Universidade do Minho
Escola de Ciências

Departamento de Matemática

Quadratura

- Regras de Newton-Cotes Simples
- Regras de Newton-Cotes Compostas

Quadratura Numérica

O problema da integração numérica ou quadratura numérica[1] é o de estimar o valor de um certo integral $\int_a^b f(x)dx$, o qual supomos existir.[2]

Existem várias razões que justificam a necessidade do recurso a métodos numéricos para aproximar integrais.

- Há funções cuja primitiva não é uma função que se possa expressar em termos de funções elementares. Exemplo: $\phi(x) = e^{-x^2}$.
- Por vezes, embora a primitiva da função a integrar seja conhecida, a sua expressão é de tal modo complicada que não é eficiente o seu uso.
- Poderemos ter necessidade de integrar uma função da qual conhecemos apenas um conjunto de valores, obtidos, por exemplo, experimentalmente.

[1] Quadratura é um termo histórico associado ao cálculo de áreas.
[2] Para já, consideramos a e b finitos.

Regras básicas

Grande parte dos processos de integração numérica para estimar o valor de um integral

$$I[f] = \int_a^b f(x)dx \tag{1}$$

consistem na utilização de fórmulas simples, chamadas fórmulas ou regras de quadratura, as quais são, geralmente, do tipo

$$Q_n[f] = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \tag{2}$$

Assim, o integral é simplesmente substituído por uma combinação linear de valores da função integranda em certos pontos.

- Os pontos x_i são chamados abcissas (ou pontos de quadratura) da regra de quadratura.
- Os coeficientes w_i são chamados pesos dessa regra.

Erro de quadratura

Nota: Em geral, os pesos e as abcissas não dependem da função integranda f e, além disso, os pesos satisfazem

$$\sum_{i=1}^{n} w_i = b - a.$$

Ao erro resultante da substituição do integral pelo valor dado pela regra, chamamos erro de quadratura da regra em questão. Designando por $E_n[f]$ o erro de quadratura associado à regra $Q_n[f]$, tem-se, então

$$\int_a^b f(x)dx = Q_n[f] + E_n[f] \tag{3}$$

Regras de Newton-Cotes (fechadas)

As chamadas regras de quadratura de Newton-Cotes (fechadas) são uma família Q_n ($n \in \mathbb{N}, n \geq 2$) de regras do tipo (2). A regra Q_n tem:

1. como abcissas, os n pontos igualmente espaçados no intervalo $[a, b]$,

$$x_i = a + (i-1)h; \; i = 1, \ldots, n; \; h = \frac{b-a}{n-1}; \tag{4}$$

2. como pesos, os valores obtidos substituindo a função integranda f pelo polinómio P_{n-1} de grau não superior a $n-1$ que interpola f nas n abcissas.

Nota: Estas regras são conhecidas como regras de Newton-Cotes fechadas porque incluem os extremos do intervalo de integração como abcissas; existem também regras de quadratura de Newton-Cotes abertas, em que a e b não são tomados como pontos de quadratura. Se nada dissermos em contrário, quando nos referirmos a regras de quadratura de Newton-Cotes, queremos significar as regras fechadas.

Pesos da regra de Newton-Cotes com n abcissas

Relembrando a fórmula de Lagrange do polinómio interpolador P_{n-1}:

$$P_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} L_i(x) f(x_i),$$

onde $L_i(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \left(\frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right)$, temos, então, que

$$Q_n[f] = \int_a^b P_{n-1}(x)dx = \int_a^b \left\{ \sum_{i=1}^{n} L_i(x) f(x_i) \right\} dx$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \underbrace{\left\{ \int_a^b L_i(x)dx \right\}}_{w_i} f(x_i).$$

$\Longrightarrow$ Os pesos w_i da regra de Newton-Cotes com n abcissas são dados por

$$\boxed{w_i = \int_a^b L_i(x)dx; i = 1, \ldots, n}$$

onde $L_i(x)$ são os polinómios de Lagrange relativos às abcissas $x_1, \ldots, x_n$.

Erro nas fórmulas de Newton-Cotes

Quanto ao erro de quadratura da regra Q_n, temos

$$E_n[f] = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b P_{n-1}(x)dx = \int_{a=x_1}^{b=x_n} (f(x) - P_{n-1}(x))\, dx$$

Supondo que $f \in C^n[a, b]$, e tendo em conta a expressão deduzida anteriormente para o erro em interpolação polinomial, vem, então:

$$\boxed{E_n[f] = \int_{x_1}^{x_n} \frac{f^{(n)}(\xi_x)}{n!} \prod_{i=1}^{n} (x - x_i)\, dx} \tag{5}$$

A fórmula anterior mostra que a regra de quadratura de Newton-Cotes Q_n correspondente ao uso de n abcissas é exata (ou seja, tem erro nulo) quando for aplicada a um polinómio de grau não superior a $n - 1$.

Grau de exatidão de uma regra de quadratura

Grau de exatidão

Diz-se que uma regra de quadratura tem precisão m ou é de grau (de exatidão) m se for exata para todos os polinómios de grau não superior a m e existir, pelo menos, um polinómio de grau $m+1$ que não é integrado exatamente por essa fórmula.

Nota: Vemos assim que a precisão da regra de Newton-Cotes com n abcissas é, no mínimo, $n-1$.

Caso $n = 2$ - Regra do trapézio

Consideremos o caso em que $n = 2$, ou seja, o caso em que temos apenas dois pontos de quadratura, $x_1 = a$ e $x_2 = b$, sendo $h = b - a$. Neste caso,

$$L_1(x) = -\frac{x - x_2}{h} \quad \text{e} \quad L_2(x) = \frac{x - x_1}{h}.$$

Assim, os pesos desta regra são dados por

$$w_1 = \int_{x_1}^{x_2} L_1(x)dx = -\frac{1}{h}\int_{x_1}^{x_2}(x - x_2)dx = -\frac{1}{h}\left[\frac{(x-x_2)^2}{2}\right]_{x_1}^{x_2} = \frac{h}{2}$$

e

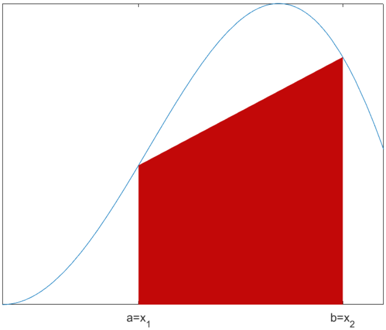
$$w_2 = \int_{x_1}^{x_2} L_2(x)dx = \frac{1}{h}\int_{x_1}^{x_2}(x - x_1)dx = \frac{1}{h}\left[\frac{(x-x_1)^2}{2}\right]_{x_1}^{x_2} = \frac{h}{2}.$$

Regra do trapézio

Logo, a regra de quadratura de Newton-Cotes para $n = 2$ é dada por

$$\boxed{Q_2[f] = \frac{h}{2}\Big[f(x_1) + f(x_2)\Big]}$$

Esta regra é conhecida pelo nome de regra do trapézio, por razões que a seguinte figura ilustra claramente.



Regra do trapézio

Erro da regra do trapézio

O erro de quadratura da regra do trapézio é dado por

$$E_2[f] = \frac{1}{2}\int_{x_1}^{x_2} f^{(2)}(\xi_x)(x-x_1)(x-x_2)dx.$$

Tendo em conta que o produto $(x-x_1)(x-x_2)$ não muda de sinal no intervalo (x_1, x_2), vem, aplicando o *Teorema do valor médio para integrais pesados*[3]

$$\begin{aligned} E_2[f] &= \frac{1}{2} f^{(2)}(\eta)\int_{x_1}^{x_2} (x-x_1)(x-x_2)dx \\ &= -\frac{h^3}{12} f^{(2)}(\eta), \end{aligned}$$

para um certo $\eta \in (x_1, x_2)$.

Teorema (Regra do Trapézio e Erro)

Seja f uma função duas vezes continuamente diferenciável num certo intervalo $[x_1, x_2]$ e seja $h = x_2 - x_1$. Então,

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{2}\Big[f(x_1) + f(x_2)\Big] - \frac{h^3}{12} f^{(2)}(\eta)\ ,$$

para um certo $\eta \in (x_1, x_2)$.

[3] Teorema do valor médio para integrais pesados: Sejam $f, g \in C[a, b]$ e g de sinal constante em $[a, b]$. Então, existe $\eta \in [a, b]$ tal que $\int_a^b f(x)g(x)\,dx = f(\eta)\int_a^b g(x)\,dx$.

Caso $n = 3$ - Regra de Simpson

Neste caso, a função integranda f é aproximada pelo polinómio de grau ≤ 2 que a interpola nos três pontos $a = x_1$, $x_2 = x_1 + h$, $x_3 = x_1 + 2h = b$, onde $h = (b - a)/2$. Temos, então, para pesos desta regra

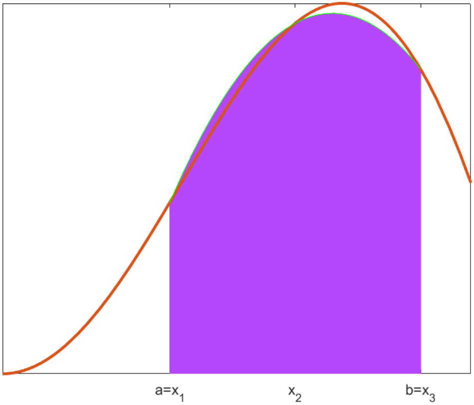
$$w_1 = \int_{x_1}^{x_3} L_1(x)dx = \frac{1}{2h^2}\int_{x_1}^{x_3}(x - x_2)(x - x_3)dx = \frac{h}{3}$$
$$w_2 = \int_{x_1}^{x_3} L_2(x)dx = -\frac{1}{h^2}\int_{x_1}^{x_3}(x - x_1)(x - x_3)dx = \frac{4h}{3}$$
$$w_3 = \int_{x_1}^{x_3} L_2(x)dx = \frac{1}{2h^2}\int_{x_1}^{x_3}(x - x_1)(x - x_2)dx = \frac{h}{3}.$$

Assim, tem-se

$$\boxed{Q_3[f] = \frac{h}{3}\Big[f(x_1) + 4f(x_2) + f(x_3)\Big]} \tag{6}$$

onde $x_i = a + (i - 1)h; i = 1, 2, 3$, com $h = (b - a)/2$. Esta regra de quadratura é conhecida por **regra de Simpson**.

Regra de Simpson



Regra de Simpson

Quanto ao erro de quadratura, tem-se, supondo $f \in C^3[a,b]$,

$$E_3[f] = \frac{1}{3!}\int_{x_1}^{x_3} f^{(3)}(\xi_x)(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)dx.$$

Neste caso, $\Pi_3(x) = (x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)$ muda de sinal em (x_1,x_3), pelo que não podemos aplicar o Teorema do valor médio. Pode, no entanto, provar-se o seguinte resultado (veja, e.g. Valença, M.R., *Análise Numérica*, Univ. Aberta (1996), pp. 211-212): Se $f \in C^4[a,b]$, então

$$E_3(f) = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta).$$

Assim tem-se o seguinte teorema.

Teorema (Regra de Simpson e Erro)

Seja $f \in C^4[a,b]$ e sejam $x_i = a + (i-1)h, i = 1,2,3; h = (b-a)/2$. Então,

$$\int_{a=x_1}^{b=x_3} f(x)dx = \frac{h}{3}\Big[f(x_1) + 4f(x_2) + f(x_3)\Big] - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta)\ ,$$

para um certo $\eta \in (x_1,x_3)$.

O resultado anterior mostra que a regra de Simpson (caso $n=3$ das regras de Newton-Cotes fechadas) tem ordem de precisão 3, ou seja tem uma ordem superior ao que seria de esperar.

De um modo análogo ao que fizemos para deduzir as regras do trapézio e de Simpson, podem deduzir-se regras de Newton-Cotes fechadas para outros valores de n.

Apresentamos, de seguida, uma tabela com os pesos e a expressão do erro das fórmulas de Newton-Cotes (fechadas) para $n = 2, \ldots, 9$.

Para simplificar a tabela, consideramos as fórmulas escritas na forma

$$Q_n[f] = \mathbf{C}_n h \Big[w_1 f_1 + \ldots + w_n f_n \Big]$$

e indicamos, em cada caso, o valor de $\mathbf{C}_n$ e dos coeficientes $w_i; i = 1, \ldots, \lfloor (n+1)/2 \rfloor$; os restantes coeficientes w_i podem ser obtidos por simetria, isto é, $w_{n+1-i} = w_i$.

Regras de Newton-Cotes fechadas

n	$\mathbf{C}_n$	w_1	w_2	w_3	w_4	w_5	$E_n(f)$
2	$\frac{1}{2}$	1					$-\frac{h^3}{12}f^{(2)}(\eta)$
3	$\frac{1}{3}$	1	4				$-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta)$
4	$\frac{3}{8}$	1	3				$-\frac{3h^5}{180}f^{(4)}(\eta)$
5	$\frac{2}{45}$	7	32	12			$-\frac{8h^7}{945}f^{(6)}(\eta)$
6	$\frac{5}{288}$	19	75	50			$-\frac{275h^7}{12\,096}f^{(6)}(\eta)$
7	$\frac{1}{140}$	41	216	27	272		$-\frac{9h^9}{180}f^{(8)}(\eta)$
8	$\frac{7}{17\,280}$	751	3577	1323	2989		$-\frac{8\,183h^9}{518400}f^{(8)}(\eta)$
9	$\frac{4}{14175}$	989	5888	-928	10496	-4540	$-\frac{2368h^{11}}{467775}f^{(10)}(\eta)$

- As regras de Newton-Cotes para $n \geq 9$ têm pesos grandes em valor absoluto, alguns positivos e outros negativos. O uso destas regras é, assim, mais sujeito ao aparecimento de cancelamento subtrativo, pelo que elas são raramente utilizadas.
- A observação da tabela mostra que as regras com n ímpar são exatas para polinómios de grau n (e não apenas de grau $n-1$, como seria de esperar). Não se trata de uma coincidência para as regras aí apresentadas, mas de um resultado válido em geral, como indica o teorema seguinte (cuja demonstração omitiremos).

Teorema

Designemos por $E_n(f)$ o erro da fórmula de Newton-Cotes correspondente ao uso de n abcissas $x_i = a + (i-1)h; i = 1, \ldots, n; h = \frac{b-a}{n-1}$. Então:

- *Se n é par e $f \in C^n[a,b], \exists \eta \in (a,b)$ tal que*

$$E_n(f) = \frac{K_n}{n!} f^{(n)}(\eta), \;\; \mathrm{com}\; K_n = \int_a^b \prod_{i=1}^{n} (x - x_i) dx.$$

- *Se n é ímpar e $f \in C^{n+1}[a,b], \exists \eta \in (a,b)$ tal que*

$$E_n(f) = \frac{\mathcal{K}_n}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\eta), \;\; \mathrm{com}\; \mathcal{K}_n = \int_a^b x \prod_{i=1}^{n} (x - x_i) dx.$$

Regras compostas

A ideia das regras compostas é subdividir o intervalo de integração $[a, b]$ num certo número de subintervalos e aplicar regras simples em subintervalos.

Regra do trapézio composta

Seja $N \in \mathbb{N}$ e sejam $x_i = a + (i-1)h; i = 1, \ldots, N+1$, com $h = (b-a)/N$. Temos, então

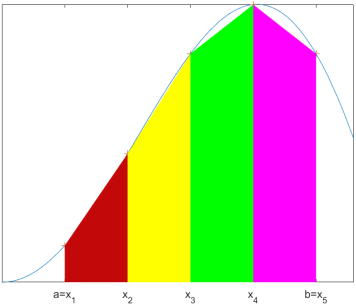
$$\int_{a=x_1}^{b=x_{N+1}} f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx.$$

Usando a regra do trapézio em cada subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$, vem

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \sum_{i=1}^{N} \Big[\frac{h}{2}(f_i + f_{i+1})\Big] \\ &= \frac{h}{2}\Big[(f_1 + f_2) + (f_2 + f_3) + \cdots + (f_{N-1} + f_N) + (f_N + f_{N+1})\Big] \\ &= \frac{h}{2}\Big[f_1 + 2(f_2 + \ldots + f_N) + f_{N+1}\Big]\end{aligned}$$

Nota: Por uma questão de simplicidade, usamos a notação $f_i := f(x_i)$.

A regra anterior é conhecida por **regra do trapézio composta** (com N intervalos) e designada por $T_N[f]$.



Regra do trapézio composta

Erro da regra do trapézio composta

Quanto ao erro desta regra, supondo que $f \in C^2[a,b]$ e tendo em conta a expressão do erro da regra do trapézio, tem-se

$$E_{T_N}[f] := \int_a^b f(x)dx - T_N[f] = \sum_{i=1}^{N} \left(-\frac{h^3}{12} f^{(2)}(\eta_i) \right)$$

$$= -\frac{(b-a)h^2}{12} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f^{(2)}(\eta_i), \;\; \eta_i \in (x_i, x_{i+1}).$$

onde na segunda igualdade se usou o facto de ser $h = \frac{(b-a)}{N}$. Mas,

$$\min_i f^{(2)}(\eta_i) \leq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f^{(2)}(\eta_i) \leq \max_i f^{(2)}(\eta_i)$$

e, como $f^{(2)}$ é contínua, pelo Teorema do Valor Intermédio, podemos concluir que existe $\eta \in [\min \eta_i, \max \eta_i] \subset (a,b)$, tal que $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f^{(2)}(\eta_i) = f^{(2)}(\eta)$. Tem-se, então

$$E_{T_N}[f] = -\frac{(b-a)h^2}{12} f^{(2)}(\eta), \quad \eta \in (a,b).$$

Regra do trapézio composta e erro

Em resumo, tem-se o seguinte resultado.

Teorema (Regra do trapézio composta e erro)

Seja $f \in C^2[a,b]$ *e sejam* $x_i = a + (i-1)h, i = 1, \ldots, N+1,$ *com* $h = \frac{b-a}{N}$, $N \in \mathbb{N}$. *Então, tem-se*

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}\Big[f_1 + 2\left(f_2 + \ldots + f_N\right) + f_{N+1}\Big] - \frac{(b-a)h^2}{12} f^{(2)}(\eta)\,,$$

para um certo $\eta \in (a,b)$.

Nota: O caso $N = 1$ corresponde à regra do trapézio (simples).

Regra de Simpson composta

Consideremos agora o intervalo $[a, b]$ partido num número par $N = 2m$ de subintervalos, isto é, sejam $x_i = a + (i-1)h;\ i = 1, \ldots, 2m+1$, com $h = \frac{b-a}{2m}$. Temos, então

$$\int_{a=x_1}^{b=x_{2m+1}} f(x)dx = \int_{x_1}^{x_3} f(x)dx + \int_{x_3}^{x_5} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{2m-1}}^{x_{2m+1}} f(x)dx$$
$$= \sum_{i=1}^{m} \int_{x_{2i-1}}^{x_{2i+1}} f(x)dx.$$

Usando a regra de Simpson em cada duplo subintervalo $[x_{2i-1}, x_{2i+1}]$, vem

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{m} \left[\frac{h}{3} \left(f_{2i-1} + 4f_{2i} + f_{2i+1} \right) \right]$$
$$= \frac{h}{3} \left[f_1 + 4\left(f_2 + \cdots + f_{2m} \right) + 2\left(f_3 + \cdots + f_{2m-1} \right) + f_{2m+1} \right]$$

A regra anterior é conhecida por regra de Simson composta com $N = 2m$ subintervalos e denotada por S_{2m}.

Nota

O caso $m = 1$ (i.e. $N = 2$) corresponde à regra de Simpson (simples).

Quanto ao erro desta regra, vem, seguindo um raciocínio análogo ao usado na dedução do erro da regra do trapézio composta, tendo em conta agora que $h = \frac{b-a}{2m}$:

$$\begin{aligned}
E_{S_{2m}}[f] &:= \int_a^b f(x)dx - S_{2m}[f] \\
&= -\frac{h^5}{90}\sum_{i=1}^{m} f^{(4)}(\eta_i) \\
&= -\frac{(b-a)h^4}{180}\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} f^{(4)}(\eta_i) \\
&= -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a,b).
\end{aligned}$$

Regra de Simpson composta e erro

Temos, assim, o seguinte teorema.

Teorema (Regra de Simpson composta e erro)

Seja $f \in C^4[a,b]$ *e sejam* $x_i = a + (i-1)h; i = 1, \ldots, 2m+1$*, com* $h = (b-a)/2m$*. Então,*

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\Big[f_1 + 4\,(f_2 + \cdots + f_{2m}) + \\ + 2\,(f_3 + \cdots + f_{2m-1}) + f_{2m+1}\Big] \\ - \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\eta)$$

para um certo $\eta \in (a,b)$.