

Capítulo 8 – Integração Numérica

Neste capítulo faremos uso da aproximação de funções para efetuar, via computador com processamento numérico, a operação clássica do Cálculo Diferencial e Integral, que consiste em se obter o valor de $I = \int_a^b f(x)dx$, onde $[a,b]$ é o **domínio de integração**, $f(x)$ a **função integranda** e a expressão I é denominada de **integral simples e definida**.

Esta operação é emblemática para a atual era dos computadores, pois foi a motivadora da criação do considerado como o primeiro computador eletrônico, denominado de ENIAC I (*Eletronic Numerical Integrator and Computer*) (<https://pt.wikipedia.org/wiki/ENIAC>).

Conceitualmente I possui duas definições clássicas:

Definição 1 - A integral indefinida $\tilde{I} = \int f(x)dx$ é obtida através da função $F(x)$, tal que $F'(x) = f(x)$, então $\tilde{I} = F(x) + C$, onde C é uma constante e $F(x)$ é denominada de **primitiva** ou **antiderivada**.

Da definição anterior, notamos que a integração é a operação inversa da derivação, sendo sua operacionalização tipicamente algébrica e abstrativa.

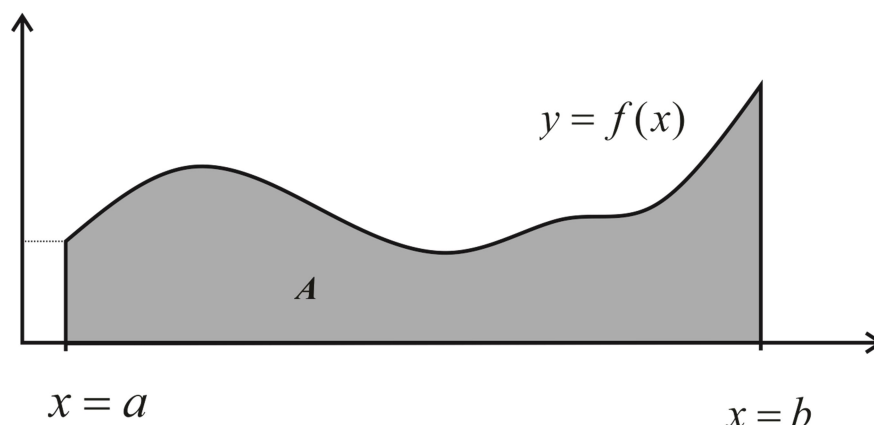
Definição 2 - A integral definida $I = \int_a^b f(x)dx$ é obtida através dos passos:

- Dividimos o intervalo $[a,b]$ em n partes de comprimento $h_i = x_{i+1} - x_i$;
- Obtemos a soma $I_n = \sum_{i=1}^n f(x_i)h_i$;
- Em geral, no limite de n , temos $I = \lim_{n \rightarrow \infty} I_n$.

Esta segunda definição é denominada na literatura por **integral de Riemann**, sendo tipicamente numérica e construtiva. Se $y = f(x)$ for contínua em $[a,b]$ e considerando cada h_i como a base de um retângulo infinitesimal e cada $f(x_i)$ a respectiva altura, então no limite o valor de I será a **área** da região A subentendida pelo segmento do gráfico da $y = f(x)$ situado entre as retas $x = a$ e $x = b$, e o eixo

das abscissas x , conforme Gráfico 8.1.

Gráfico 8.1 – Área exata A limitada pela função $y = f(x)$, $x = a$, $x = b$ e $y = 0$.



Fonte: Elaboração própria

A conexão entre as duas definições de integral é o **Teorema Fundamental do Cálculo (TFC)**, no qual prova-se simplesmente que se a $f(x)$ for contínua em $[a, b]$ e $F(x)$ a sua primitiva, então:

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

Desta forma, o TFC nos liberta de efetuarmos quantidades de adições que tendem ao infinito em troca da determinação da primitiva $F(x)$. Contudo, como é do conhecimento de todo estudante que cursou o primeiro Cálculo, a aplicação do TFC em uma $I = \int_a^b f(x) dx$ qualquer nem sempre é fácil, podendo ser muito difícil ou até impossível, uma vez que:

a) A integranda $y = f(x)$ pode ser apenas uma tabela do tipo:

x	x_1	x_2	\dots	x_{n+1}
$f(x)$	y_1	y_2	\dots	y_{n+1}

b) A integranda $y = f(x)$ pode ter primitiva conhecida porém seu uso ser completamente ineficiente, como por exemplo na integração a seguir com $m = 30$ e $n = 20$:

$$I = \int_a^b \sin^m(x) \cos^n(x) dx = \int_a^b \frac{\sin^{m-1}(x) \cos^{n+1}(x)}{n+m} dx + \frac{m-1}{n+m} \int_a^b \sin^{m-2}(x) \cos^n(x) dx$$

- c) Existem integrandas cujas primitivas são impossíveis de serem expressas em termos de funções elementares, como por exemplo as primitivas de:

$$I = \int_0^1 e^{-x^2} dx, \quad I = \int_2^5 \frac{dx}{\ln(x)}, \quad I = \int_0^1 \operatorname{sen}\left(\frac{\pi x^2}{2}\right) dx$$

Definição 3 - A integral numérica $I = \int_a^b f(x)dx$ consiste em se aplicar o Teorema Fundamental do Cálculo não diretamente na $y = f(x)$ original, mas em aproximadoras da $y = f(x)$.

Os métodos de integração numérica podem ser agrupados em duas famílias, conforme pode ser visto na literatura pertinente, em (Burden; Faires, 2011; Cheney; Kincaid, 2008, Ruggiero; Lopes, 1997), de acordo com a forma de aproximação da função integranda $y = f(x)$:

- 1ª) por interpolação polinomial simples sobre pontos uniformemente distribuídos em $[a,b]$ – Métodos de Newton-Cotes;
- 2ª) por interpolação polinomial sobre pontos predefinidos em $[a,b]$ – Métodos Gaussianos.

Assim, vamos definir e implementar algoritmos para calcular numericamente a integral definida I , com erro máximo controlado, através de aproximações do cálculo da área limitada por $y = f(x)$, $x = a$, $x = b$ e $y = 0$.

8.1 – Integração Numérica de $y = f(x)$ por Métodos de Newton-Cotes

Aqui serão detalhados dois representantes clássicos desta família de métodos de integração numérica.

8.1.1. Método dos Trapézios

Para se estimar o valor de uma $I = \int_a^b f(x)dx$, procedemos como segue:

- Dividimos $[a,b]$ em n subintervalos de comprimento **uniforme** $h = \frac{(b-a)}{n}$;

- Obtemos os $n+1$ valores funcionais (x_i, y_i) , onde $x_1 = a$, $x_{i+1} = x_i + h$ e $y_i = f(x_i)$, ($\forall i = 1, 2, \dots, n$);
- Para cada 2 pontos sucessivos (x_i, y_i) e (x_{i+1}, y_{i+1}) determinamos o seu interpolador polinomial de 1º grau (na forma de Gregory-Newton com diferenças), como:

$$P_i(x) = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{h}(x - x_i)$$

Então, pelo **Teorema Fundamental do Cálculo** obtemos cada área aproximada A_i no intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ que é dada por,

$$A_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_i(x) dx = \frac{h}{2} [y_i + y_{i+1}]$$

Adicionando as áreas correspondentes aos n sub-intervalos teremos a área aproximada total, denotada por T_n ,

$$T_n = \sum_{i=1}^n A_i$$

$$T_n = \frac{h}{2} [y_1 + y_2] + \frac{h}{2} [y_2 + y_3] + \dots + \frac{h}{2} [y_n + y_{n+1}]$$

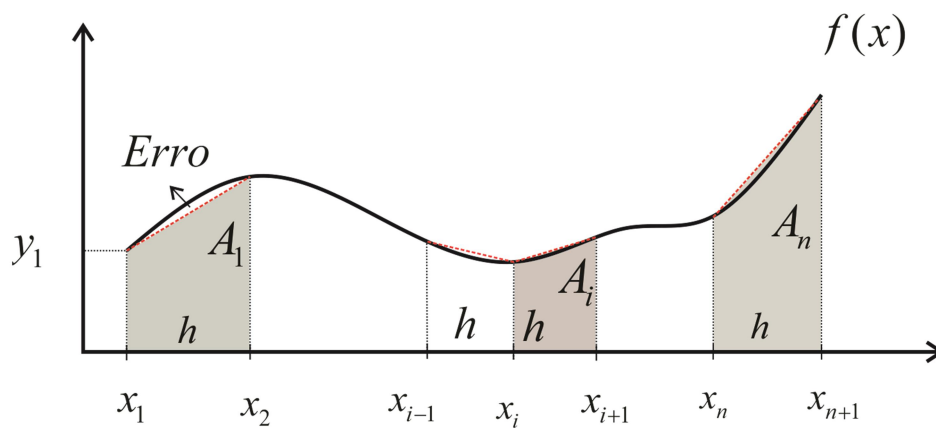
$$T_n = \frac{h}{2} [y_1 + 2y_2 + 2y_3 + \dots + 2y_n + y_{n+1}]$$

$$T_n = \frac{h}{2} \left[y_1 + 2 \sum_{i=2}^n y_i + y_{n+1} \right] \quad (1)$$

$$\text{Finalmente, } I = \int_a^b f(x) dx \cong \sum_{i=1}^n A_i = T_n$$

Observe que cada A_i é a área de um **trapézio** de altura h e bases y_i e y_{i+1} , conforme Gráfico 8.2.

Gráfico 8.2 – Integral de $f(x)$ em $[a, b]$ aproximada por n trapézios.



Fonte: Elaboração própria

Da eq.(1) pode-se demonstrar o Teorema 1: “ $I = \int_a^b f(x)dx = \lim_{n \rightarrow \infty} T_n$ ”.

Exemplo 8.1: Calcule por Trapézios $I = \int_a^b f(x)dx$, onde a $f(x)$ é a função discretizada a seguir:

x_i	0.00	0.25	0.50	0.75	1.00
$f(x_i)$	3	5	8	4	2

Solução:

Temos $n+1=5$ pontos $\Rightarrow n=4$ intervalos e $x_{i+1}-x_i=0.25 \Rightarrow h=0.25$

Aplicando a eq.(1) temos \Rightarrow

$$T_n = (0.25/2)[3+2(5+8+4)+2] = 4.875 \text{ e}$$

$$I \cong T_n = 4.875$$

Conforme pode ser observado, por exemplo no primeiro trapézio da Gráfico 8.2, ocorre uma diferença, ou erro, entre a área deste trapézio e a área exata no domínio $[x_1, x_2]$. Este erro ocorre em todos os demais trapézios, desde que a integranda não seja uma reta.

Na sequência abordaremos como estimar o erro total gerado pelos n trapézios na aproximação de uma integração I pela eq.(1).

Teorema do Erro de Truncamento de T_n :

Definição: “Numa $I = \int_a^b f(x)dx$ se dividirmos o intervalo $[a, b]$ em n partes iguais e aplicarmos Trapézios, o **erro de truncamento** de T_n será:

$$ET_n = \frac{-h^2(b-a)f''(\xi)}{12}, \text{ onde } \xi \in [a, b] \text{ ou}$$

$$ET_n \text{Max} = \frac{h^2(b-a)M}{12} \quad (2)$$

onde $M = \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|$

Demonstração:

Pela interpolação polinomial geral de grau n , conforme vimos no Capítulo 5, temos que o erro do aproximador $P_n(x)$ em relação a $f(x)$ é dado por:

$$R_n(x) = |f(x) - P_n(x)| = \left| \frac{f^{(n+1)}(\xi) \prod_{i=0}^n (x - x_i)}{(n+1)!} \right|$$

No caso da aproximação por interpolação polinomial com $n = 1$, usada no método dos Trapézios, $f(x) = P_1(x) + R_1(x)$:

$$f(x) = P_1(x) + \frac{f''(\xi)(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(1+1)!}$$

Então, $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(P_1(x) + \frac{f''(\xi)(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(1+1)!} \right) dx$, com $P_1(x)$ definido em $x \in [x_i, x_{i+1}]$.

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = A_i + ET_i(\xi),$$

onde $A_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_1(x)dx = \frac{h}{2}[y_i + y_{i+1}]$ e $ET_i(\xi) = \frac{f''(\xi)}{(2)!} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i)(x - x_{i+1})dx$.

Desenvolvendo e integrando a parcela do erro $ET_i(\xi)$, temos

$$ET_i(\xi) = \frac{f''(\xi)}{(2)!} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x^2 - (x_i + x_{i+1})x + x_i x_{i+1}) dx = \frac{f''(\xi)}{(2)!} \left(\frac{x^3}{3} - (x_i + x_{i+1})\frac{x^2}{2} + x_i x_{i+1} x \right) \Bigg|_{x_i}^{x_{i+1}}$$

Então, o erro em cada sub-intervalo é dado por:

$$ET_i(\xi) = \frac{f''(\xi)}{(2)!} \left(\frac{x_{i+1}^3 - x_i^3}{3} - (x_i + x_{i+1}) \frac{x_{i+1}^2 - x_i^2}{2} + x_i x_{i+1} (x_{i+1} - x_i) \right)$$

substituindo $x_{i+1} = x_i + h$

$$ET_i(\xi) = \frac{f''(\xi)}{(2)!} \left(\frac{(x_i + h)^3 - x_i^3}{3} - (x_i + x_i + h) \frac{(x_i + h)^2 - x_i^2}{2} + x_i (x_i + h) (x_i + h - x_i) \right)$$

Por meio de algumas simplificações algébricas, temos que:

$$ET_i(\xi) = \frac{f''(\xi)}{(2)!} \left(\frac{h^3}{3} - \frac{h^3}{2} \right) = -\frac{f''(\xi)}{(2)!} \frac{h^3}{6} = -\frac{f''(\xi)h^3}{12}$$

Então esta expressão do erro $ET_i(\xi)$ fica independente da posição inicial x_i de cada intervalo, e depende apenas do h :

$$ET_i(\xi) = -\frac{f''(\xi)h^3}{12}$$

Então, tomando o erro de truncamento em todo o intervalo $[a, b]$ como a soma dos erros de cada trapézio, temos:

$$ET_n = ET_1 + ET_2 + ET_3 + \dots + ET_n$$

$$ET_n = -\frac{f''(\xi)h^3}{12} - \frac{f''(\xi)h^3}{12} - \frac{f''(\xi)h^3}{12} + \dots - \frac{f''(\xi)h^3}{12}$$

$$ET_n = -\frac{f''(\xi)h^3n}{12}$$

Como $n = \frac{(b-a)}{h}$, e tomando o majorante de $f''(\xi)$, em valor absoluto, temos

$$ET_n \text{ Max} = \frac{\text{Max} |f''(x)|}{12} h^2 (b-a) \text{ com } x \in [a, b].$$

Exemplo 8.2: Determine o n mínimo para que o erro de truncamento máximo seja

menor que $\varepsilon = 10^{-6}$ ao efetuar $I = \int_1^6 \frac{1}{1+x} dx$ pelo método dos Trapézios.

Solução:

Temos $f(x) = (1+x)^{-1} \Rightarrow f'(x) = -(1+x)^{-2} \Rightarrow f''(x) = 2(1+x)^{-3}$

$$M = \max_{x \in [1,6]} |f''(x)| = f''(1) = \frac{2}{8} = 0.25$$

Aplicando a eq. (2), temos

$$10^{-6} \cong \frac{h^2 * 5 * 0.25}{12} \Rightarrow h \cong 0.0030984$$

$$n = \frac{(6-1)}{h} = 1613.7, \text{ tomando o próximo inteiro temos } n = 1614.$$

É recomendado utilizarmos n como potência de 2, para obter valores de h exatos, na base decimal e binária, e portanto valores de x_i com mais precisão.

A aproximação T_n da integral I Exemplo 8.2 obtida pelo método dos trapézios com $n=1614$ subdivisões do intervalo $[1, 6]$ em precisão simples de 8 dígitos significativos é $T_n=1.25276315$, integral exata $I=1.25276297$, Erro exato = $1.8 \cdot 10^{-7}$, ou seja, com **Erro de truncamento** inferior à $\varepsilon = 10^{-6}$.

Para calcular o Erro **Total**, sobre o valor da integral aproximada T_n , determinando também a influencia dos **Erros de Arredondamento**, podemos obter o mesmo T_n^* , com precisão de 16 dígitos significativos, com o mesmo número $n=1614$ de subdivisões, portanto com o mesmo Erro de Truncamento. Podemos calcular também o Erro Total Exato $|T_n - I_e|$ e o Erro Estimado $|T_n - T_{2n}|$, ambos usando precisão de 16 dígitos significativos.

Devemos notar que o teorema 1, quando utilizado com $n \rightarrow \infty$, pode ser inválido quando aplicado com precisão finita, pois os arredondamentos podem se acumular e desestabilizar os resultados, nestes caso existe um n limite ótimo onde se consegue o resultado com menor erro total, mas que não é conhecido previamente. Para comprovar esta situação, vamos efetuar por Trapézios a integral do **Exemplo 8.2** aumentando sucessivamente o valor do n e avaliando o comportamento dos resultados obtidos. Os testes foram feitos na linguagem C, com variáveis de 32 e 64 *bits* resultando em:

Para $n = 1614$:

Em precisão de 8 dígitos significativos $T_n = 1.25276315$

Em precisão de 16 dígitos significativos $T_n^* = 1.25276315211032$

Erro estimado sobre $T_n = 1.3 \cdot 10^{-7}$ (Erro estimado compara T_n com T_{2n})

Erro exato sobre $T_n = 1.8 \cdot 10^{-7}$ (Erro exato compara T_n com I_e)

Para $n = 2048$:

Em precisão de 8 dígitos significativos $T_n = 1.25276329$

Em precisão de 16 dígitos significativos $T_n^* = 1.25276308253485$

Erro estimado sobre $T_n = 8.5 * 10^{-8}$

Erro exato sobre $T_n = 2.8 * 10^{-8}$ (arredondamentos não influenciam T_n)

Para $n = 4096$:

Em precisão de 8 dígitos significativos $T_n = 1.25276327$

Em precisão de 16 dígitos significativos $T_n^* = 1.2527629970052434$

Erro estimado sobre $T_n = 2.7 * 10^{-7}$

Erro exato sobre $T_n = 3.0 * 10^{-7}$ (arredondamentos começam influenciar T_n)

Para $n = 32768$:

Em precisão de 8 dígitos significativos $T_n = 1.252762675$

Em precisão de 16 dígitos significativos $T_n^* = 1.2527629689408351$

Erro estimado sobre $T_n = 2.9 * 10^{-7}$

Erro exato total sobre $T_n = 2.9 * 10^{-7}$

Para $n = 65536$:

Em precisão de 8 dígitos significativos $T_n = 1.25275445$

Em precisão de 16 dígitos significativos $T_n^* = 1.2527629686067425$

Erro estimado sobre $T_n = 8.5 * 10^{-6}$

Erro exato total sobre $T_n = 8.5 * 10^{-6}$ (arredondamentos alteram resultados).

Para $n = 131072$:

Em precisão de 8 dígitos significativos $T_n = 1.25279605$

Em precisão de 16 dígitos significativos $T_n^* = 1.252762968523208$

Erro estimado sobre $T_n = 3.3 * 10^{-5}$

Erro exato total sobre $T_n = 3.3 * 10^{-5}$ (arredondamentos alteram resultados)

Para $n = 262144$:

Em precisão de 8 dígitos significativos $T_n = 1.25270736$

Em precisão de 16 dígitos significativos $T_n^* = 1.2527629685023201$

Erro estimado sobre $T_n = 5.6 * 10^{-5}$

Erro exato total sobre $T_n = 5.6 * 10^{-5}$ (arredondamentos alteram resultados)

Para $n = 4194304$:

Em precisão de 8 dígitos significativos $T_n = 1.274151683$

Em precisão de 16 dígitos significativos $T_n^* = 1.2527629684954742$

Erro estimado sobre $T_n = 2.1 * 10^{-2}$

Erro exato total sobre $T_n = 2.1 * 10^{-2}$ (resultados alterados drasticamente)

Obs.: Em precisão de 16 dígitos os erros de arredondamento influenciam muito menos como podemos ver a seguir:

- Erro exato sobre T_n^* calculado com $n = 1614$ e precisão 16 dígitos é $1.7 * 10^{-7}$ (menor $\varepsilon = 10^{-6}$);
- Erro exato sobre T_n^* calculado com $n = 4194304$ e precisão 16 dígitos é $1.1 * 10^{-13}$.

Percebe-se que existe um n limite ótimo, que nesse caso é em torno de $n = 2048$, onde ocorrem os menores erros, no caso de cálculos com precisão de 8 dígitos.

Se aumentamos o valor de n , além de 1614, reduzimos os erros de truncamento para valores menores que 10^{-6} , mas aumentamos o erro de arredondamento acumulado.

Para se contornar este problema podemos efetuar algumas aproximações para T_n , com diferentes valores de n , e analisar a tendência de evolução dos resultados do método dos Trapézios via extrapolação de T_n .

Uma forma de análise pode ser efetuada através da extrapolação para o **limite de Romberg**, que consiste em:

- Efetuar k aproximações iniciais por Trapézios T_i^1 ($j=1$), com sucessivos espaçamentos h_i , iniciando por $h_1 = h$ e sendo reduzidos pela metade $h_i = h/2^{i-1}$ a cada aproximação i , obtendo respectivamente $T_1^1, T_2^1, \dots, T_k^1$, para $i = 1, \dots, k$;
- Gerar as j aproximações por extrapolação

$$T_i^j = \frac{4^{j-1}T_i^{j-1} - T_{i-1}^{j-1}}{4^{j-1} - 1} \quad (3)$$

para $j = 2, 3, \dots, k$ e $i = j, \dots, k$.

Daí resulta o:

Teorema (Romberg): “ $\lim_{k \rightarrow \infty} T_i^k = \int_a^b f(x)dx$ ”.

Exemplo 8.3: Efetuar $\int_0^1 e^x dx$ por Trapézios e Romberg, com $k = 5$ aproximações, iniciando com, $h = 0.25$ ($n = 4$ subintervalos) e precisão de 16 dígitos.

Solução:

Aplicando a eq. (2), inicialmente com $n = 4$ ($h = 0.25$), para gerar a primeira coluna de resultados e a eq.(3) para gerar os elementos das demais colunas, resulta:

$i \backslash j$	h_i	1	2	3	4	5
1	$h / 1$	1.727221904557517				
2	$h / 2$	1.720518592164302	1.718284154699897			
3	$h / 4$	1.718841128579994	1.718281974051892	1.718281828675358		
4	$h / 8$	1.718421660316327	1.718281837561771	1.718281828462430	1.718281828459050	
5	$h / 16$	1.718316786850094	1.718281829028016	1.718281828459099	1.718281828459046	1.718281828459046

Como os últimos resultados extrapolados são iguais, então

$T_5^5 = 1.718281828459046$ é o valor da integral com precisão de 16 dígitos, que é o próprio valor exato $I_e = e^1 - 1$.

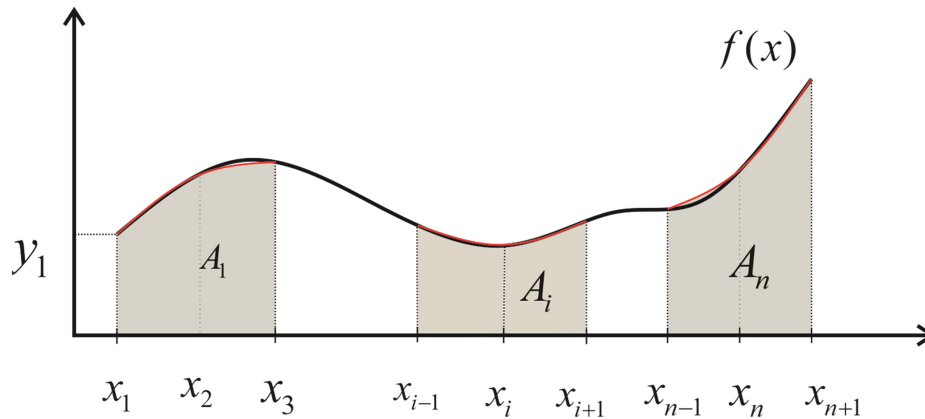
No Caderno de Algoritmos temos o arquivo **Cap8exem8.3TnRomberg.m** com o Algoritmo de Romberg.

A seguir, apresentaremos um método que, em geral, fornece resultados mais exatos que o método dos Trapézios para uma mesma quantidade de avaliações da integranda.

8.1.2. Método de Simpson

No método dos Trapézios usamos dois pontos sucessivos para interpolar a integranda com uma reta. No método de Simpson usaremos três pontos sucessivos para interpolar $y = f(x)$ por uma parábola $P_2(x)$, conforme Gráfico 8.3.

Gráfico 8.3 – Integral de $f(x)$ entre a e b aproximada por Simpson, com áreas A_i a cada dois sub-intervalos $[x_{i-1}, x_{i+1}]$.



Fonte: Elaboração própria

Para efetuar $I = \int_a^b f(x)dx$ por Simpson procede-se da seguinte maneira:

1º) Dividir $[a, b]$ em n (**inteiro par**) partes iguais de comprimento $h = \frac{b-a}{n}$;

2º) Para cada três pontos sucessivos, (x_{i-1}, y_{i-1}) , (x_i, y_i) e (x_{i+1}, y_{i+1}) , igualmente espaçados com intervalo $h = (x_i - x_{i-1}) = (x_{i+1} - x_i)$, obter seu único polinômio interpolador, por exemplo por Newton com diferenças finitas ascendentes, conforme segue:

$$P_2(x) = y_{i-1} + \frac{\bar{\Delta}y_{i-1}(x-x_{i-1})}{1!h^1} + \frac{\bar{\Delta}^2y_{i-1}(x-x_{i-1})(x-x_i)}{2!h \cdot h}$$

como $\bar{\Delta}y_{i-1} = (y_i - y_{i-1})$

$$\bar{\Delta}^2y_{i-1} = \bar{\Delta}^1y_i - \bar{\Delta}^1y_{i-1} = (y_{i+1} - y_i) - (y_i - y_{i-1}) = (y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1})$$

Substituindo x por t normalizado por h , onde

$$t = \frac{(x - x_{i-1})}{h} \text{ e}$$

$$(t-1) = \frac{(x-x_{i-1})}{h} - 1 = \frac{(x-(x_{i-1}+h))}{h} = \frac{(x-x_i)}{h}$$

$$\text{Teremos } P_2(t) = y_{i-1} + \frac{\bar{\Delta}y_{i-1}(t)}{1!} + \frac{\bar{\Delta}^2y_{i-1}(t)(t-1)}{2!}$$

3º) Pelo Teorema Fundamental do Cálculo, integrando o interpolador polinomial $P_2(t)$ teremos uma área A_i para cada dois sub-intervalos $[x_{i-1}, x_{i+1}]$.

$$A_i = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} P_2(x)dx = \int_0^2 P_2(t)hdt$$

Pois, $x = x_{i-1} \rightarrow t = 0$, $x = x_{i+1} \rightarrow t = 2$ e $dx = h \cdot dt$.

Substituindo $P_2(t)$ em A_i teremos,

$$A_i = \int_0^2 P_2(t)hdt = \int_0^2 \left(y_{i-1} + \frac{\bar{\Delta}y_{i-1}(t)}{1!} + \frac{\bar{\Delta}^2y_{i-1}(t)(t-1)}{2!} \right) hdt$$

Assim,

$$A_i = h \left(y_{i-1} \int_0^2 dt + \frac{\bar{\Delta}y_{i-1}}{1!} \int_0^2 tdt + \left(\frac{\bar{\Delta}^2y_{i-1}}{2!} \right) \int_0^2 (t)(t-1)dt \right)$$

$$A_i = h \left(y_{i-1} t \Big|_0^2 + \frac{\bar{\Delta}y_{i-1}}{1!} \frac{t^2}{2} \Big|_0^2 + \left(\frac{\bar{\Delta}^2y_{i-1}}{2!} \right) \left(\frac{t^3}{3} - \frac{t^2}{2} \right) \Big|_0^2 \right)$$

substituindo os valores das diferenças finitas ascendentes, teremos:

$$A_i = h \left((y_{i-1})2 + \left(\frac{y_i - y_{i-1}}{1!} \right) 2 + \left(\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{2!} \right) \left(\frac{2^3}{3} - \frac{2^2}{2} \right) \right)$$

$$A_i = \frac{h}{3} (y_{i+1} + 4y_i + y_{i-1})$$

4º) Então, a área total S_n é dada pela soma de todas as áreas A_i , $i = 2, 4, \dots, n$:

$$S_n = \frac{h}{3} (y_1 + 4y_2 + y_3) + \frac{h}{3} (y_3 + 4y_4 + y_5) + \dots + \frac{h}{3} (y_{n-1} + 4y_n + y_{n+1})$$

$$S_n = \frac{h}{3} [(y_1 + y_{n+1}) + 4(y_2 + y_4 + \dots + y_n) + 2(y_3 + y_5 + \dots + y_{n-1})]$$

$$S_n = \frac{h}{3} \left(y_1 + 4 \underbrace{\sum_{i=2}^{n(\text{passo } 2)} y_i}_{\text{índices pares}} + 2 \underbrace{\sum_{i=3}^{n-1(\text{passo } 2)} y_i}_{\text{índices ímpares}} + y_{n+1} \right) \quad (4)$$

Esta é a fórmula de Simpson para cálculo aproximado da integral definida,

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

Exemplo 8.4: Efetue por Simpson $I = \int_0^3 f(x)dx$, onde $f(x)$ é uma função discreta, conforme tabela numerica a seguir:

i	1	2	3	4	5	6	7
x_i	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0
$y_i = f(x_i)$	4	6	7.5	8	5	3	2

Solução:

Temos: $h = x_{i+1} - x_i = 0.5$; $n = 6$ (par)

Aplicando a eq. (4), temos

$$S_n = \frac{0.5}{3} [(4+2) + 4(6+8+3) + 2(7.5+5)] = 16.5$$

Logo, $I = \int_0^3 f(x)dx \cong 16.5$

Considerações:

1ª) Simpson, via de regra, fornece resultados mais precisos que Trapézios para um mesmo n . Novamente exige uma estimativa para n mínimo, pelos mesmos motivos do Trapézios.

2ª) Para se determinar um n mínimo pode-se

(i) tomar o limite superior do truncamento de Simpson, que é dado por:

$$ES_n = \frac{-h^4(b-a)f^{iv}(\xi)}{180}, \quad \xi \in [a, b]$$

E utilizar o majorante da $f^{iv}(x)$ em $[a,b]$, resultando em:

$$ES_n Max = \frac{h^4(b-a)M}{180}, \text{ onde } M = \max_{x \in [a,b]} |f^{iv}(x)| \quad (5)$$

(ii) pode-se também melhorar os resultados através de tentativas sucessivas (com $h_{\text{novo}} = h_{\text{velho}} / 2$) e analisar o comportamento dos resultados;

(iii) Como não existe uma extrapolação específica para o método de Simpson, podem ser aplicadas extrapolação genéricas, como a de Richardson ou de Aitken. Porém, estas extrapolações normalmente contribuem menos que o refino direto do espaçamento h .

Exemplo 8.5: Determine o n mínimo para não cometer erro superior à $\varepsilon = 10^{-6}$ ao se

efetuar por Simpson a $I = \int_1^6 (1+x)^{-1} dx$.

Solução:

Como

$$f(x) = (1+x)^{-1} \Rightarrow f'(x) = (-1)(1+x)^{-2} \Rightarrow$$

$$f''(x) = (-1)(-2)(1+x)^{-3} \Rightarrow f'''(x) = (-1)(-2)(-3)(1+x)^{-4} \Rightarrow$$

$$f^{iv}(x) = (-1)(-2)(-3)(-4)(1+x)^{-5}$$

$$f^{iv}(x) = 4!(1+x)^{-5} \Rightarrow f^{iv}(x) = \frac{24}{(1+1)^5} = 0.75$$

Aplicando na eq. (5) \Rightarrow

$$10^{-6} = \frac{h^4(5)0.75}{180} \Rightarrow h = 0.0832358$$

$$n = \frac{5}{h} = 60.07028... \Rightarrow n = 60 \text{ (recomenda-se usar } n = 64 = 2^6 \text{)}$$

Obs.: Destacamos que, conforme resultado do exemplo 8.2, para esta mesma integral, o método dos Trapézios demanda um $n = 1614$.

Considerações sobre os métodos de Newton-Cotes

Os métodos de Newton-Cotes, apesar de serem conceitualmente simples, podem exigir alto volume de operações aritméticas em muitas integrais, mesmo se utilizarmos os aceleradores de Romberg, Richardson ou Aitken. Além disso, por necessitarem dos valores de $f(a)$ e $f(b)$, não são aplicáveis em integrais impróprias com descontinuidades nos extremos do intervalo de integração, ou com

extremos infinitos do tipo:

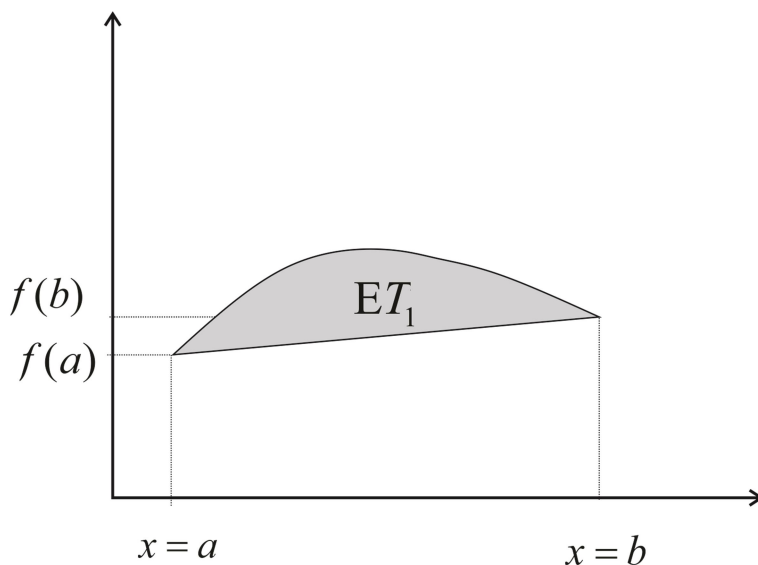
$$\int_a^{\infty} \quad \int_{-\infty}^b \quad \int_{-\infty}^{\infty}$$

Na sequência, vamos apresentar uma metodologia de integração numérica que supre estas deficiências dos métodos Newtonianos.

8.2– Integração Numérica Gaussiana ou Quadratura Gaussiana

Considere que desejamos obter numericamente uma $I = \int_b^a f(x)dx$ hipotética efetuando apenas dois cálculos de valores da integranda $y = f(x)$. Por consequência, só nos resta aplicarmos um único Trapézio, passando uma única reta pelos extremos $[a, b]$ do intervalo e admitir um erro de truncamento muito elevado, como o erro destacado em cinza no exemplo da Gráfico 8.4.

Gráfico 8.4 – Erro da aproximação T_1 por Trapézios com $m = 2$ pontos ($n = 1$)

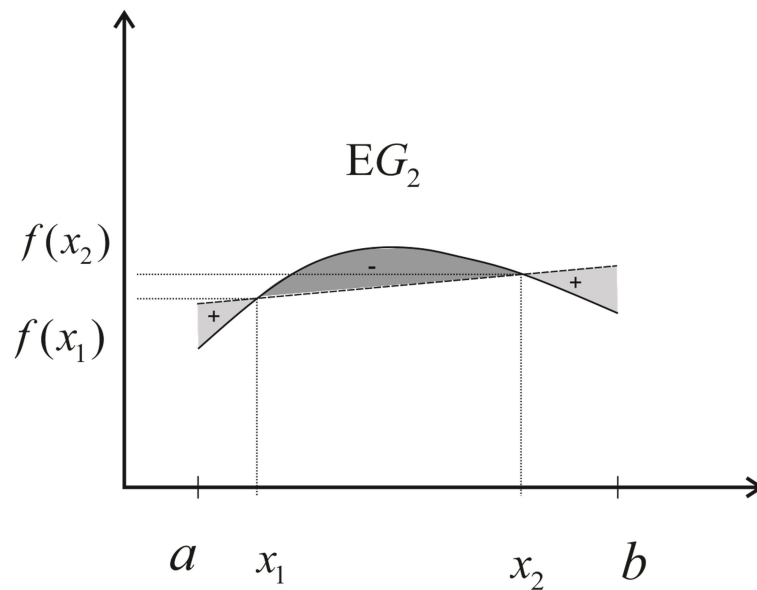


Fonte: Elaboração própria

O desafio fundamental é, se mantidos apenas os cálculos de valores da $y = f(x)$ em $m = 2$ pontos, seria possível diminuir o erro de truncamento gerado pelo método dos trapézios da Gráfico 8.4. A resposta de Gauss para esta questão é positiva, desde que a determinação dos dois valores funcionais que definirão a reta aproximadora não sejam fixados nos extremos do intervalo $[a, b]$, mas em pontos

internos adequadamente escolhidos (x_1 e x_2), como os da Gráfico 8.5 a seguir.

Gráfico 8.5 – Erro da aproximação G_2 por Gauss-Legendre com $m = 2$ pontos



Fonte: Elaboração própria

Observe que a reta aproximadora tracejada, proposta por Gauss-Legendre na Gráfico 8.5, compensa os erros, pois em parte a sua integração G_2 gera valores a mais (destacados com +) e em parte gera valores a menos (destacados com -), de modo que a soma deste erros EG_2 seja bem menor que o erro gerado no método dos Trapézios ET_1 , ambos obtidos com $m = 2$ pontos.

Na quadratura Gaussiana os métodos de integração de $I = \int_b^a f(x)dx$ são desenvolvidos de modo a se obter resultados exatos quando as integrandas forem substituídas por **polinômios de grau m crescente** e não devido a subdivisão do domínio $[a, b]$ em partes iguais com polinômios de grau fixo, como feito nos métodos Newtonianos.

Inicialmente, vamos padronizar o domínio de integração $[a, b]$ fixando-o em $[-1, +1]$ através da conhecida mudança de variáveis:

$$x(t) = ((b-a)/2)t + ((b+a)/2) \Rightarrow dx = ((b-a)/2)dt$$

Daí,

$$I = \int_a^b f(x)dx = ((b-a)/2) \int_{-1}^1 \underbrace{f\left(\left((b-a)/2\right)t + \left((b+a)/2\right)\right)}_{g(t)} dt \quad (5)$$

E por consequência, os métodos Gaussianos são aplicados em integrais normalizadas $\int_{-1}^1 g(t)dt$ e o resultado final multiplicado pelo fator $(b-a)/2$ para se obter $I = \int_a^b f(x)dx$.

A seguir desenvolveremos dois métodos típicos de quadratura Gaussiana.

8.2.1- Método de Gauss-Legendre

Da soma de Riemann, aplicada no intervalo $[-1, +1]$, temos que

$$I = \int_{-1}^1 g(t)dt \cong \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} g(t_{(m,k)}) = G_m \quad (6)$$

onde os $2m$ parâmetros indeterminados $C_{(m,k)}$ e $t_{(m,k)}$ são denominados respectivamente de “pesos” e “nós”, e no método de Gauss-Legendre são obtidos de modo que a G_m forneça resultados exatos para a I quando a integranda $g(t) = f(x(t))$ for um polinômio de grau até $2m-1$. Para tanto, forçamos a integração de $2m$ monômios $\{1, t, t^2, \dots, t^{2m-1}\}$, via eq. (6), de modo que G_m seja exata.

$$\text{Assim, } \int_{-1}^1 g(t)dt = \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} g(t_{(m,k)}), \quad \text{com } g(t) = t^i, \quad \text{para } i = 0, 1, 2, \dots, 2m-1$$

resultam as seguintes equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{-1}^1 1 \cdot dt = \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} g(t_{(m,k)}) \Rightarrow 2 = C_{(m,1)} \cdot 1 + C_{(m,2)} \cdot 1 + \dots + C_{(m,m)} \cdot 1 \\ \int_{-1}^1 t \cdot dt = \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} g(t_{(m,k)}) \Rightarrow 0 = C_{(m,1)} t_{(m,1)} + C_{(m,2)} t_{(m,2)} + \dots + C_{(m,m)} t_{(m,m)} \\ \int_{-1}^1 t^2 \cdot dt = \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} g(t_{(m,k)}) \Rightarrow 2/3 = C_{(m,1)} (t_{(m,1)})^2 + C_{(m,2)} (t_{(m,2)})^2 + \dots + C_{(m,m)} (t_{(m,m)})^2 \\ \int_{-1}^1 t^3 \cdot dt = \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} g(t_{(m,k)}) \Rightarrow 0 = C_{(m,1)} (t_{(m,1)})^3 + C_{(m,2)} (t_{(m,2)})^3 + \dots + C_{(m,m)} (t_{(m,m)})^3 \\ \vdots \\ \int_{-1}^1 t^{2m-2} \cdot dt = \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} g(t_{(m,k)}) \Rightarrow 2/(2m-1) = C_{(m,1)} (t_{(m,1)})^{2m-2} + C_{(m,2)} (t_{(m,2)})^{2m-2} + \dots + C_{(m,m)} (t_{(m,m)})^{2m-2} \\ \int_{-1}^1 t^{2m-1} \cdot dt = \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} g(t_{(m,k)}) \Rightarrow 0 = C_{(m,1)} (t_{(m,1)})^{2m-1} + C_{(m,2)} (t_{(m,2)})^{2m-1} + \dots + C_{(m,m)} (t_{(m,m)})^{2m-1} \end{array} \right. \quad (7)$$

Este sistema de equações não lineares é de ordem $2m$ e cuja solução, de grande dificuldade para ser obtida, fornece os parâmetros $C_{(m,k)}$ e $t_{(m,k)}$. Por exemplo, para $m = 2$ a expressão (7) torna-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{(2,1)} (t_{(2,1)})^0 + C_{(2,2)} (t_{(2,2)})^0 = 2/1 \\ C_{(2,1)} (t_{(2,1)})^1 + C_{(2,2)} (t_{(2,2)})^1 = 0 \\ C_{(2,1)} (t_{(2,1)})^2 + C_{(2,2)} (t_{(2,2)})^2 = 2/3 \\ C_{(2,1)} (t_{(2,1)})^3 + C_{(2,2)} (t_{(2,2)})^3 = 0 \end{array} \right.$$

A solução do sistema anterior pelo método de Newton, apresentado no capítulo 4, fornece (em *double*):

$$C_{(2,1)} = 1.000000000 \text{ e } t_{(2,1)} = +0.577350269189626$$

$$C_{(2,2)} = 1.000000000 \text{ e } t_{(2,2)} = -0.577350269189626$$

Generalizando a integração numérica de Gauss-Legendre para o intervalo $[a, b]$,

$I = \int_a^b f(x) dx$, aplicamos a eq. (6) na eq. (5), para gerar a aproximação G_m :

$$I = \int_a^b f(x) dx = ((b-a)/2) \int_{-1}^1 \underbrace{f(x(t))}_{g(t)} dt \cong G_m$$

onde

$$G_m = ((b-a)/2) \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} \underbrace{f(x(t_{(m,k)}))}_{g(t)} \quad (8)$$

Exemplo 8.6: Determine $I = \int_0^1 e^x dx$ pelo método de Gauss-Legendre com $m = 2$ pontos.

Solução:

Aplicando diretamente a eq. (8) com $a=0$ e $b=1$ resulta:

m	$t_{(m,k)}$	$C_{(m,k)}$
2	$t_{(2,1)} = -1/\sqrt{3}$	$C_{(2,1)} = 1$
	$t_{(2,2)} = 1/\sqrt{3}$	$C_{(2,2)} = 1$

$$G_m = ((b-a)/2) \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} f(x_k) = ((b-a)/2) \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} y_k$$

k	$t_{(m,k)}$	$x_k = ((b-a)/2)t_{(m,k)} + ((b+a)/2)$	$y_k = f(x_k)$
1	$-1/\sqrt{3}$	0.211324865405187	1.23531360053585
2	$1/\sqrt{3}$	0.788675134594813	2.20047915547916

$$G_m = ((b-a)/2) [C_{(2,1)} f(x_1) + C_{(2,2)} f(x_2)]$$

$$G_m = \frac{(1-0)}{2} [1 \cdot 1.23531360053585 + 1 \cdot 2.20047915547916]$$

$$I \cong G_m = 1.71789637800750$$

$$I_e = 1.71828182845905 \quad (\text{Integral Exata } I_e = e^x \Big|_0^1)$$

Na tabela 8.1 abaixo estão listados os valores de $t_{(m,k)}$ e $C_{(m,k)}$, para $m = 1$ até 10, obtidos resolvendo o sistema não linear (7), em precisão *double*.

Tabela 8.1 – Valores de $t_{(m,k)}$ e $C_{(m,k)}$ para integração de Gauss-Legendre

m	$\mp t_{(m,k)}$	$C_{(m,k)}$
1	0	2
2	$1/\sqrt{3}$	1
3	0 $\sqrt{3/5}$	8/9 5/9
4	0.3399810435848562648 0.8611363115940525752	0.65214515486254614263 0.34785484513745385737
5	0.0000000000000000000 0.53846931010568309104 0.90617984593866399280	128/225 0.47862867049936646804 0.23692688505618908751
6	0.23861918608319690863 0.66120938646626451366 0.93246951420315202781	0.46791393457269104739 0.36076157304813860757 0.17132449237917034504
7	0.0000000000000000000 0.40584515137739716691 0.74153118559939443986 0.94910791234275852453	512/1225 0.38183005050511894495 0.27970539148927666790 0.129484966168869693271
8	0.183434642495650 0.525532409916329 0.796666477413627 0.960289856497536	0.362683783378369 0.313706645877885 0.222381034453374 0.101228536290377
9	0 0.324253423403809 0.613371432700591 0.836031107326639 0.968160239507622	0.330239355001305 0.312347077039964 0.260610696402964 0.180648160694839 0.0812743883615805
10	0.148874338981631 0.433395394129247 0.679409568299024 0.865063366688989 0.973906528517168	0.295524224714756 0.269266719309977 0.219086362516008 0.149451349150562 0.0666713443086937

Para fins didáticos apresentamos a tabela 8.2 com precisão de calculadoras científicas.

Tabela 8.2 – Valores de $t_{(m,k)}$ e $C_{(m,k)}$ para integração de Gauss-Legendre, com precisão de calculadoras e $m = 1$ até 5.

m	$t_{(m,k)}$	$C_{(m,k)}$
1	$t_1 = 0$	$C_1 = 2$
2	$t_1 = -\sqrt{3}^{-1}$ $t_2 = \sqrt{3}^{-1}$	$C_1 = 1$ $C_1 = 1$

3	$t_1 = -\sqrt{3/5}$ $t_2 = 0$ $t_3 = \sqrt{3/5}$	$C_1 = 5/9$ $C_2 = 8/9$ $C_3 = 5/9$
4	$t_1 = -0.861136312$ $t_2 = -0.339981044$ $t_3 = +0.339981044$ $t_4 = +0.861136312$	$C_1 = 0.347854845$ $C_2 = 0.652145155$ $C_3 = 0.652145155$ $C_4 = 0.347854845$
5	$t_1 = -0.906179846$ $t_2 = -0.538469310$ $t_3 = 0$ $t_4 = +0.538469310$ $t_5 = +0.906179846$	$C_1 = 0.236926885$ $C_2 = 0.478628670$ $C_3 = 0.568888889$ $C_4 = 0.478628670$ $C_5 = 0.236926885$

DESTAQUE Os valores dos m “nós” $t_{(m,k)}$ são as raízes dos polinômios ortogonais de Legendre de grau m (Applied Numerical Methods, Brice Carnahan, H.A. Luther and James O. Wilkes, Wiley, 1990), distribuídas simetricamente no intervalo normalizado $[-1, +1]$. Assim, obtidos os valores de $t_{(m,k)}$, via determinação das raízes dos polinômios ortogonais de Legendre de grau m (https://pt.wikipedia.org/wiki/Polin%C3%B4mios_de_Legendre), o sistema (7), de $2m$ equações, torna-se linear e permite a obtenção dos m valores dos “pesos” $C_{(m,k)}$ usando as suas primeiras m equações.**FIMDESTAQUE**

LINK Os polinômios de Legendre podem ser obtidos genericamente para qualquer grau $m = (n+1)$ através de relações de recorrência, partindo de dois polinômios conhecidos de graus inferiores, $P_n(x)$ e $P_{n-1}(x)$, conforme relações:

$$P_{n+1}(x) = ((2n+1) * x * P_n(x) - n * P_{n-1}(x)) / (n+1)$$

Para obter os coeficientes temos as seguintes recorrências, para cada grau n :

- grau $n = 1 \rightarrow a_{(n,1)} = 0$; $a_{(n,2)} = 0$; ($p_1 = 0 + 1x$)

- grau $n = 2 \rightarrow a_{(n,1)} = -1/2$; $a_{(n,2)} = 0$; $a_{(n,3)} = 3/2$; ($p_2 = -1 + 0x + 3x^2$)

- graus $n = 3, 4, \dots, m$

$$k = 0 \rightarrow a_{(n,k+1)} = (1-n) / n * a_{(n-2,k+1)}$$

$$k = 1 : n-2 \rightarrow a_{(n,k+1)} = (1-n) / n * a_{(n-2,k+1)} + (2*n-1) / n * a_{(n-1,k-1+1)}$$

$$k = n-1 \rightarrow a_{(n,k+1)} = (2*n-1) / n * a_{(n-1,k)}$$

$$k = n \quad \rightarrow \quad a_{(n,k+1)} = (2 * n - 1) / n * a_{(n-1,k+1-1)}$$

onde

$$P_n(x) = a_{(n,1)} + a_{(n,2)}x + a_{(n,3)}x^2 + \dots + a_{(n,n+1)}x^n$$

FIMLINK

No Caderno de Algoritmos você encontra o cálculo dos valores de $t_{(m,k)}$ e $C_{(m,k)}$ para qualquer m no arquivo **Cap8CalculoCoefGaussLegendre.m**.

Por último, pode-se provar, utilizando o Teorema do Valor Médio para integrais, que o limite do erro de truncamento EG_m da integração numérica de Gauss-Legendre, utilizando a integranda original $f(x)$, é dado por

$$EG_m \leq (b-a)^{2m+1} \frac{(m!)^4}{(2m+1)[(2m)!]^3} \text{Max} |f^{(2m)}(x)|, \quad \forall x \in [a,b] \quad (9)$$

$$\lim_{m \rightarrow \infty} EG_m = 0$$

Exemplo 8.7: Determine o número de pontos m mínimo para que o erro de truncamento máximo entre a integral exata $I = \int_1^6 (1+x)^{-1} dx$ e a aproximação por Gauss-Legendre G_m seja da ordem de $O(10^{-6})$.

Solução:

Derivando a integranda resulta que:

$$f(x) = (1+x)^{-1}, \quad f'(x) = (-1)(1+x)^{-2}, \quad f''(x) = (-1)(-2)(1+x)^{-3}$$

$$f'''(x) = (-1)(-2)(-3)(1+x)^{-4}$$

$$f^{(4)}(x) = (-1)(-2)(-3)(-4)(1+x)^{-5}$$

generalizando para derivada de ordem k temos

$$f^{(k)}(x) = (-1)^k k! (1+x)^{-(k+1)}$$

Agora vamos calcular o erro requerido EG_m da ordem de $O(10^{-6})$ por tentativas iniciando com $m = 6$ e usando a expressão (8), temos :

$$\text{Max}|f^{(2m)}| = f^{(12)}(1) = (-1)^{12} \frac{12!}{(1+1)^{(12+1)}} = 58472$$

$$E_{Gm} \leq (6-1)^{2*6+1} \frac{(6!)^4}{(2*6+1)[(2*6)!]^3} \text{Max}|f^{(2m)}(x)| = 0.01342557$$

Para $m = 10$:

$$\text{Max}|f^{(2m)}| = f^{(20)}(1) = (-1)^{20} \frac{20!}{(1+1)^{(20+1)}} = 1.1601 * 10^{12}$$

$$E_{Gm} \leq (6-1)^{2*10+1} \frac{(10!)^4}{(2*10+1)[(2*10)!]^3} \text{Max}|f^{(2m)}(x)| = 0.00031719$$

Para $m = 16$:

$$\text{Max}|f^{(2m)}| = f^{(32)}(1) = (-1)^{32} \frac{32!}{(1+1)^{(32+1)}} = 3.06325 * 10^{25}$$

$$E_{Gm} \leq (6-1)^{2*16+1} \frac{(16!)^4}{(2*16+1)[(2*16)!]^3} \text{Max}|f^{(2m)}(x)| = 1.13669 * 10^{-06}$$

Portanto, são necessários $m = 16$ pontos no método de Gauss-Legendre para esta integral, enquanto que nos métodos de Simpson e Trapézios necessitamos de $n = 60$ e $n = 1614$ subdivisões do intervalo $[a, b]$, equivalente a usar 61 e 1615 pontos, respectivamente.

Exemplo 8.8: Determine $I = \int_1^6 \frac{1}{1+x} dx$ pelo método de Gauss-Legendre com $m = 3$ pontos. Calcule o seu erro exato. Determine e plote o polinômio de grau $n = m - 1 = 2$, que passa sobre os 3 pontos internos (x_k, y_k) do método e compare a integração I_{P_2} deste polinômio P_{m-1} com o resultado da integração pelo método de Gauss Legendre G_3 .

Solução:

Aplicando diretamente a eq. (8) com $a=1$ e $b=6$ resulta:

m	$t_{(m,k)}$	$C_{(m,k)}$
-----	-------------	-------------

3	$t_1 = -\sqrt{3/5}$	$C_1 = \frac{5}{9}$
	$t_2 = 0$	$C_2 = \frac{8}{9}$
	$t_3 = \sqrt{3/5}$	$C_3 = \frac{5}{9}$

$$G_m = ((b-a)/2) \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} f(x_k) = ((b-a)/2) \sum_{k=1}^m C_{(m,k)} y_k$$

k	$t_{(m,k)}$	$x_k = ((b-a)/2)t_{(m,k)} + ((b+a)/2)$	$y_k = f(x_k)$
1	$-\sqrt{3/5}$	1.563508325	0.390090404719087
2	0	3.5	0.222222222222222
3	$\sqrt{3/5}$	5.436491675	0.155364140978245

$$G_3 = \frac{(b-a)}{2} [C_{(3,1)} f(x_1) + C_{(3,2)} f(x_2) + C_{(3,3)} f(x_3)]$$

$$G_3 = \frac{(6-1)}{2} [\frac{5}{9} * 0.390090404719087 + \frac{8}{9} * 0.222222222222222 + \frac{5}{9} * 0.155364140978245]$$

$$G_3 = \frac{(6-1)}{2} [0.216716891510604 + 0.197530864197531 + 0.086313411654580545]$$

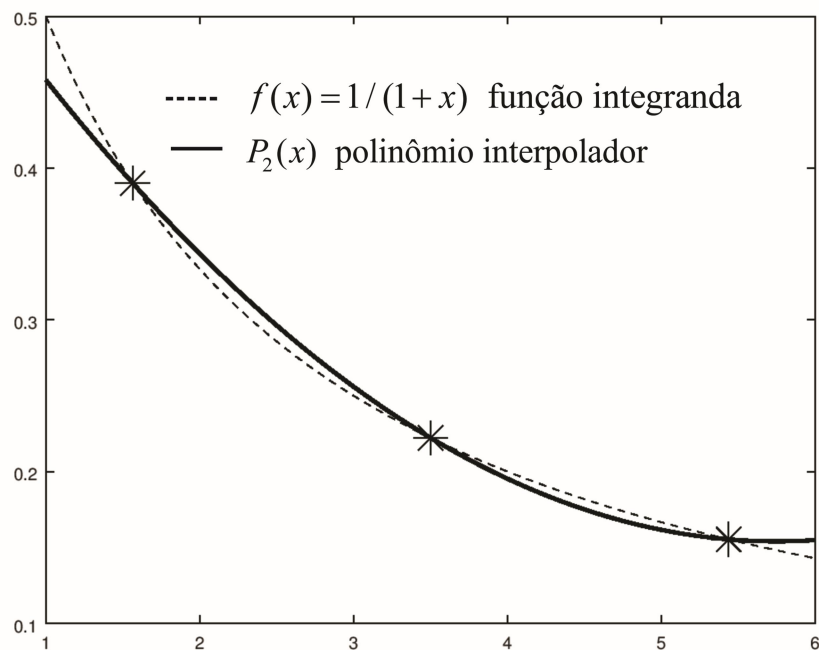
$$G_3 = \frac{(6-1)}{2} [0.50056116736271645]$$

$$I \cong G_3 = 1.25140291840679$$

$$I_e = 1.25276296849537 \text{ (Integral Exata } I_e = \ln(1+x) \Big|_1^6 \text{)}$$

$$\text{Erro } G_3 = |G_3 - I_e| = 0.00136005042578313 \text{ (erro exato da ordem de } O(10^{-3}) \text{)}.$$

Gráfico 8.6 – Comparativo da função integranda $f(x)$ e da função aproximadora $P_2(x)$ fixada nos $m = 3$ pontos definidos no método de Gauss-Legendre.



Fonte: Elaboração própria

Se determinarmos o polinômio de grau $n = m - 1 = 2$, que passa sobre os 3 pontos (x_k, y_k) , teremos:

$$P_2(x) = 0.5993265993265994 - 0.1548821548821549x + 0.0134680134680135x^2$$

e se integrarmos este polinômio $P_2(x)$ entre $a=1$ e $b=6$, teremos I_{P_2} a seguir,

$$I_{P_2} = \int_a^b P_2(x) dx$$

$$I_{P_2} = \int_1^6 (0.5993265993265993 - 0.1548821548821548x + 0.0134680134680135x^2) dx$$

$$I_{P_2} = 1.25140291806958 \text{ que é equivalente a } G_3 = 1.25140291806958$$

Observe que a integração efetuada pelo Método de Gauss-Legendre G_3 tem ‘exatamente’ o mesmo resultado da integração I_{P_2} do polinômio $P_2 = P_{n=m-1}(x)$, que passa sobre os m pontos internos utilizados pelo método de Gauss-Legendre.

Considerações:

i) Observando a expressão do erro de Gauss-Legendre, comparado com o erro do método de Simpson para o mesmo número de chamadas da função, nota-se que

Gauss é mais preciso;

ii) Pelas suas características, Gauss-Legendre é numericamente mais estável que os métodos de Newton, uma vez que a quantidade de parâmetros $t_{(m,k)}$ e $C_{(m,k)}$ é limitada e não vai acumular arredondamentos;

iii) Gauss-Legendre não é aplicável se a integranda $y=f(x)$ for uma tabela de pontos discretos;

iv) Gauss-Legendre fornece resultados pobres se $y=f(x)$ possuir descontinuidades em $[a,b]$, como ocorre no Ex. 8.9.

Exemplo 8.9: do Cálculo sabemos que a igualdade $I = \int_1^3 \frac{dx}{2-x} = \int_1^2 \frac{dx}{2-x} + \int_2^3 \frac{dx}{2-x}$ é

sempre válida. Verifique que ao efetuar estas 3 integrais por Gauss-Legendre até $m = 7$, a igualdade teórica não é mais verdadeira, devido ao ponto de singularidade em $x = 2$ no intervalo $[1, 3]$.

Solução

Aplicando a eq.(8) resulta:

m	$\int_1^3 \frac{dx}{2-x}$	$\int_1^2 \frac{dx}{2-x} + \int_2^3 \frac{dx}{2-x}$
2	3	-2.22044604925031e-15
3	Inf	0
4	8.88178419700125e-16	-7.99360577730113e-15
5	Inf	-8.88178419700125e-16
6	-1.38777878078145e-15	-1.77635683940025e-15
7	Inf	8.88178419700125e-16

(usando o algoritmo apresentado no Octave)

Observe que a integral $\int_1^3 \frac{dx}{2-x}$, aproximada por Gauss-Legendre, gera valores inconsistentes, conforme o m utilizado (com m ímpar gera valor infinito), por conter um ponto de singularidade dentro do intervalo.

Já se o ponto de singularidade está localizado em algum extremo, como nas integrais particionadas, antes e depois da descontinuidade, pode-se aplicar o método de Gauss-Legendre e obter um resultado, neste caso exato, já a partir de

$m = 2$. Estas integrações separadas $\int_1^2 \frac{dx}{2-x}$ e $\int_2^3 \frac{dx}{2-x}$ geram valores aproximados

finitos e iguais, então a soma destas duas partes geram o resultado exato.

Pode-se verificar analiticamente que o valor exato desta integral é zero pois em

$$I = \int_1^2 \frac{dx}{2-x} + \int_2^3 \frac{dx}{2-x} = 0 \quad \text{a área positiva entre } a=1 \text{ e } b=2 \text{ se compensa}$$

completamente com a área negativa entre $b=2$ e $c=3$.

v) Gauss-Legendre é de natureza aberta, isto é, a integranda não é avaliada nos extremos a e b . Em decorrência disso este método pode ser aplicado em integrais

impróprias, onde a $I = \int_a^b f(x)dx$ possui descontinuidades em a e/ou b , ou ainda a e/ou b podem ser infinito(s).

Exemplo 8.10: Efetue $I = \int_0^1 \ln(x)dx$ por Gauss-Legendre com $m=3$. Compare o resultado obtido com o valor exato de $I_e = -1$.

Solução:

Aplicando a eq. (8) com $m=3$, teremos:

$$G_m = -0.94767237 \Rightarrow \text{Erro } G_m = |-0.94767237 - (-1)| = 0.05232763$$

Se algum(ns) extremos(s) for(em) infinito(s):

v.i). Se um extremo for ∞ , $I = \int_a^\infty f(x)dx$, aplicamos a transformação de variáveis:

$$u = 1/x \Rightarrow x = 1/u \Rightarrow dx = -1/u^2 du \quad \text{com } [a, \infty) \rightarrow [1/a, 0]$$

$$\text{Resultando em } \int_a^\infty f(x)dx = - \int_{1/a}^0 \frac{f(u)}{u^2} du = \int_0^{1/a} \frac{f(u)}{u^2} du$$

Que é uma integral imprópria com descontinuidade no extremo $1/\infty = 0$, mas o método pode ser aplicado como no exemplo anterior.

v.ii). Se um extremo for ∞ e o outro for $a=0$, o método também pode ser aplicado subdividindo o intervalo de integração original em duas partes, por exemplo:

$$\int_0^{\infty} = \int_0^1 + \int_1^{\infty}$$

v.iii). Se os dois extremos forem ∞ , podemos subdividir em 2 partes, e então as duas integrais recaem nos casos anteriores:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = \int_{-\infty}^a f(x)dx + \int_a^{+\infty} f(x)dx = -\int_{\infty}^{-a} f(-x)dx + \int_a^{+\infty} f(x)dx = \int_a^{\infty} f(-x)dx + \int_a^{+\infty} f(x)dx$$

A seguir, apresentaremos um método Gaussiano de integração, cujo propósito específico é a determinação otimizada dos coeficientes das séries aproximadoras de funções usando polinômios de Tchebyshev, conforme visto no capítulo 6.

8.2.2. Método Gauss-Tchebyshev

A maneira de determinamos os parâmetros do método de Gauss-Legendre pode ser utilizada para gerar outros métodos de integração com propósitos específicos. Por exemplo, para uma integral particular do tipo $I = \int_{-1}^{+1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx$, onde a $f(x)$ é uma função simples e bem comportada, nenhum dos métodos de Newton-Cotes poderá ser utilizado devido às decontinuidades em -1 e 1. Já o método de Gauss-Legendre poderá não ser eficiente (vide Exemplo 8.11). Por consequência, vamos propor uma integração numérica na forma

$$\int_{-1}^{+1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \cong GT_m = \sum_{j=1}^m a_j f(x_j) \quad (10)$$

Onde na parte direita da (10) foi usada apenas a parcela bem comportada $f(x)$ da integranda $f(x)/\sqrt{1-x^2}$. Pode-se demonstrar que impondo a condição de que a GT_m seja exata para integrar polinômios de grau até $2m-1$, resulta nos seguintes valores para os “pesos” a_j e os “nós” x_j que são as raízes do polinômio de Tchebyshev de grau m (James S. Vandergraft, 1983):

$$a_j = \pi / m$$

$$x_j = \cos\left(\frac{(2j-1)}{2m}\pi\right), \quad \forall j = 1, 2, \dots, m.$$

Então

$$GT_m = \left(\frac{\pi}{m}\right) \sum_{j=1}^m f\left(\frac{(2j-1)}{2m}\pi\right) \quad (11)$$

Lembramos que as raízes do polinômio de Tchebychev de grau m , já foram abordadas no Capítulo 6, onde utilizamos esta forma de integração, denominada de método de Gauss-Tchebyshev, para determinar os coeficientes da série Tchebyshev.

O erro de truncamento da eq. (11) pode ser estimado através da seguinte equação:

$$R_m = \frac{\pi}{(2m)! 2^{2m-1}} f^{(2m)}(\xi), \quad -1 < \xi < +1 \quad (12)$$

A seguir, apresentaremos um exemplo de integração pelo método de Gauss-Tchebyshev.

Exemplo 8.11: Determine o valor da integral $I = \int_{-1}^{+1} \frac{x \operatorname{sen}(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx$ por Gauss-Tchebyshev

e compare com os resultados de Gauss-Legendre. Efetue tentativas com m crescente até o resultado atingir a precisão do processador utilizado.

Solução:

Por Gauss-Tchebyshev, aplicamos a eq. (11) apenas à parcela $f(x) = x \operatorname{sen}(x)$ da função integranda (sem o fator peso $1/\sqrt{1-x^2}$), pois esta integração GT_m já considera este fator. Para esta função bem comportada, obtemos a convergência da integração aproximada com $m = 8$ “nós”.

Por Gauss-Legendre, devemos integrar a função completa, com o fator peso

$$f(x) = \frac{x \operatorname{sen}(x)}{\sqrt{1-x^2}}, \text{ mas os resultados ficam longe da convergência para a solução.}$$

Mesmo com $m = 10$, verifica-se a ineficiência do método para esta integral com descontinuidades em ambas extremidades.

Então a integração por Gauss-Tchebyshev é a mais adequada, por considerar já no método este fator peso com descontinuidades nos extremos.

A seguir apresentamos os resultados até $m = 10$, obtidos pelo Gauss-Tchebyshev (GT_m) e pelo Gauss-Legendre(G_m):

m	GT_m	G_m
2	1.44313043631812	0.771885702690283
3	1.38167976999193	0.951800774731612
4	1.38246439058891	1.05120156898943
5	1.38245967093080	1.11295823247018
6	1.38245968742174	1.15516336143599
7	1.38245968738411	1.18587293446304
8	1.38245968738417	1.20923821130433
9	1.38245968738417	1.22762077044289
10	1.38245968738417	1.24246518890738

Se integrarmos funções $f(x)$ não bem comportadas, com singularidades, teremos que usar valores para o m muito elevados também para a integração por Gauss-Tchebyshev.

No Caderno de Algoritmos você encontra os algoritmos do método dos Trapézios, Simpson e Gauss-Legendre no arquivo **Cap8IntegraisTnSnGm.m** e o algoritmo de Gauss-Tchebychev no arquivo **Cap8IntegralGaussTchebychev.m**.

Considerações finais:

i). Nenhum dos quatro métodos de integração numérica abordados neste capítulo deve ser descartado a priori, pois cada um deles poderá ser o mais adequado, conforme o tipo de integranda disponível:

- o método dos Trapézios será o mais adequado para funções integrandas com gráfico tipo escada;
- o método de Simpson é indicado para funções integrandas discretas (definidas por tabela de pontos);
- em geral, para funções integrandas com expressão conhecida, o método de Gauss-Legendre é mais eficiente;

- a integração numérica de Gauss-Tchebyshev tem aplicações específicas e deve ser utilizada quando a função integranda já inclui o fator peso $W(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$ na sua expressão original, como na determinação de coeficientes da série aproximadora de Tchebyshev utilizada no capítulo 6.

ii). Na aplicação do método de Gauss-Legendre caso se esgote a tabela de parâmetros $t_{(m,k)}$ e $C_{(m,k)}$ disponível e a precisão desejada ainda não tiver sido atingida, pode-se adotar a composição de integrais $I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^{b/2} f(x)dx + \int_{b/2}^b f(x)dx$ e tentar atingir a precisão desejada efetuando estas duas integrais com os m parâmetros disponíveis.