DCC008 - Cálculo Numérico Integração Numérica

Bernardo Martins Rocha

Departamento de Ciência da Computação Universidade Federal de Juiz de Fora bernardomartinsrocha@ice.ufjf.br

Conteúdo

- Introdução
- Fórmulas de Newton-Cotes
 - Regra do Trapézio
 - ► Regra de 1/3 de Simpson
 - ► Regra de 3/8 de Simpson
 - Regra repetida
 - Análise do erro
- Quadratura de Gauss-Legendre
 - Introdução
 - Regra geral
 - Análise do erro

Estamos interessados em estudar métodos numéricos para calcular de forma aproximada a integral de uma função com uma variável real em um intervalo [a,b].

O problema consiste em: encontrar

$$I = I(f) = \int_{a}^{b} f(x) \ dx$$

onde f(x) é uma função contínua com derivadas contínuas no intervalo [a,b].

Seja F(x) a função primitiva de f(x), tal que F'(x)=f(x). Pelo Teorema Fundamental do Cálculo sabemos que o valor da integral é dado por

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

Exemplo

Calcular $\int_0^2 x^4 \ dx$. Como $F(x) = \frac{x^5}{5}$ satisfaz $F'(x) = x^4 = f(x)$, pelo TFC, temos

$$I = \int_0^2 x^4 \ dx = \frac{2^5}{5} - \frac{0^5}{5} = \frac{32}{5} = 6.4$$

Algumas observações:

lacktriangle nem sempre conseguimos determinar a primitiva F(x)

$$\int_a^b e^{x^2} dx$$

- ightharpoonup em algumas situações a manipulação de F(x) pode ser complexa e trabalhosa
- em outros casos, podemos não conhecer de forma analítica a função f(x) que se deseja integrar e só temos os valores de f(x) em pontos x_i do intervalo (ex: experimentos)

Em geral, nessas situações é preciso usar métodos numéricos para calcular de forma aproximada o valor da integral.

Fórmulas de Newton-Cotes

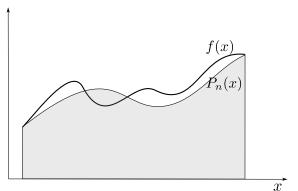
- ▶ Objetivo: aproximar o valor da integral $\int_a^b f(x)dx$
- ▶ Obter o polinômio interpolador $P_n(x)$ em pontos equidistantes
- ▶ Aproximar o valor da integral de f(x) usando $P_n(x)$

Veremos também outros métodos para integração numérica conhecidos como **Fórmulas de Quadratura de Gauss**.

De forma geral integração numérica consiste em integrar o polinômio interpolador $P_n(x)$ da função f(x) definido em um conjunto de pontos x_0, x_1, \ldots, x_n do intervalo [a,b]. Isto é

$$I = \int_{a}^{b} f(x) \ dx \approx \int_{x_0}^{x_n} P_n(x) \ dx$$

Graficamente



Vamos considerar inicialmente apenas as fórmulas de Newton-Cotes do tipo **fechada**, isto é, quando $x_0 = a$ e $x_n = b$.

Como vimos iremos usar o polinômio interpolador $P_n(x)$ de grau n para aproximar f(x). Como iremos usar pontos igualmente espaçados para desenvolver as fórmulas de Newton-Cotes, iremos usar $P_n(x)$ na forma de Newton-Gregory

$$P_n(x) = f(x_0) + (x - x_0) \frac{\Delta f(x_0)}{1!h} + (x - x_0)(x - x_1) \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2!h} + \dots + (x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) \frac{\Delta^n f(x_0)}{n!h}$$
(1)

onde $\Delta^i f(x_0)$ é o operador de diferenças ordinárias de ordem i.

Como vimos, podemos fazer uma mudança de variável na Equação 1 da seguinte forma

$$u = \frac{x - x_0}{h}$$
 ou $x = x_0 + uh$ (2)

Nesse caso, os pontos de interpolação são sempre dados por $0, 1, 2, \ldots, n$, ao invés de x_0, x_1, \ldots, x_n .

$$x_0 \Rightarrow u = \frac{x_0 - x_0}{h} = 0$$

$$x_1 \Rightarrow u = \frac{x_1 - x_0}{h} = 1$$

$$x_2 \Rightarrow u = \frac{x_2 - x_0}{h} = \frac{2h}{h} = 2, \dots$$

Assim podemos escrever

$$P_n(x) = f(x_0) + u\Delta f(x_0) + u(u-1)\frac{\Delta^2 f(x_0)}{2!} + \dots + u(u-1)\dots(u-n+1)\frac{\Delta^n f(x_0)}{n!}$$

Regra do Retângulo

O polinômio mais simples é uma constante. Na regra do retângulo, f(x) é aproximada pelo seu valor em $x_0=a$ (ou em $x_1=b$), de tal forma que

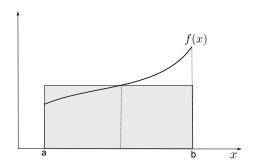
$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \int_{a}^{b} P_{0}(x) dx = \int_{a}^{b} f(a)dx$$

$$= xf(a) \Big|_{a}^{b} = (b-a)f(a) = \boxed{hf(a) = I_{R}}$$

Regra do Ponto Médio

Também podemos aproximar f(x) por uma outra constante tomada ao avaliar f(x) em algum outro ponto do intervalor [a,b]; a escolha mais comum é (a+b)/2, o centro do intervalo. Assim temos

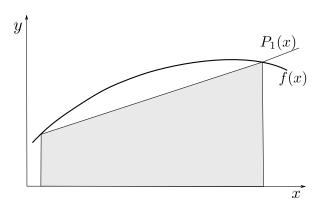
$$\int_{a}^{b} f(x) \ dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) = hf\left(\frac{a+b}{2}\right) = I_{M}$$



Regra do Trapézio

Seja $P_1(x)$ o polinômio interpolador de f(x) que passa pelos pontos $(x_0,f(x_0))$ e $(x_1,f(x_1))$ com $x_0=a$ e $x_1=b$.

Para calcular a integral vamos substituir o polinômio linear $P_1(x)$ e obter o valor aproximado da integral.



Regra do Trapézio

Substituindo $P_1(x)$ temos

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \int_{a=x_0}^{b=x_1} P_1(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} \left[f(x_0) + (x - x_0) \frac{\Delta f(x_0)}{h} \right] dx$$

Fazendo a mudança de variável de x para u, temos

$$u = \frac{x - x_0}{h} \implies \frac{du}{dx} = \frac{1}{h} \implies hdu = dx$$

$$x = x_0 = a \implies u = \frac{x_0 - x_0}{h} = 0$$

$$x = x_1 = b \implies u = \frac{x_1 - x_0}{h} = 1$$

então

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \int_{0}^{1} \left[f(x_0) + u \frac{\Delta f(x_0)}{h} \right] h du$$

Regra do Trapézio

Integrando em u, de forma analitica, temos

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \int_{0}^{1} \left[f(x_{0}) + u \frac{\Delta f(x_{0})}{h} \right] h du$$

$$= h \left[u f(x_{0}) + \frac{u^{2}}{2} \Delta f(x_{0}) \right] \Big|_{0}^{1}$$

$$= h \left[f(x_{0}) + \frac{1}{2} (f(x_{1}) - f(x_{0})) \right]$$

de onde obtemos a regra do Trapézio

$$I_T = \frac{h}{2} \left[f(x_0) + f(x_1) \right]$$
 (4)

Regra do Trapézio

Exemplo

Calcule de forma aproximada o valor da seguinte integral $\int_0^{1.2} e^x \cos{(x)} \ dx$ usando a **regra do trapézio**.

Solução do Exemplo

Temos $a=x_0=0$ e $b=x_1=1.2$, logo $h=x_1-x_0=1.2$. Calculando os valores da função em x_0 e x_1 temos

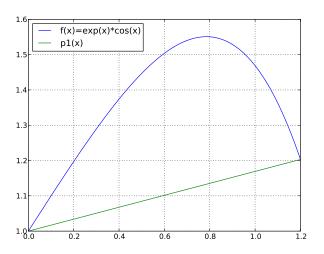
$$f(0) = e^{0} \cos(0) = 1$$
 $f(1.2) = e^{1.2} \cos(1.2) = 1.20$

logo

$$I = \frac{1.2}{2}[f(0) + f(1.2)] = 0.6[1 + 1.20] = 1.32$$

Regra do Trapézio

Solução do Exemplo



Regra do Trapézio

Solução do Exemplo

O valor exato da integral é

$$\int_0^{1.2} e^x \cos x \, dx = \frac{e^x (\sin x + \cos x)}{2} \Big|_0^{1.2}$$
$$= \frac{e^{1.2} (\sin 1.2 + \cos 1.2)}{2} - \frac{1}{2}$$
$$= 1.648774427$$

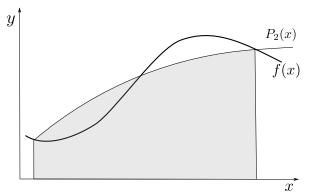
Obs: os exercícios são para calcular as integrais de forma aproximada usando as fórmulas de integração numérica!

Regra 1/3 de Simpson

Vamos aproximar f(x) por um polinômio interpolador $P_2(x)$ de grau 2. Assim temos

$$I = \int_{a}^{b} f(x) dx \approx \int_{a=x_{0}}^{b=x_{2}} P_{2}(x) dx$$

Graficamente



Regra 1/3 de Simpson

Novamente fazendo a mudança de variável de x para u, temos hdu=dx e

$$x = x_0 = a \quad \Rightarrow \quad u = \frac{x_0 - x_0}{h} = 0$$
$$x = x_2 = b \quad \Rightarrow \quad u = \frac{x_2 - x_0}{h} = \frac{2h}{h} = 2$$

então

$$\begin{split} \int_{x_0}^{x_2} P_2(x) \ dx &= \int_0^2 \left[f(x_0) + u \Delta f(x_0) + u(u - 1) \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2} \right] h \ du \\ &= h \left[u f(x_0) + \frac{u^2}{2} \Delta f(x_0) + \left(\frac{u^3}{6} - \frac{u^2}{4} \right) \Delta^2 f(x_0) \right] \Big|_0^2 \\ &= h \left[2 f(x_0) + 2 (f(x_1) - f(x_0)) + \frac{1}{3} (f(x_2) - 2 f(x_1) + f(x_0)) \right] \end{split}$$

de onde obtemos a regra de 1/3 de Simpson

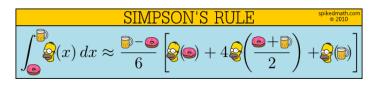
$$I_S = \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \right]$$
 (5)

Regra 1/3 de Simpson

Regra 1/3 de Simpson

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

Para lembrar



Regra 1/3 de Simpson

Exemplo

Vamos calcular o valor da integral $\int_0^{1.2} e^x \cos x \ dx$. Temos que

$$h = \frac{x_2 - x_0}{2}$$

Pela fórmula é preciso calcular o valore de f(x) em x_0 , x_1 e x_2 .

$$f(x_1) = f(0) = e^0 \cos(0) = 1$$

$$f(x_1) = f(0.6) = e^{0.6} \cos(0.6) = 1.50$$

$$f(x_2) = f(1.2) = e^{1.2} \cos(1.2) = 1.20$$

assim

$$I = \frac{0.6}{3} [1 + 4(1.50) + 1.2] = 0.2(8.2) = 1.64$$

Regra 3/8 de Simpson

Vamos usar agora um polinômio interpolador $P_3(x)$ de grau 3 para f(x). Assim

$$\int_a^b f(x) \ dx \approx \int_{a=x_0}^{b=x_3} P_3(x) \ dx$$

Novamente usando o polinômio interpolador na forma de Newton-Gregory temos

$$\int_{x_0}^{x_3} P_3 \ dx = \int_0^3 \left[f(x_0) + u \Delta f(x_0) + u(u - 1) \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2} + u(u - 1)(u - 2) \frac{\Delta^3 f(x_0)}{6} \right] h \ du$$

de onde obtemos após integrar de forma analítica em u, a regra 3/8 de Simpson dada por

$$I_s^{3/8} = \frac{3h}{8} \left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3) \right]$$
 (6)

Regra 3/8 de Simpson

Exemplo

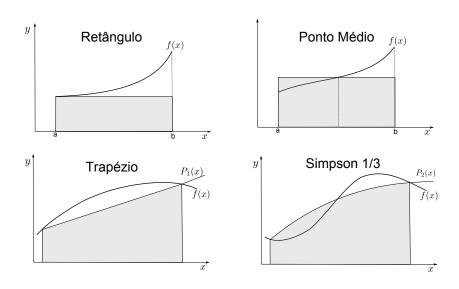
Podemos calcular novamente $\int_0^{1.2} e^x \cos{(x)} \ dx$, agora pela regra 3/8 de Simpson. Para tal, sabemos que $h=\frac{1.2-0}{3}=0.4$ e assim calculamos

$$f(0) = 1,$$
 $f(0) = 1.37$
 $f(0.8) = 1.55,$ $f(1.2) = 1.2$

logo

$$I = \frac{3(0.4)}{8} \left[1 + 3(1.37) + 3(1.55) + 1.2 \right] = 1.6465$$





Vamos considerar agora o erro cometido ao usar as regras de quadratura apresentadas até agora. Em todos os casos aproximamos f(x) por um polinômio interpolador $P_n(x)$ de grau n no intervalo [a,b], e então calculamos a integral de P_n como aproximação para a integral.

Logo o erro cometido é dado por

$$E = \int_a^b [f(x) - P_n(x)] dx$$

Como vimos no estudo de interpolação, o erro é dado por

$$f(x) - P_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(\eta(x))}{(n+1)!}$$

onde $\eta(x)$ é um ponto entre [a,b] e x_0,\ldots,x_n são os pontos de interpolação.

Assim de forma geral temos que

$$E = \frac{1}{(n+1)!} \int_{a}^{b} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) f^{(n+1)}(\eta) \ dx$$
 (7)

Antes de continuar vamos enunciar um resultado do qual faremos uso na dedução das fórmulas dos erros cometidos na integração numérica.

Teorema (Teorema Valor Médio para Integrais)

Sejam h(x) e g(x) funções contínuas em [a,b] tal que h(x) não muda de sinal, então existe $\xi \in [a,b]$ tal que

$$\int_{a}^{b} h(x)g(x) dx = g(\xi) \int_{a}^{b} h(x) dx$$

Vamos aplicar a Equação 7 para alguns casos particulares.

Erro na Regra do Retângulo

Nesse caso n=0 e $x_0=a$, portanto

$$E_R = \int_a^b (x-a)f'(\eta(x)) \ dx$$

Aplicando o teorema do valor médio para integrais temos

$$E_R = \int_a^b (x - a) f'(\eta(x)) dx = f'(\xi) \int_a^b x - a dx$$

$$= f'(\xi) \left[\frac{x^2}{2} - ax \right] \Big|_a^b = f'(\xi) \left[\frac{b^2}{2} - ab - \frac{a^2}{2} + a^2 \right]$$

$$= \frac{f'(\xi)}{2} \left[b^2 - 2ab + a^2 \right]$$

isto é

$$E_R = \frac{f'(\xi)}{2}(b-a)^2$$

Erro na Regra do Retângulo

(Continuando)

$$E_R = \frac{f'(\xi)}{2}(b-a)^2$$

Devido a dificuldade de determinar o ponto ξ , em geral trabalhamos com um limitante superior para o erro, o qual é dado por

$$|E_R| \le \frac{M_1}{2} (b - a)^2$$

onde M_1 é um limitante para |f'(x)| em [a,b], isto é

$$M_1 = \max_{a \le x \le b} |f'(x)|$$

Erro na Regra do Trapézio

Para a regra do trapézio temos n=1 e $x_0=a$ e $x_1=b$, assim temos

$$E_T = \frac{1}{2} \int_a^b (x - a)(x - b) f''(\eta(x)) \ dx$$

Como (x-a)(x-b) não muda de sinal, usamos o teorema do valor médio para integrais e obtemos

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

que após integração resulta em

$$E_T = -\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)^3$$
 \Rightarrow $|E_T| \le \frac{M_2}{12}(b-a)^3$

onde M_2 é um limitante para a segunda derivada de |f''(x)| no intervalo [a,b].

Erro na Regra do Ponto Médio

Podemos proceder como nos casos anteriores para obter uma estimativa para o erro na **regra do ponto médio**, entretanto podemos obter uma estimativa do erro melhor do que desta forma.

Seja m=(a+b)/2 e vamos tomar a expansão em série de Taylor de f(x) em torno do ponto m, isto é

$$f(x) = f(m) + f'(m)(x - m) + \frac{f''(\eta(x))}{2}(x - m)^2$$

E ainda nesse caso n=0 e $P_0(x)=f(m)$, assim

$$\underbrace{f(x) - P_0(m)}_{\text{erro}} = f'(m)(x - m) + \frac{f''(\eta(x))}{2}(x - m)^2$$

integrando temos

$$E_M = \int_a^b f'(m)(x-m) + \frac{f''(\eta(x))}{2}(x-m)^2 dx$$

Erro na Regra do Ponto Médio

$$E_M = \int_a^b f'(m)(x-m) + \frac{f''(\eta(x))}{2}(x-m)^2 dx$$

$$= \int_a^b f'(m)(x-m) dx + \frac{1}{2} \int_a^b f''(\eta(x))(x-m)^2 dx$$

$$= f'(m) \underbrace{\int_a^b (x-m) dx}_{0} + \frac{1}{2} f''(\xi) \int_a^b (x-m)^2 dx$$

assim

$$E_M = \frac{f''(\xi)}{24} (b - a)^3$$

Erro na Regra do Ponto Médio e Simpson 1/3

Com a fórmula do erro anterior podemos obter o seguinte limitante

$$|E_M| \le \frac{M_2}{24}(b-a)^3$$

onde M_2 é um limitante para |f''(x)| em [a, b].

O erro para a regra 1/3 de Simpson é dado por

$$E_S = -\frac{f^{(4)}(\xi)}{2880}(b-a)^5 \implies [|E_S| \le \frac{M_4}{2880}(b-a)^5]$$

onde M_4 é um limitante para $|f^{(4)}(x)|$ em [a,b].

Resumo

▶ Retângulo (n = 0)

$$E_R = \frac{f'(\xi)}{2}(b-a)^2$$

 $|E_R| \le \frac{M_1}{2} (b - a)^2$

▶ Ponto Médio (n = 0)

$$E_M = \frac{f''(\xi)}{24} (b - a)^3$$

 $|E_M| \le \frac{M_2}{24}(b-a)^3$

▶ Trapézio (n = 1)

$$E_T = -\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)^3$$

 $|E_T| \le \frac{M_2}{12}(b-a)^3$

▶ Simpson 1/3 (n = 2)

$$E_S = -\frac{f^{(4)}(\xi)}{2880}(b-a)^5$$

$$|E_S| \le \frac{M_4}{2880} (b-a)^5$$

Exemplos

Exemplo

Calcule

$$\ln 2 = \int_{1}^{2} \frac{1}{x} \, dx \approx 0.69314718$$

usando as regras

- ponto médio
- trapézio
- ► Simpson 1/3
- ► Simpson 3/8

e faça uma análise do erro.

Fórmulas Repetidas

Quando o intervalo é grande, pode não ser conveniente aumentar o grau do polinômio interpolador para estabelecer outras regras de interpolação.

- ▶ se o intervalo é grande, o erro é grande
- fórmulas complicadas
- problemas com interpolação de alta ordem para pontos igualmente espaçados

Uma idéia alternativa é dividir o intervalo original em diversos subintervalos e aplicar a regra de integração em cada subintervalo.

Essas são as chamadas regras **repetidas**, **generalizadas** ou **compostas**:

- Regra do retângulo repetida
- Regra do ponto médio repetida
- Regra do trapézio repetida
- ▶ Regra de 1/3 de Simpson repetida
- ▶ Regra do 3/8 de Simpson repetida

Fórmulas Repetidas

Para começar vamos aplicar a idéia às regras do retângulo e do ponto médio. Dividimos o intervalo [a,b] em m subintervalos, com $x_0=a$ e $x_m=b$ e $x_i=a+ih$ para $i=0,\ldots,m$. Então

$$I = \int_{a}^{b} f(x) \ dx = \sum_{i=1}^{m} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) \ dx$$

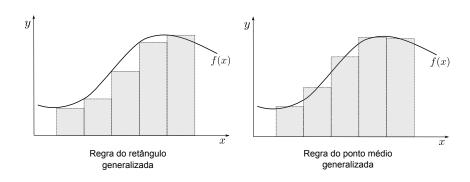
Se aplicarmos a regra do retângulo a cada subintervalo, temos a regra do retângulo repetida, isto é

$$I_R^R = \sum_{i=1}^m hf(x_{i-1})$$

e para a regra do ponto médio temos

$$I_M^R = \sum_{i=1}^m hf\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right)$$

Regra do retângulo e do ponto médio repetidas



Regra do trapézio repetida

A fórmula de integração da regra do trapézio é

$$I_T = \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] \tag{8}$$

Subdividindo o intervalo de integração [a,b] em m subintervalos iguais e usando a Equação 8 a cada 2 pontos, temos

$$I_T^R = \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] + \frac{h}{2} [f(x_1) + f(x_2)] + \dots + \frac{h}{2} [f(x_{m-1}) + f(x_m)]$$

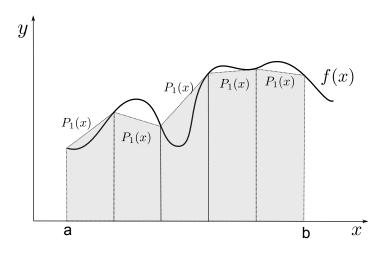
= $\frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{m-1}) + f(x_m)]$

e assim temos

$$I_T^R = \frac{h}{2} \sum_{i=0}^m c_i f(x_i)$$
(9)

onde $c_0 = c_m = 1$ e $c_i = 2$ para i = 1, ..., m - 1.

Regra do trapézio repetida



Regra de 1/3 de Simpson repetida

De forma similar vamos deduzir a versão repetida da fórmula 1/3 de Simpson

$$I_S = \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \right] \tag{10}$$

Dividindo o intervalo [a,b] em m (múltiplo de 2) subintervalos iguais e aplicando a Equação 10 a cada 3 pontos temos

$$I_S^R = \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \right] + \frac{h}{3} \left[f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4) \right]$$

$$+ \dots + \frac{h}{3} \left[f(x_{m-2}) + 4f(x_{m-1}) + f(x_m) \right]$$

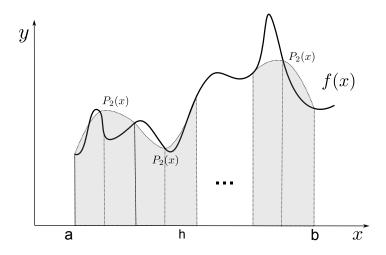
$$= \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \dots + 4f(x_{m-1}) + f(x_m) \right]$$

e assim

$$I_S^R = \frac{h}{3} \sum_{i=0}^m c_i f(x_i)$$
 (11)

onde $c_0 = c_m = 1$, $c_i = 4$ se i for impar e $c_i = 2$ se i for par.

Regra de 1/3 de Simpson repetida



Regra de 3/8 de Simpson repetida

Considerando

$$I_{S3/8} = \frac{3h}{8} \left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3) \right]$$
 (12)

Subdividindo o intervalo em m (agora múltipli de 3) subintervalos, e aplicando a Equação 12 a cada 4 pontos, temos

$$I_{S3/8}^{R} = \frac{3h}{8} \left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3) \right]$$

$$+ \frac{3h}{8} \left[f(x_3) + 3f(x_4) + 3f(x_5) + f(x_6) \right]$$

$$+ \dots + \frac{3h}{8} \left[f(x_{m-3}) + 3f(x_{m-2}) + 3f(x_{m-1}) + f(x_m) \right]$$

$$= \frac{3h}{8} \left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + 2f(x_3) + 3f(x_4) + \dots + f(x_m) \right]$$

que de forma geral pode ser escrita como

$$I_{S3/8}^{R} = \frac{3h}{8} \sum_{i=1}^{m} c_{i} f(x_{i})$$
(13)

Análise do erro para fórmulas repetidas

Todos os limitantes para o erro cometidos que vimos para as fórmulas (simples) envolvem alguma potência do tamanho do intervalo (b-a), e a menos que este seja pequeno, os limitantes não serão pequenos.

Como vimos, na prática é comum dividir o intervalo em subintervalos e fazer uso das regras repetidas.

Vamos agora considerar o erro cometido para as fórmulas repetidas. Para isso, basta somar o erro cometido em cada subintervalo.

No que segue, consideramos que o espaçamento em cada subintervalo i é o mesmo, isto é, $h_i=h$.

Análise do erro para fórmulas repetidas

Regra do Retângulo

Nesse caso, temos que o erro para o caso simples, no intervalo $\left[a,b\right]$ é dado por

$$E_R = \frac{f'(\xi)}{2}(b-a)^2$$

Como no caso das fórmulas repetidas, cada subintervalo $[x_{i-1},x_i]$ com $i=1,\ldots,m$, tem o mesmo tamanho h, somando o erro de cada subintervalo temos

$$E_R^R = \sum_{i=1}^m \frac{f'(\xi_i)}{2} h^2 = f'(\xi) \sum_{i=1}^m \frac{h^2}{2} = f'(\xi) \frac{h^2}{2} m$$

Como h=(b-a)/m, temos que m=(b-a)/h e assim

$$E_R^R = f'(\xi) \frac{h^2}{2} \frac{(b-a)}{h} \quad \Rightarrow \quad E_R^R = \frac{f'(\xi)}{2} (b-a)h$$

Análise do erro para fórmulas repetidas Regra do Retângulo

E temos o seguinte limitante

$$|E_R^R| \le \frac{M_1}{2}(b-a)h$$

onde $M_1 = \max_{a \leq x \leq b} |f'(x)|$. Note que M_1 é um limitante para a primeira derivada em todo o intervalo [a,b]. Poderíamos obter um limitante melhor considerando limitantes para |f'(x)| em cada subintervalo.

Análise do erro para fórmulas repetidas Regra do Ponto Médio

Para a regra do ponto médio já mostramos que

$$E_M = \frac{f''(\xi)}{24} (b - a)^3$$

agora para a aplicação da fórmula repetida, temos

$$E_M^R = \sum_{i=1}^m \frac{f''(\xi_i)}{24} h^3 = f''(\xi) \sum_{i=1}^m \frac{h^3}{24}$$
$$= f''(\xi) \frac{h^3}{24} m = f''(\xi) \frac{h^3}{24} \frac{(b-a)}{h}$$
$$E_M^R = f''(\xi) \frac{h^2}{24} (b-a)$$

Limitante superior para o erro

$$|E_M^R| \le \frac{M_2}{24}h^2(b-a)$$

Análise do erro para fórmulas repetidas

Regra do Trapézio e 1/3 de Simpson

De forma similar obtemos para a regra do trapézio

$$E_T^R = -\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)h^2 \quad \Rightarrow \quad |E_T^R| \le \frac{M_2}{12}(b-a)h^2$$

e para a regra 1/3 de Simpson temos

$$E_S^R = -\frac{f^{(4)}(\xi)}{180}(b-a)h^4 \quad \Rightarrow \quad |E_S^R| \le \frac{M_4}{180}(b-a)h^4$$

Análise do erro para fórmulas repetidas Exemplos

Exemplo

Usando a regra 1/3 de Simpson obter a integral

$$\int_0^{1.2} e^x \cos\left(x\right) \, dx$$

com 3 casas decimais corretas (erro menor do que 10^{-3}), sabendo que o valor exato da integral é 1.648774427.

Exemplo

Quantos intervalos devem ser usados para calcular de forma aproximada o valor da integral

$$\int_0^{1.2} e^x \cos(x) \ dx$$

usando a regra dos Trapézios repetida de forma que o erro seja menor do que 0.5×10^{-3} .

Análise do erro para fórmulas repetidas Exemplos

Exemplo

Determine h para que a regra do ponto médio forneça o valor de

$$\int_{0.2}^{0.8} \sin\left(x\right) \, dx$$

com erro inferior a 10^{-5} .

Conteúdo

- Aula passada
 - Fórmulas de Newton-Cotes
 - Trapézio
 - ▶ 1/3 de Simpson
 - ▶ 3/8 de Simpson
 - ► Análise do erro
 - Fórmulas repetidas
 - Exemplos
- Aula de hoje
 - Método dos coeficientes indeterminados
 - Grau de precisão
 - Quadratura de Gauss-Legendre

Como vimos podemos obter uma regra para integração numérica ao integrar o polinômio interpolador do integrando.

Veremos agora uma forma alternativa de derivar as fórmulas de integração numérica até então estudadas.

Como vimos as fórmulas de integração numérica são do tipo

$$\int_{a}^{b} f(x) \ dx \approx \sum w_{i} f(x_{i})$$

onde w_i são constantes e $f(x_i)$ são os valores da função f nos pontos x_i .

Ex: regra do Trapézio, Simpson 1/3

$$I_T = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)], \qquad I_S = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$$

No método dos coeficientes indeterminados, consideramos os pontos x_0,\ldots,x_n dados e buscamos determinar os coeficientes w_0,\ldots,w_n de tal forma que a fórmula de integração numérica

$$\int_{a}^{b} f(x) \ dx \approx \sum w_{i} f(x_{i})$$

seja exata para certos tipos de funções, como por exemplo quando f(x) é um polinômio de grau $\leq n$.

Vamos ilustrar a idéia do método através de um exemplo.

Procuramos uma fórmula

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2)$$
 (14)

que será exata para todos os polinômios de grau ≤ 2 , isto é, quando $f(x)=c_0+c_1x+c_2x^2$ então a fórmula de integração numérica fornece o valor exato da integral.

Como

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \int_{a}^{b} [c_{0} + c_{1}x + c_{2}x^{2}] dx$$
$$= c_{0} \int_{a}^{b} dx + c_{1} \int_{a}^{b} x dx + c_{2} \int_{a}^{b} x^{2} dx$$

Isto é, exigir que a fórmula integre a função f(x) (nesse exemplo um polinômio de grau 2) exatamente é o mesmo que exigir que a fórmula integre as funções base $1,\ x$ e x^2 exatamente.

Assim usando a Equação (14), temos

$$f(x) = 1 \quad \Rightarrow \quad w_o 1 + w_1 1 w_2 1 = \int_a^b dx$$
$$f(x) = x \quad \Rightarrow \quad w_o x_0 + w_1 x_1 w_2 x_2 = \int_a^b x \, dx$$
$$f(x) = x^2 \quad \Rightarrow \quad w_o x_0^2 + w_1 x_1^2 w_2 x_2^2 = \int_a^b x^2 \, dx$$

Calculando as integrais

$$\int_{a}^{b} dx = (b - a)$$

$$\int_{a}^{b} x \, dx = \frac{(b^{2} - a^{2})}{2}$$

$$\int_{a}^{b} x^{2} \, dx = \frac{(b^{3} - a^{3})}{3}$$

assim considerando que $x_0=a,\ x_1=(a+b)/2$ e $x_2=b,$ podemos escrever as equações de forma matricial como

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ a & \frac{a+b}{2} & b \\ a^2 & \left(\frac{a+b}{2}\right)^2 & b^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b-a \\ \frac{b^2-a^2}{2} \\ \frac{b^3-a^3}{3} \end{bmatrix}$$

Resolvendo esse sistema de equações lineares, chegamos a solução (coeficientes da fórmula de integração):

$$w_0 = \frac{b-a}{6}, \quad w_1 = \frac{2(b-a)}{3}, \quad w_2 = \frac{b-a}{6}$$

que reconhecemos como a regra de Simpson 1/3

$$I_s = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$$

$$\Rightarrow \frac{b-a}{6} f(x_0) + \frac{4(b-a)}{6} f(x_1) + \frac{(b-a)}{6} f(x_2)$$

pois
$$h = (b - a)/2$$
.

Exemplo

Encontre a fórmula

$$\int_0^1 f(x) \ dx \approx w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1)$$

que é exata para funções da forma

$$f(x) = ae^x + b\cos\left(\frac{\pi x}{2}\right)$$

Solução do Exemplo

Para $f(x) = \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right)$ temos

$$\int_0^1 f(x) \ dx = \int_0^1 \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) \ dx = \frac{2\sin\left(\frac{\pi x}{2}\right)}{\pi} \Big|_0^1 = \frac{2}{\pi}$$

Solução do Exemplo

E assim temos a equação

$$w_0 f(0) + w_1 f(1) = \int_0^1 \cos \frac{\pi x}{2} dx = \frac{2}{\pi}$$

como
$$f(0) = \cos(0) = 1$$
 e $f(1) = \cos(\pi/2) = 0$ temos

$$w_0 = \frac{2}{\pi} \tag{15}$$

Solução do Exemplo

Para $f(x) = e^x$ temos

$$\int_0^1 e^x \ dx = e^x \Big|_0^1 = e - 1 \tag{16}$$

e assim

$$w_0 f(0) + w_1 f(1) = e - 1 \implies w_0 + w_1 e = e - 1$$

de onde obtemos

$$w_1 = 1 - \frac{1}{e} - \frac{2}{\pi e} \tag{17}$$

Solução do Exemplo

E assim para

$$I = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1)$$

obtemos a fórmula

$$I = \frac{2}{\pi}f(x_0) + \left(1 - \frac{1}{e} - \frac{2}{\pi e}\right)f(x_1)$$

que integra

$$\int_{x_0}^{x_1} [ae^x + b\cos(\pi x/2)] \ dx$$

para quaisquer valores de a e b de forma exata.



Definição (Grau de precisão)

Dizemos que uma regra de Newton-Cotes de n pontos tem grau de precisão (ou é de grau polinomial) d se ela é exata (i.e. o erro cometido é zero) para todo polinômio de grau d, mas não é exata para algum polinômio de grau d+1.

Como uma regra de n pontos de Newton-Cotes é baseada em um polinômio interpolador de grau n-1, é de se esperar que esta tenha grau pelo menos n-1, e de fato tem, pois isto foi definido em sua construção (met. coeficientes indeterminados).

Sendo assim podemos esperar que

- ▶ Ponto médio: 1 ponto (x_0) \Rightarrow grau 0
- ▶ Trapézio: 2 pontos (x_0, x_1) \Rightarrow grau 1
- ► Simpson 1/3: 3 pontos (x_0, x_1, x_2) \Rightarrow grau 2
- ► Simpson 3/8: 4 pontos (x_0, x_1, x_2, x_3) \Rightarrow grau 3

Entretanto, vimos na análise do erro cometido que o erro para a regra do ponto médio depende da segunda derivada do integrando, a qual é nula para polinômios lineares e constantes (logo erro é zero). Isso implica que a regra do ponto médio de fato integra polinômios lineares de forma exata e portanto tem grau 1.

De forma similar vimos que o erro na regra de Simpson 1/3 depende da derivada quarta do integrando, e portanto esta regra integra exatamente polinômios de grau ≤ 3 .

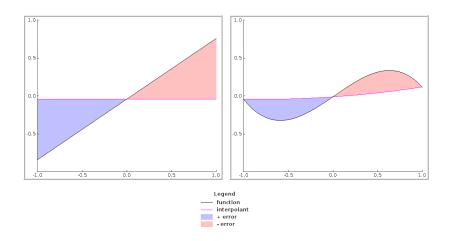
Sendo assim

- ▶ Ponto médio: 1 ponto (x_0) \Rightarrow grau 1
- ► Trapézio: 2 pontos (x_0, x_1) \Rightarrow grau 1
- ► Simpson 1/3: 3 pontos (x_0, x_1, x_2) \Rightarrow grau 3
- ► Simpson 3/8: 4 pontos (x_0, x_1, x_2, x_3) \Rightarrow grau 3

Cancelamento do erro

Em geral, em uma regra de Newton-Cotes com n pontos (n ímpar), temos um grau de precisão extra além do grau do polinômio interpolador.

Esse fenômeno ocorre devido ao cancelamento de erros negativos e positivos, como ilustra na Figura a seguir para os métodos do ponto médio e Simpson 1/3.



Em geral, uma regra de \underline{n} pontos de Newton-Cotes é de grau

- ightharpoonup n-1, se n é par
- ightharpoonup n, se n é ímpar

Como vimos, as regras de integração de Newton-Cotes são simples e efetivas, mas possuem algumas desvantagens:

- Uso de muitos pontos para interpolação de alta ordem pode gerar alguns problemas
- ightharpoonup As regras de Newton-Cotes fechadas requerem a avaliação de f(x) nos pontos do extremo do intervalo, onde geralmente ocorrem singularidades
- ➤ As regras do tipo Newton-Cotes, não possuem um grau de precisão tão alto quanto poderiam

Veremos que algumas dessas desvantagens são contornadas pela quadratura de Gauss (ou quadratura Gaussiana).

Estamos interessados em obter uma fórmula de integração na forma

$$I = \int_{a}^{b} f(x) \ dx = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + \ldots + w_n f(x_n)$$

onde agora os coeficientes w_i assim como os pontos x_i para $i=0,\dots,n$ devem ser determinados de forma a obter a melhor precisão possível.

Temos as seguintes incógnitas:

- $ightharpoonup x_0, x_1, \ldots, x_n$
- $\triangleright w_0, w_1, \ldots, w_n$

isto é, um total de 2n + 2 incógnitas a serem determinadas.

Sendo assim, podemos esperar que as regras que iremos obter sejam capazes de integrar exatamente polinômios de grau $\leq 2n+1$ uma vez que estes são definidos por 2n+2 parâmetros.

Vamos apresentar a idéia do método para o caso com 2 pontos

$$I = \int_{a}^{b} f(x) \ dx = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1)$$

Vamos considerar o intervalo [-1,1] para as regras de quadratura de Gauss, sem perda de generalidade, já que sempre podemos fazer uma mudança de variável para mudar do intervalo [a,b] para [-1,1] para realizar a integração.

Antes de continuar, vejamos como podemos fazer essa mudança de intervalo.

Mudança de intervalo

Seja $x \in [a,b]$. Podemos fazer a seguinte mudança de variável

$$x(t) = \frac{(b-a)t}{2} + \frac{b+a}{2}, \qquad t \in [-1, 1]$$

Qualquer que seja $x \in [a,b]$, existe $t \in [-1,1]$ tal que x=x(t). Sendo assim

$$\frac{dx}{dt} = x'(t) = \frac{b-a}{2} \quad \Rightarrow \quad dx = \frac{b-a}{2}dt$$

logo usando x=x(t) e $dx=x^{\prime}(t)\ dt$ temos

$$I = \int_{a}^{b} f(x) \ dx = \int_{-1}^{1} f(x(t)) \ x'(t) \ dt = \int_{-1}^{1} F(t) \ dt$$

onde
$$F(t)=f(x(t))$$
 $x'(t)=f\left(t\frac{(b-a)}{2}+\frac{b+a}{2}\right)\frac{b-a}{2}$

Assim vamos trabalhar com

$$I = \int_{-1}^{1} F(t)dt \approx w_0 F(t_0) + w_1 F(t_1)$$

onde t_0,t_1,w_0 e w_1 devem ser determinados de modo que a regra seja exata para polinômios de grau ≤ 3 , pois

▶ 2 pontos \rightarrow determinar t_0 , t_1 , w_0 e w_1

Uma fórmula de quadratura de Gauss com os pontos t_0, t_1, \ldots, t_n , tem grau de precisão polinomial dado por:

$$2n + 1$$

Por exemplo, se tivermos 2 pontos, isto é, t_0 e t_1 , a quadratura de Gauss tem precisão 2n+1=2(1)+1=3.

Vamos deduzir o caso

$$I = \int_{-1}^{1} F(t) dt = w_0 F(t_0) + w_1 F(t_1)$$

usando o método dos coeficientes indeterminados. Queremos encontrar w_0, w_1, t_0 e t_1 , isto é, 4 parâmetros, logo, a regra de integração que vamos deduzir deve integrar exatamente um polinômio de grau ≤ 3 .

Sendo assim, podemos escrever

$$F(t) = c_0\phi_0(t) + c_1\phi_1(t) + c_2\phi_2(t) + c_3\phi_3(t)$$

onde as funções base são: $\phi_j(t)=t^j$.

Agora basta exigir que a regra que queremos encontrar, i.e., $w_0F(t_0)+w_1F(t_1)$ integre exatamente cada uma das funções base.

Considerando que a regra é

$$w_0 F(t_0) + w_1 F(t_1) = \int_{-1}^{1} F(t) dt$$

temos que exigir que a regra integre $\phi_0(t)$ exatamente. Neste caso como $F(t)=\phi_0(t)$, e assim

$$w_0\phi_0(t_0) + w_1\phi_0(t_1) = \int_{-1}^1 \phi_0(t) dt$$

como $\phi_0(t)=1$ temos

$$w_0 1 + w_1 1 = \int_{-1}^{1} 1 \ dt$$

De forma similar, repetimos o processo para ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 .

Pelo método dos coeficientes indeterminados temos

$$\phi_0(t) = 1 \quad \Rightarrow \quad w_0 \ 1 + w_1 \ 1 = \int_{-1}^1 dt = t \Big|_{-1}^1 = 2$$

$$\phi_1(t) = t \quad \Rightarrow \quad w_0 t_0 + w_1 t_1 = \int_{-1}^1 t \ dt = \frac{t^2}{2} \Big|_{-1}^1 = 0$$

$$\phi_2(t) = t^2 \quad \Rightarrow \quad w_0 t_0^2 + w_1 t_1^2 = \int_{-1}^1 t^2 \ dt = \frac{t^3}{3} \Big|_{-1}^1 = \frac{2}{3}$$

$$\phi_3(t) = t^3 \quad \Rightarrow \quad w_0 t_0^3 + w_1 t_1^3 = \int_{-1}^1 t^3 \ dt = \frac{t^4}{4} \Big|_{-1}^1 = 0$$

ou seja, temos o seguinte sistema de equações não-lineares

$$w_0 + w_1 = 2$$

$$w_0 t_0 + w_1 t_1 = 0$$

$$w_0 t_0^2 + w_1 t_1^2 = 2/3$$

$$w_0 t_0^3 + w_1 t_1^3 = 0$$

Em geral precisamos recorrer a método numéricos para resolver sistemas de **equações não-lineares** (Método de Newton).

Entretanto, note que, fazendo $t_0 = -t_1$, temos

$$-w_0t_1 + w_1t_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad t_1(w_1 - w_0) = 0 \quad \Rightarrow \quad w_0 = w_1$$

assim $w_0+w_1=2$ \Rightarrow $\boxed{w_0=w_1=1}$ e ainda temos que

$$t_0^2 + t_1^2 = \frac{2}{3} \quad \Rightarrow \quad 2t_1^2 = \frac{2}{3} \quad \Rightarrow \quad \left| t_1 = \frac{\sqrt{3}}{3} \right|$$

e como $t_0 = -t_1$ temos

$$t_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}$$

Logo como

$$w_0 = 1$$
, $w_1 = 1$, $t_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}$, $t_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$

obtemos a seguinte regra de integração numérica

$$I = \int_{-1}^{1} F(t) dt = w_0 F(t_0) + w_1 F(t_1)$$
$$= F\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + F\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

que é chamada de quadratura de Gauss. Essa fórmula é exata para polinômios de grau ≤ 3 .

Como vimos, uma fórmula de quadratura de Gauss com apenas 2 pontos é capaz de integrar polinômios de grau até 3, enquanto que as fórmulas de Newton-Cotes com 2 pontos (Regra do Trapézio) integram apenas polinômios de grau 1.

Para o caso com 3 pontos $(t_0, t_1, t_2 \rightarrow n = 2)$ temos 2n + 1 = 5 e portanto essa quadratura de Gauss é capaz de integrar exatamente polinômios de grau ≤ 5 .

$$I = \int_{-1}^{1} F(t) dt = w_0 F(t_0) + w_1 F(t_1) + w_2 F(t_2)$$

Considerando $\phi_0 = 1, \phi_1 = t, \phi_2 = t^2, \phi_3 = t^3, \phi_4 = t^4$ e $\phi_5 = t^5$

$$w_0 + w_1 + w_2 = \int_{-1}^1 dt = 2$$

$$w_0 t_0 + w_1 t_1 + w_2 t_2 = \int_{-1}^1 t \ dt = 0$$

$$w_0 t_0^2 + w_1 t_1^2 + w_2 t_2^2 = \int_{-1}^1 t^2 \ dt = 2/3$$

$$w_0 t_0^3 + w_1 t_1^3 + w_2 t_2^3 = \int_{-1}^1 t^3 \ dt = 0$$

$$w_0 t_0^4 + w_1 t_1^4 + w_2 t_2^4 = \int_{-1}^1 t^4 \ dt = 2/5$$

$$w_0 t_0^5 + w_1 t_1^5 + w_2 t_2^5 = \int_{-1}^1 t^5 \ dt = 0$$

A solução do sistema fornece

pesos		pontos	
w_0	0.555	t_0	$-\sqrt{\frac{3}{5}}$
$ w_1 $	0.888	t_1	ŏ_
w_2	0.555	t_2	$\sqrt{\frac{3}{5}}$

Em geral as fórmulas de quadratura Gaussiana são dadas em forma de tabelas com os coeficientes (pesos) w_i e pontos t_i a serem usados na fórmula

$$I = \int_{-1}^{1} F(t) dt \approx \sum_{i=0}^{n} w_i F(t_i)$$

E como vimos essas regras de integração tem grau de precisão 2n+1 por construção.

Exemplo

Calcule $I = \int_1^3 3e^x \ dx$ usando a quadratura Gaussiana com 2 pontos.

Solução do Exemplo

1. Mudança de intervalo

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

logo

$$x'(t) = \frac{dx}{dt} = 1 \quad \Rightarrow \quad dx = dt$$

assim

$$\int_{1}^{3} 3e^{x} dx = \int_{-1}^{1} 3e^{(t+2)} 1 dt$$

Solução do Exemplo

Precisamos avaliar $F(t)=3e^{(t+2)}$ em $t=-\sqrt{3}/3$ e $t=\sqrt{3}/3$:

$$F(-0.577350) = 3e^{(-0.577350+2)} = 12.444292$$

$$F(0.577350) = 3e^{(0.577350+2)} = 39.486647$$

Assim calculamos a integral de forma aproximada como

$$I = F(-0.577350) + F(0.577350) = 51.930938$$

Se usarmos uma regra com 3 pontos temos

$$I = \frac{5}{9}F(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + \frac{8}{9}F(0) + \frac{5}{9}F(\sqrt{\frac{3}{5}}) = 52.1004$$

Obs: compare com o valor exato da integral: $3[e^3 - e] = 52.1018$



Exemplo

Calcular a integral $I = \int_{-2}^{0} (x^2 - 1) \ dx$ com a quadratura de Gauss de 2 pontos.

Solução do Exemplo

Mudança de intervalo

$$x(t) = \frac{(0 - (-2))t}{2} + \frac{(0 - 2)}{2} = t - 1$$
$$x'(t) = \frac{dx}{dt} = 1 \implies dx = dt$$

e portanto

$$\int_{-2}^{0} (x^2 - 1) dx = \int_{-1}^{1} [(t - 1)^2 - 1] 1 dx$$
$$= \int_{-1}^{1} t^2 - 2t + 1 - 1 dt = \int_{-1}^{1} [t^2 - 2t] dt$$

Exemplo

A aproximação da integral é dada por

$$I = F\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + F\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) = 1.488 - 0.821 = 0.66666$$

a qual pode ser comparada com o valor exato que é

$$\int_{-1}^{1} [t^2 - 2t] dt = \frac{t^3}{3} \Big|_{-1}^{1} - t^2 \Big|_{-1}^{1} = \frac{2}{3} = 0.66666$$

De onde podemos ver que de fato a quadratura de Gauss de 2 pontos integra polinômios de grau ≤ 3 de forma exata.

