Matemática Computacional
MEBiol, MEBiom e MEFT
Aula 16 - Integração numérica

Ana Leonor Silvestre

Instituto Superior Técnico, $1^{\underline{o}}$ *Semestre, 2020/2021*

Sumário da Aula 16

Cap. 5 - Integração numérica

1. Regras de quadratura. Grau de exatidão de uma quadratura

2. Cálculo dos pesos. Método dos coeficientes indeterminados.
Algoritmo alternativo baseado na base de Lagrange

3. Fórmulas de Newton-Cotes simples (nós igualmente espaçados)
3.1 Regra do ponto médio ou do retângulo
3.2 Regra do trapézio
3.3 Regra de Simpson
3.4 Regra dos três oitavos

4. Fórmulas de Newton-Cotes compostas
4.1 Regra dos retângulos

Integração numérica - **Exemplo**

Consideremos uma população com 200 indivíduos. Sabe-se que a distribuição $N(a)$ da altura destes indivíduos pode ser representada por uma Gaussiana que se caracteriza pelo valor médio $\bar{a} = 1.70$ m de altura, pelo desvio padrão $\sigma = 0.10$ m e $M = 200$:

$$N(a) = \frac{M}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(\bar{a}-a)^2/(2\sigma^2)}.$$

Problema: Qual o número de indivíduos N cuja altura varia na faixa $1.80 - 1.90$ m?

Resolução do problema: Uma estimativa para N é dada pelo integral

$$N = \int_{1.80}^{1.90} N(a)da = 797.885 \int_{1.80}^{1.90} e^{-50(1.70-a)^2} da.$$

Integração numérica - Recursos computacionais

Como calcular $\int_{1.80}^{1.90} e^{-50(1.70-a)^2} da$?

No Mathematica a função **NIntegrate** faz **integração numérica**:

In: 797.885 NIntegrate[Exp[-50 (1.70 - a)^2],{a, 1.80, 1.90}]
Out: 27.181

No MATLAB, temos o comando `integral`:

» 797.885*integral(@(a)exp(-50*(1.70 - a).^2),1.80,1.90)
ans = 27.1810

Um dos nossos objetivos é perceber como estão implementadas as funções **NIntegrate** e `integral`.

Vamos deduzir, analisar e aplicar Fórmulas de integração numérica (também chamadas Regras de quadratura)

O nosso objetivo é deduzir *fórmulas de integração numérica*, fáceis de aplicar, que usem apenas um número finito de valores da função f cujo integral queremos calcular.

Serão *funcionais* $Q : C([a, b]) \to \mathbb{R}$

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i).$$

Fórmulas de integração numérica ou Regras de quadratura

Podemos ver o problema da integração numérica como um problema de aproximação mais geral: pretendemos construir uma aproximação do funcional $I : C([a,b]) \to \mathbb{R}$

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

em vez de considerar a aproximação de cada função f isoladamente.

Fixamos a priori um conjunto finito de pontos

$$\mathcal{X} := \{x_0, ..., x_n\} \subset [a,b], \quad a \leq x_0 < x_1 < ... < x_n \leq b$$

e procuramos uma aproximação de I através de uma soma ponderada dos valores de f em $\mathcal{X}$:

$$I(f) \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i), \quad (f \in C([a,b]))$$

com A_i, $i = 0, ..., n$, independentes de f.

Fórmulas de integração numérica ou Regras de quadratura

Definição

Chama-se fórmula de integração numérica, regra de integração numérica ou regra de quadratura a um funcional da forma

$$Q : C([a,b]) \to \mathbb{R}$$

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

Os pontos $x_0, ..., x_n$ dizem-se os nós de integração e os coeficientes $A_0, ..., A_n$ são os pesos da quadratura (ambos são independentes da função f).

Exemplos de fórmulas de integração numérica ou quadraturas

Recordando as somas de Riemann de $f \in C([a,b])$ e as suas propriedades de convergência para o integral $\int_a^b f(x)dx$, podemos usá-las para definir as seguintes regras de quadratura $Q : C([a,b]) \to \mathbb{R}$

$$Q(f) := \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) f(x_i),$$

$$Q(f) := \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) f(x_{i+1})$$

onde $a \leq x_0 < x_1 < \ldots < x_n \leq b$.
Esta ideia será explorada mas à frente nas fórmulas de integração compostas.

Exemplo

Calcular $I = \int_{1.80}^{1.90} e^{-50(1.70-x)^2} dx$ usando a fórmula

$$Q(f) := \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) f(x_i),$$

com valores de f em 100 nós igualmente espaçados.
A função a integrar é

$$f(x) := e^{-50(1.70-x)^2}.$$

Tomamos $n = 100$ o que dá

$$x_i = 1.80 + 0.01i, \quad i = 0, 1, 2, ..., 99, 100;$$

$$h = x_{i+1} - x_i = 0.01 \quad i = 0, 1, 2, ..., 99.$$

Obtemos

$$I \approx h \sum_{i=0}^{99} e^{-50(1.70-x_i)^2} = h \sum_{i=0}^{99} e^{-0.50(1+0.1i)^2} = 0.0428522.$$

Quadraturas exatas para polinómios. Grau de exatidão de uma quadratura

Vamos ver como se pode, em geral, determinar/fixar os coeficientes $A_0, ..., A_n$ na fórmula de integração numérica

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i).$$

Objetivo

Fixar um critério para a determinação dos pesos de Q de forma única, dependendo apenas dos nós de integração, os quais, para já, se supõem conhecidos.

Quadraturas exatas para polinómios. Grau de exatidão de uma quadratura

Definição

Diz-se que a regra de quadratura Q *representa exatamente o integral* I *sobre o espaço* $\mathcal{P}_m$ se

$$Q(p) = I(p), \forall p \in \mathcal{P}_m.$$

Diz-se ainda que Q é uma aproximação de I com grau de exatidão igual a m se m é o maior inteiro não negativo tal que Q é exata sobre $\mathcal{P}_m$.

> Como determinar facilmente o grau de exatidão de uma quadratura?

Grau de exatidão de uma quadratura

Teorema

Seja $\{g_0, ..., g_m\}$ uma base de $\mathcal{P}_m$. O funcional Q é uma representação exata de I sobre $\mathcal{P}_m$ se e só se

$$Q(g_j) = I(g_j), \forall j \in \{0, ..., m\}.$$

Uma escolha possível é a base canónica $\{g_0, ..., g_n\} = \{1, ..., x^n\}$. Obtemos o seguinte **critério para o grau de exatidão** de uma quadratura:

Corolário

Q é uma aproximação de I com grau de exatidão igual a m se e só se

$$Q(x^k) = I(x^k),\ k = 0, ..., m; \quad Q(x^{m+1}) \neq I(x^{m+1}).$$

Exemplo 1

$$I(f) := \int_a^b f(x)dx \quad (a < b) \qquad Q(f) := (b-a)f(a)$$

1. $Q(1) = b - a, \quad I(1) = \int_a^b dx = b - a$
2. $Q(x) = (b-a)a, \quad I(x) = \int_a^b x dx = \frac{b^2-a^2}{2} = (b-a)\frac{b+a}{2}$

Como

$$Q(1) = I(1),\ Q(x) \neq I(x)$$

a quadratura Q tem **grau 0**.

Exemplo 2

$$I(f) := \int_a^b f(x)dx \quad (a < b) \qquad Q(f) := (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

1. $Q(1) = b - a$, $\quad I(1) = \int_a^b dx = b - a$
2. $Q(x) = (b-a)\frac{b+a}{2}$, $\quad I(x) = \int_a^b x dx = \frac{b^2-a^2}{2} = (b-a)\frac{b+a}{2}$
3. $Q(x^2) = (b-a)\frac{(b+a)^2}{4} = \frac{(b-a)(a^2+2ab+b^2)}{4} = \frac{b^3-a^3+\cdots}{4}$,
   $I(x^2) = \int_a^b x^2 dx = \frac{b^3-a^3}{3}$

Como

$$Q(1) = I(1),\ Q(x) = I(x),\ Q(x^2) \neq I(x^2)$$

a quadratura Q tem **grau 1**.

Construção de quadraturas exatas para polinómios

O teorema anterior fornece um algoritmo para o cálculo dos coeficientes $A_0, ..., A_n$ da regra Q de modo que esta seja, pelo menos, de grau n como aproximação de I.
Basta fixar uma base de $\mathcal{P}_n$ e resolver o seguinte sistema linear

$$\begin{cases} Q(g_0) = I(g_0) \\ Q(g_1) = I(g_1) \\ \quad \cdots \\ Q(g_n) = I(g_n) \end{cases} \iff \begin{cases} A_0 g_0(x_0) + \cdots A_n g_0(x_n) = I(g_0) \\ A_0 g_1(x_0) + \cdots A_n g_1(x_n) = I(g_1) \\ \quad \cdots \\ A_0 g_n(x_0) + \cdots A_n g_n(x_n) = I(g_n) \end{cases}$$

$$\iff \begin{bmatrix} g_0(x_0) & g_0(x_1) & \cdots & g_0(x_n) \\ g_1(x_0) & g_1(x_1) & \cdots & g_1(x_n) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ g_n(x_0) & g_n(x_1) & \cdots & g_n(x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I(g_0) \\ I(g_1) \\ \vdots \\ I(g_n) \end{bmatrix}$$

Assim, os pesos $A_0, ..., A_n$ dependem apenas do intevalo $[a, b]$ e dos nós de integração aí escolhidos.

Cálculo dos pesos. Método dos coeficientes indeterminados

Comecemos por explicitar o sistema linear anterior para a base canónica de $\mathcal{P}_n$,

$$\{g_0, ..., g_n\} = \{1, ..., x^n\}.$$

Substituindo

$$g_i(x_j) = x_j^i, \quad i, j = 0, ..., n$$

obtém-se o chamado método dos coeficientes indeterminados para calcular os pesos $A_0, ..., A_n$ de uma quadratura:

$$\boxed{\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I(1) \\ I(x) \\ \vdots \\ I(x^n) \end{bmatrix}}$$

em que a matriz (transposta da matriz de Vandermonde) é não-singular (pode apresentar problemas de condicionamento para valores de n grandes).

Cálculo dos pesos - algoritmo alternativo

À semelhança do que fizemos na interpolação polinomial, podemos procurar algoritmos alternativos para o cálculo aproximado de I mudando a base do espaço $\mathcal{P}_n$. Sejam $\ell_0, ..., \ell_n$ os *polinómios característicos de Lagrange*,

$$\ell_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, \; i = 0, ..., n.$$

Neste caso,

$$g_i(x_j) = \ell_i(x_j) = \delta_{ij},$$

e o funcional Q é uma representação exata de I sobre $\mathcal{P}_n$ se e só se

$$\boxed{A_i = I(\ell_i), \; \forall i \in \{0, ..., n\}.}$$

Porquê a designação "Quadraturas de tipo interpolação"?

Consideremos uma quadratura construída pelos algoritmos apresentados (método dos coeficientes indeterminados ou pesos integração como integrais das funções de base de Lagrange).
Seja $p_n \in \mathcal{P}_n$ o polinómio interpolador de f nos nós $x_0,...,x_n$.
Tem-se

$$f(x_i) = p_n(x_i),\ i = 0, ..., n.$$

Como Q é exata sobre $\mathcal{P}_n$, tem-se

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = \sum_{i=0}^{n} A_i p_n(x_i) = Q(p_n) = I(p_n).$$

$$\boxed{Q(f) = I(p_n)}$$

Exercício

Seja $I(f) := \int_{-1}^{1} f(x)dx$. Pretende-se aproximar I por uma quadratura da forma

$$Q(f) := A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2),$$

com $x_0, x_1, x_2 \in [-1, 1]$.

(a) Determine os coeficientes A_0, A_1 e A_2 de modo que Q seja exata sobre $\mathcal{P}_2$ nos seguintes casos
(i) $x_0 = -1, x_1 = 1/2, x_2 = 1$;
(ii) $x_0 = -1, x_1 = 0, x_2 = 1$;
(iii) $x_0 = -\sqrt{3}/3, x_1 = 0, x_2 = \sqrt{3}/3$;
(iv) $x_0 = -\sqrt{3/5}, x_1 = 0, x_2 = \sqrt{3/5}$.

(b) Relativamente às fórmulas obtidas na alínea anterior, determine o grau de Q.

(c) Qual o grau máximo possível para a fórmula Q?

Resolução

$$I(f) := \int_{-1}^{1} f(x)dx, \qquad Q(f) := A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$$

(a) Usamos o métodos dos coeficientes indeterminados

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_0 & x_1 & x_2 \\ x_0^2 & x_1^2 & x_2^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I(1) \\ I(x) \\ I(x^2) \end{bmatrix}$$

onde

$$I(1) := \int_{-1}^{1} dx = 2, \quad I(x) := \int_{-1}^{1} xdx = 0,$$

$$I(x^2) := \int_{-1}^{1} x^2 dx = 2/3$$

Resolução

(a) e (b) (i) $x_0 = -1, x_1 = 1/2, x_2 = 1$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1/2 & 1 \\ 1 & 1/4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ 2/3 \end{bmatrix}$$

$$\iff A_0 = 5/9, \qquad A_1 = 16/9, \qquad A_2 = -1/3$$

Por construção, a regra

$$Q(f) := \frac{5}{9} f(-1) + \frac{16}{9} f(1/2) - \frac{1}{3} f(1)$$

tem grau 2, pelo menos.
Poderá ter grau 3?

$$Q(x^3) = \frac{5}{9}(-1)^3 + \frac{16}{9}(1/2)^3 - \frac{1}{3} = -\frac{2}{3} \neq 0 = I(x^3),$$

logo Q tem grau 2.

Resolução

(ii) $x_0 = -1, x_1 = 0, x_2 = 1$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ 2/3 \end{bmatrix}$$

$$\iff A_0 = 1/3, \qquad A_1 = 4/3, \qquad A_2 = 1/3$$

Por construção, a regra

$$Q(f) := \frac{1}{3}\left[f(-1) + 4f(0) + f(1)\right]$$

tem grau 2, pelo menos.
Poderá ter grau 3?

$$Q(x^3) = \frac{1}{3}\left[(-1)^3 + 1\right] = 0 = I(x^3),$$

logo Q tem grau 3, pelo menos.

Resolução

Já vimos que

$$Q(f) := \frac{1}{3}\left[f(-1) + 4f(0) + f(1)\right]$$

tem grau 3, pelo menos.
Poderá ter grau 4?

$$Q(x^4) = \frac{1}{3}\left[(-1)^4 + 1\right] = 2/3 \neq 2/5 = I(x^4),$$

logo Q tem exatamente grau 3.

Resolução

(iii) $x_0 = -\sqrt{3}/3, x_1 = 0, x_2 = \sqrt{3}/3$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -\sqrt{3}/3 & 0 & \sqrt{3}/3 \\ 1/3 & 0 & 1/3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ 2/3 \end{bmatrix}$$

$$\iff A_0 = 1, \qquad A_1 = 0, \qquad A_2 = 1$$

Por construção, a regra

$$Q(f) := f(-\sqrt{3}/3) + f(\sqrt{3}/3)$$

tem grau 2, pelo menos.
Poderá ter grau 3?

$$Q(x^3) = (-\sqrt{3}/3)^3 + (\sqrt{3}/3)^3 = 0 = I(x^3),$$

logo Q tem grau 3, pelo menos.

Resolução

Já vimos que

$$Q(f) := f(-\sqrt{3}/3) + f(\sqrt{3}/3)$$

tem grau 3, pelo menos.
Poderá ter grau 4?

$$Q(x^4) = (-\sqrt{3}/3)^4 + (\sqrt{3}/3)^4 = 2/9 \neq 2/5 = I(x^4),$$

logo Q tem exatamente grau 3.

Resolução

(c) Grau máximo para $Q(f) := A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$, onde $-1 \leq x_0 < x_1 < x_2 \leq 1$?
Seja
$$q(x) = (x - x_0)^2 (x - x_1)^2 (x - x_2)^2 \in \mathcal{P}_6.$$
Tem-se
$$I(q) = \int_{-1}^{1} (x - x_0)^2 (x - x_1)^2 (x - x_2)^2 dx > 0$$
mas
$$Q(q) = A_0 q(x_0) + A_1 q(x_1) + A_2 q(x_2) = 0$$
logo o grau máximo que Q pode ter é 5.

Sobre o erro de integração

Teorema

Seja Q uma representação exata de I sobre $\mathcal{P}_n$. Então tem-se

$$I(f) - Q(f) = I(e_n), \, \forall f \in C([a,b])$$

onde

$$e_n(x) := f[x_0, ..., x_n, x] \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

ou

$$e_n(x) := \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \quad (f \in C^{n+1}([a,b]))$$

é o erro de interpolação polinomial.

Demonstração:

Como Q é exata sobre $\mathcal{P}_n$, tem-se

$$I(f) - Q(f) = I(f) - Q(p_n) = I(f) - I(p_n) = I(f - p_n),$$

onde p_n é o polinómio interpolador de f nos nós $x_0, .., x_n$. Agora podemos usar as fórmulas de erro de interpolação polinomial

$$f(x) - p_n(x) := f[x_0, ..., x_n, x] \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

ou

$$f(x) - p_n(x) := \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \quad (f \in C^{n+1}([a, b])).$$

Nós de integração igualmente espaçados.
Regras simples. Fórmulas de Newton-Cotes.

Fórmulas de Newton-Cotes abertas

A escolha mais simples dos nós de integração na aproximação do integral I consiste em *nós igualmente espaçados*, i.e.,

$$x_{i+1} - x_i = h.$$

As *fórmulas de Newton-Cotes abertas* são dadas por

$$Q_{n-1}(f) = \sum_{i=0}^{n-1} A_i f(x_i), \text{ com } x_i = a + (i + \frac{1}{2})h, \, i = 0, ..., n-1,$$

onde $h = (b-a)/n$. Neste caso, os extremos do intervalo não fazem parte dos nós de integração.

Fórmulas de Newton-Cotes abertas. Regra do ponto médio ou do retângulo

O caso mais simples das fórmulas de Newton-Cotes abertas é a regra do ponto médio

$$Q_0(f) := (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

Já vimos que esta fórmula tem grau 1, apesar de usar apenas 1 nó de integração.

Vamos ver que o erro de integração é dado por

$$\int_a^b f(x)dx - Q_0(f) = \frac{h^3}{24}f''(\xi), \quad \xi \in (a,b), \quad h = b-a,$$

para funções $f \in C^2([a,b])$. A fórmula de erro de integração deve traduzir o grau da fórmula.

Regra do ponto médio ou do retângulo

Partimos da expansão de Taylor

$$f(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)$$
$$+\frac{f''(\xi(x))}{2}\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2.$$

Integrando esta igualdade em $[a,b]$ e como $\int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right) dx = 0$, obtém-se

$$\int_a^b f(x)dx - Q_0(f) = \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2}\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 dx.$$

Agora é útil o

Teorema do valor médio para integrais Sejam $u, v \in C([a,b])$ tais que v não muda de sinal em $[a,b]$. Então existe $c \in (a,b)$ tal que

$$\int_a^b u(x)v(x)dx = u(c)\int_a^b v(x)dx.$$

Fórmulas de Newton-Cotes abertas. Regra do ponto médio ou do retângulo

É claro que $v(x) := \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2$ não muda se sinal em $[a, b]$, pelo que existe $\xi \in (a, b)$ tal que

$$\int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2} \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 dx = \frac{f''(\xi)}{2} \int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 dx =$$

$$= \frac{f''(\xi)}{2} \frac{(b-a)^3}{12} = \frac{h^3}{24} f''(\xi).$$

Fórmulas de Newton-Cotes fechadas

Consideremos agora nós igualmente espaçados que incluem os extremos do intervalo de integração:

$$x_i = a + ih,\ i = 0, ..., n, \ \text{com } h = \frac{b-a}{n}.$$

As *fórmulas de Newton-Cotes fechadas* são da forma

$$Q_n(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),\ \text{com } x_i = a + ih,\ i = 0, ..., n.$$

Exemplos: regra do trapézio, regra de Simpson, regra dos três oitavos,...

A seguir concretizamos as fórmulas de Newton-Cotes fechadas para alguns valores de n.

Regra do trapézio

Esta regra usa 2 nós: $x_0 = a$ e $x_1 = b$. Tem-se

$$A_0 = \int_a^b \ell_0(x)dx = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}dx = \frac{h}{2},$$

$$A_1 = \int_a^b \ell_1(x)dx = \int_a^b \frac{x-a}{b-a}dx = \frac{h}{2},$$

onde $h := b - a$. Obtemos a aproximação

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] =: T(f)$$

e observamos que T tem grau de exatidão igual a 1, pois, como o polinómio de segundo grau $w_2(x) := (x-a)(x-b)$ não muda de sinal em $[a, b]$ mas é nulo nos extremos do intervalo, tem-se

$$I(w_2) < 0 \text{ e } T(w_2) = 0.$$

Regra do trapézio: interpretação geométrica

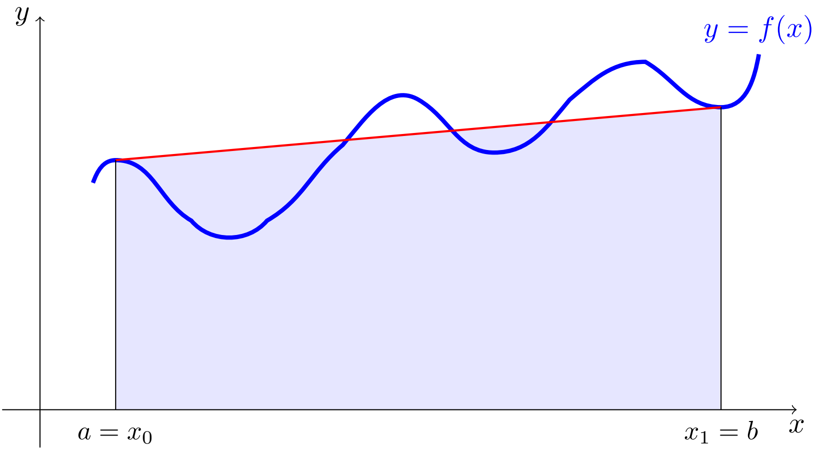


Figura: Regra do trapézio. A linha vermelha representa o polinómio p_1 interpolador de f em x_0 e x_1.

Regra de Simpson

A regra de Simpson baseia-se em 3 nós igualmente espaçados: $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ e $x_2 = b$ com $h = \frac{b-a}{2}$. Neste caso,

$$A_0 = A_2 = \frac{h}{3},$$

$$A_1 = \frac{4h}{3},$$

e a aproximação obtida para o integral é

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] =: S(f).$$

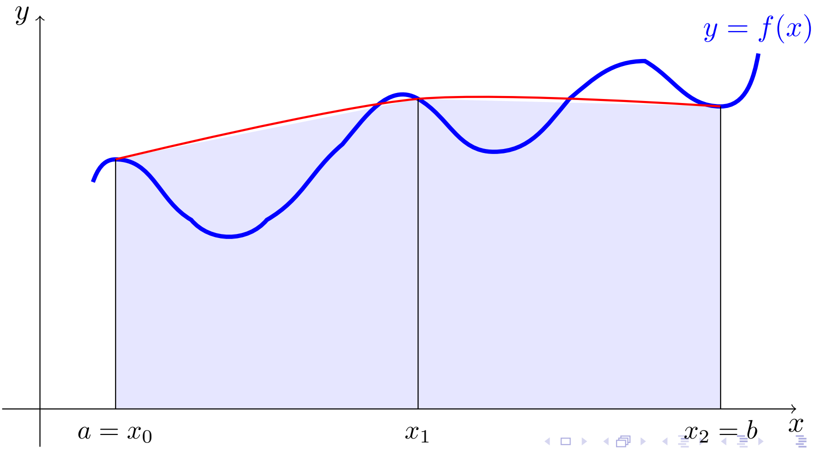
Na verdade, a regra de Simpson tem grau 3 (exercício).

Regra de Simpson. Interpretação geométrica do método

Note-se que

$$S(f) = S(p_2) = \int_a^b p_2(x)dx$$

onde p_2 é a parábola que passa nos pontos $(x_i, f(x_i))$, $i = 0, 1, 2$.



Regra dos três oitavos

Consideremos ainda 4 nós igualmente espaçados no intervalo $[a, b]$, $x_i = a + ih$, $i = 0, ..., 3$, onde $h := \frac{b-a}{3}$. Tem-se

$$A_0 = A_3 = \frac{3h}{8}$$

$$A_1 = A_2 = \frac{9h}{8}$$

pelo que a aproximação obtida é

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{3}{8}h[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)].$$

Erro de integração. Integração numérica e interpolação polinomial

Tratando-se de "quadraturas de tipo interpolação", se f for suficientemente regular no intervalo $[a, b]$, o erro de integração pode ser escrito usando o erro de interpolação

$$I(f) - Q(f) = I(f - p_n) = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) dx$$

e pode ser majorado por:

$$|I(f) - Q(f)| \leq \frac{\max_{[a,b]} |f^{(n+1)}|}{(n+1)!} \int_a^b \prod_{i=0}^{n} |x - x_i| dx.$$

Será que quanto maior for o grau do polinómio p_n melhor será a aproximação $\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_n(x)dx$?

A resposta é... não. Vejamos o famoso exemplo de Runge.

Integração numérica e Interpolação polinomial

O fenómeno de Runge é um problema de oscilação nos extremos de um intervalo, que ocorre quando se usa interpolação polinomial com polinómios de ordem elevada. É semelhante ao fenómeno de Gibbs para aproximações em séries de Fourier.

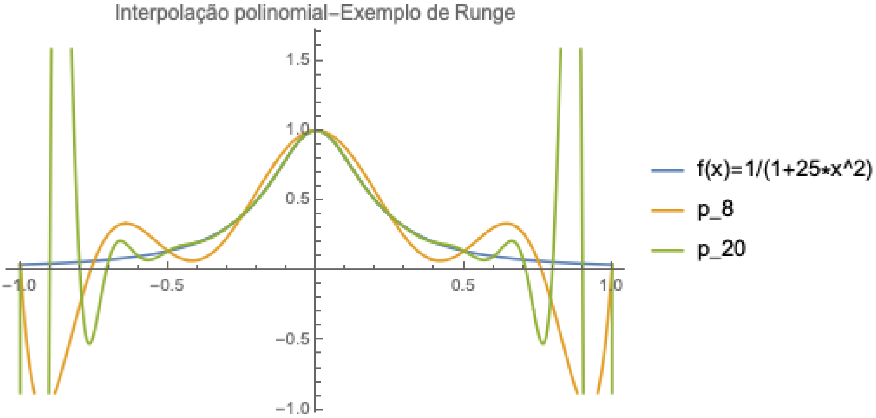
No exemplo de Runge são usados nós de interpolação igualmente espaçados, $\mathcal{X} = \{x_0, x_1, ..., x_n\} \subset [-1, 1]$,

$$x_i = -1 + \frac{2}{n} i, \quad i \in \{0, 1, \cdots n\}$$

para construir uma sucessão de polinómios interpoladores $\{p_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ de grau crescente. Verifica-se que

$$\lim_{n \to \infty} \left(\max_{-1 \leq x \leq 1} |f(x) - p_n(x)| \right) = \infty.$$

Integração numérica e Interpolação polinomial



Conclusão: Boas aproximações na parte central do intervalo, mas más aproximações nos extremos. A qualidade da aproximação piora à medida que o grau do polinómio interpolador aumenta.

Integração numérica e Interpolação polinomial

Consequentemente

$$\int_{-1}^{1} p_n(x)dx \not\to \int_{-1}^{1} f(x)dx.$$

Tem-se

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \int_{-1}^{1} \frac{1}{1+25x^2}dx \approx 0.54936,$$

mas

$$\int_{-1}^{1} p_8(x)dx = 0.300098, \quad \int_{-1}^{1} p_{20}(x)dx = -5.36991, \quad \ldots$$

Nós de integração igualmente espaçados. Regras compostas.

Programação em MATLAB - Regra do ponto médio composta ou regra dos retângulos

$$h = \frac{b-a}{n}, \quad x_i = a + ih, \, i = 0:n,$$

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$$

$$\approx \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) = h \sum_{i=0}^{n-1} f(\overline{x_i})$$

onde

$$\overline{x_i} = a + ih + \frac{h}{2}, \, i = 0 : n-1$$

Programação em MATLAB - Regra do ponto médio composta ou regra dos retângulos

$$Q(f) = h\sum_{i=0}^{n-1} f\left(a + \frac{h}{2} + ih\right), \qquad h = \frac{b-a}{n}$$

```
function q = pto_medio(a,b,f,n)
%Calcula um valor aproximado do integral de f
% no intervalo [a,b]
% usando a regra do ponto médio (composta)
h=(b-a)/n;
% Definição dos nós de integração
x=linspace(a+h/2,b-h/2,n);
% Cálculo do valor aproximado do integral
q = h*sum(f(x));
end
```

Aplicação do programa

```
» 797.885*pto_medio(1.80,1.90,@(a)exp(-50*(1.70 - a).^2),30)
ans =
27.1798

» 797.885*pto_medio(1.80,1.90,@(a)exp(-50*(1.70 - a).^2),100)
ans =
27.1809

» 797.885*pto_medio(1.80,1.90,@(a)exp(-50*(1.70 - a).^2),200)
ans =
27.1810
```