadratura Gaussiana quando n=1 pode ser generalizado para $n = 2, n = 3, \dots$. Nesses casos costuma-se utilizar uma tabela com os valores fixados para os pontos $x_0, x_1, \dots$ e para os pesos $A_0, A_1, \dots$.

Exercício: Calcular o valor das integrais a seguir usando a fórmula de Quadratura Gaussiana obtida anteriormente (com dois pontos).

a) $\int_{-1}^{1} t^3 + 2t^2 - t - 1\, dt$

b) $\int_{0}^{1} e^{-x^2}\, dx$