Integração Numérica

Análise Numérica

Artur M. C. Brito da Cruz

Escola Superior de Tecnologia
Instituto Politécnico de Setúbal
2015/2016 [1]

[1] versão 20 de Setembro de 2017

Conteúdo

1 Introdução

Calcular integrais é muito mais difícil do que calcular derivadas. O cálculo das derivadas pode ser sistematizado com recurso à regra da derivação da função composta. Nos integrais tal sistematização não é possível e são conhecidos diversos integrais que não se conseguem calcular com recurso às primitivas:

$$\int_a^b e^{-\frac{x^2}{2}} dx \quad \text{Distribuição Normal (Probabilidades)}$$

$$\int_a^b \frac{t^3}{e^t - 1} dt \quad \text{Modelo de Debye (Termodinâmica).}$$

A integração numérica aproxima o valor do integral através de técnicas de análise numérica, nomeadamente para o cálculo do integral definido

$$\int_a^b f(x)\, dx.$$

O objectivo é aproximar a função f por uma função p simples de primitivar (usualmente uma função polinomial):

$$\int_a^b f(x)\, dx \approx \int_a^b p(x)\, dx.$$

O erro absoluto que se comete com tal aproximação é

$$E = \left| \int_a^b f(x)\, dx - \int_a^b p(x)\, dx \right| = \left| \int_a^b [f(x) - p(x)]\, dx \right|.$$

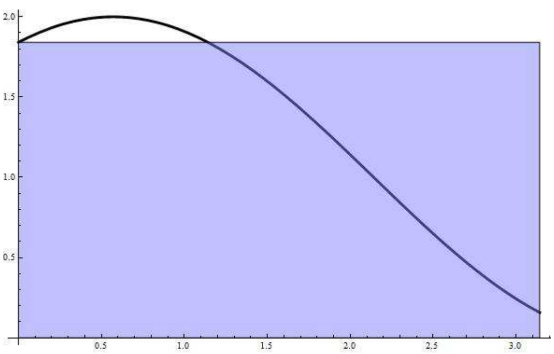
No nosso estudo, ir-se-á ver os casos em que se aproxima a função integranda f por polinómios e em que se usam as técnicas de interpolação polinomial.

2 Regras dos rectângulos

A regra dos rectângulos aproxima a função integranda por uma constante (um polinómio de grau 0).

Regra do rectângulo à esquerda

$$\int_a^b f(x)\, dx \approx \int_a^b f(a)\, dx = (b-a) f(a).$$



Note-se que se f é diferenciável em $[a,b]$, então

$$f(x) = f(a) + f'(c)(x-a)$$

para um certo $c \in]a,x[$ (Teorema de Lagrange). Logo,

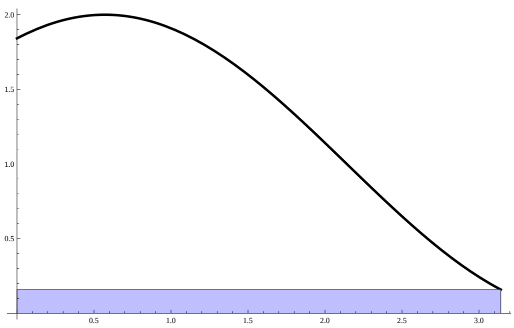
$$\begin{aligned}
\left|\int_a^b f(x) - f(a)\,dx\right| &= \left|\int_a^b f'(c)(x-a)\,dx\right| \\
&\leqslant \max_{x\in[a,b]} |f'(x)| \int_a^b (x-a)\,dx \\
&= \max_{x\in[a,b]} |f'(x)| \left[\frac{(x-a)^2}{2}\right]_a^b \\
&= \frac{1}{2}(b-a)^2 \max_{x\in[a,b]} |f'(x)|.
\end{aligned}$$

Ou seja, um majorante do erro cometido ao aplicar a regra do rectângulo à esquerda é dado por

$$E_L \leqslant \frac{1}{2}(b-a)^2 \max_{x\in[a,b]} |f'(x)|.$$

Regra do rectângulo à direita

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b f(b)\,dx = (b-a)\,f(b).$$

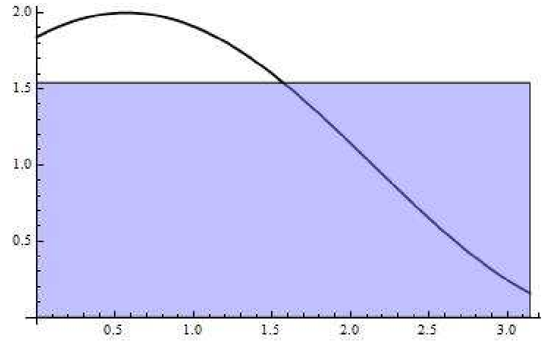


Com uma demonstração análoga à da regra do rectângulo à esquerda, prova-se que um majorante do erro cometido no caso de se aplicar a regra do rectângulo à direita é

$$E_R \leqslant \frac{1}{2}(b-a)^2 \max_{x\in[a,b]} |f'(x)|.$$

Regra do ponto médio

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



Para obter um majorante do erro cometido ao aplicar a regra do ponto médio, utiliza-se a fórmula de Taylor de f, em $\dfrac{a+b}{2}$, com resto de ordem um, desde que $f \in C^2([a,b])$.

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

para um certo $c \in]a, x[$. Então,

$$\begin{aligned}
\int_a^b \left[f(x) - f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right] dx &= f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\int_a^b \left(x-\frac{a+b}{2}\right)dx + \int_a^b f''(c)\frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2}{2}dx \\
&= f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\left[\frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2}{2}\right]_a^b + \int_a^b f''(c)\frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2}{2}dx \\
&= f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\left[\frac{\left(b-\frac{a+b}{2}\right)^2}{2} - \frac{\left(a-\frac{a+b}{2}\right)^2}{2}\right] \\
&\quad + \int_a^b f''(c)\frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2}{2}dx \\
&= f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\frac{1}{2}\left[(b-a)^2 - (a-b)^2\right] + \int_a^b f''(c)\frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2}{2}dx \\
&= \int_a^b f''(c)\frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2}{2}dx.
\end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
\left|\int_a^b \left[f(x) - f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right] dx\right| &= \left|\int_a^b f''(c)\frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2}{2}dx\right| \\
&\leqslant \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| \int_a^b \frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2}{2}dx \\
&= \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| \left[\frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^3}{6}\right]_a^b
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\left|\int_a^b \left[f(x) - f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right] dx\right| \leqslant \frac{1}{24}(b-a)^3 \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|.$$

Regras de integração compostas

Com vista a reduzir o erro cometido na aplicação das regras anteriores, o intervalo de integração pode ser subdividido em diferentes subintervalos, habitualmente de idêntico comprimento, de forma a repetidamente se aplicarem os algoritmos de integração e assim obter as chamadas **regras de integração compostas**. Suponha-se que $[a,b]$ se encontra subdividido em n subintervalos de idêntico comprimento h

$$h = x_{i+1} - x_i = \frac{b-a}{n}, \forall i = 0, \ldots, n-1.$$

Assim,

$$x_i = a + ih, \ i = 0, \ldots, n$$

e a regra do rectângulo à esquerda composta é

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

O majorante do erro cometido no cálculo de cada integral $\displaystyle\int_{x_i}^{x_i+h} f(x)\, dx$, é dado por

$$E_{R_i} \leqslant \frac{1}{2}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2 \max_{x\in[x_i,x_i+h]} |f'(x)|, \ i = 0, \ldots, n-1.$$

Assim, um majorante E_R^C do erro total cometido será

$$\begin{aligned}
E_R^C &\leqslant \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{2}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2 \max_{x\in[x_i,x_i+h]} |f'(x)| \\
&\leqslant \max_{x\in[a,b]} |f'(x)| \frac{1}{2} n \left(\frac{b-a}{n}\right)^2 \\
&= \frac{1}{2}\frac{(b-a)^2}{n} \max_{x\in[a,b]} |f'(x)|.
\end{aligned}$$

Analogamente deduz-se as outras regras de integração compostas. Para n subintervalos, $h = \dfrac{b-a}{n}$, tem-se que:

Regra do rectângulo à esquerda composta

$$\int_a^b f(x)\, dx \approx h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)$$

Se f diferenciável em $[a,b]$: $E_R^C \leqslant \dfrac{1}{2}\dfrac{(b-a)^2}{n} \max\limits_{x\in[a,b]} |f'(x)|.$

Regra do rectângulo à direita composta

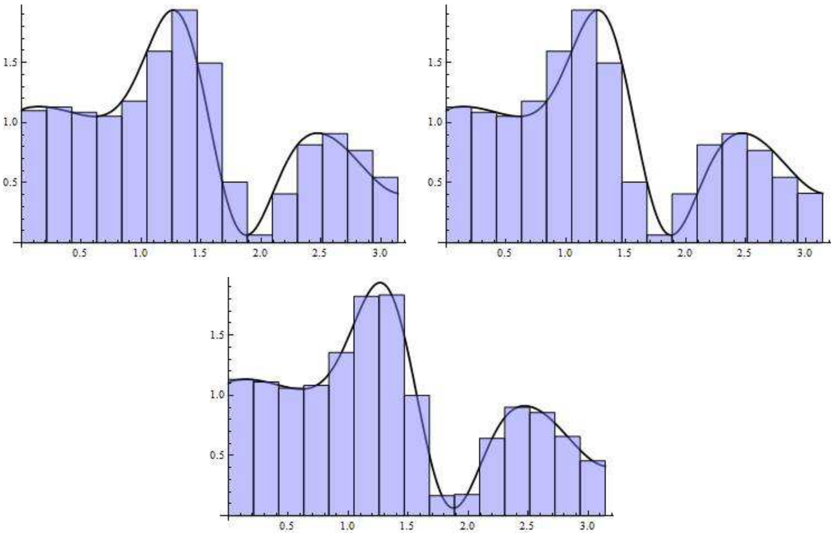
$$\int_a^b f(x)\,dx \approx h\sum_{i=1}^{n} f(x_i)$$

$$\text{Se } f \text{ diferenciável em } [a,b] : E_R^C \leqslant \frac{1}{2}\frac{(b-a)^2}{n}\max_{x\in[a,b]}|f'(x)|.$$

Regra do ponto médio composta

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx h\sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_i+\frac{h}{2}\right)$$

$$\text{Se } f \text{ é de classe } C^2 \text{ em } [a,b] : E_M^C \leqslant \frac{1}{24}\frac{(b-a)^3}{n^2}\max_{x\in[a,b]}|f''(x)|.$$



Exemplo. *Estime-se o valor de* $\int_0^1 \operatorname{sen} x dx$ *aplicando a regra do ponto médio utilizando 5 intervalos de igual comprimento e obtenha-se um majorante do erro cometido.*

Tem-se que, $h=\frac{1}{5}$ *e* $x_0=0,\quad x_1=\frac{1}{5},\quad x_2=\frac{2}{5},\quad x_3=\frac{3}{5}$ *e* $x_4=\frac{4}{5}$. *Logo,*

$$\begin{aligned}\int_0^1 \operatorname{sen} x dx &\approx \frac{1}{5}\sum_{i=0}^{4}\operatorname{sen}\left(x_i+\frac{1}{10}\right)\\ &= \frac{1}{5}\left[\operatorname{sen}\left(\frac{1}{10}\right)+\operatorname{sen}\left(\frac{3}{10}\right)+\operatorname{sen}\left(\frac{5}{10}\right)+\operatorname{sen}\left(\frac{7}{10}\right)+\operatorname{sen}\left(\frac{9}{10}\right)\right]\\ &\approx 0.46046\end{aligned}$$

e

$$E_M^C \leqslant \frac{1}{24}\frac{(1-0)^3}{5^2}0.85 \approx 1.4167\times 10^{-3}.$$

3 Regra do trapézio

A **regra do trapézio** aproxima a função integranda por uma função polinomial de grau um, ou seja

$$f(x) \approx p(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a)$$

em que

$$\begin{aligned} p(a) &= f(a) \\ p(b) &= f(b). \end{aligned}$$

Logo

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)\,dx &\approx \int_a^b \left[f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a)\right] dx \\ &\approx \left[f(a)\,x + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}\frac{(x - a)^2}{2}\right]_a^b \\ &\approx f(a)(b - a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}\frac{(b - a)^2}{2} \\ &\approx (b - a)\frac{f(a) + f(b)}{2}. \end{aligned}$$

Se $f \in C^2([a, b])$, um majorante do erro cometido é:

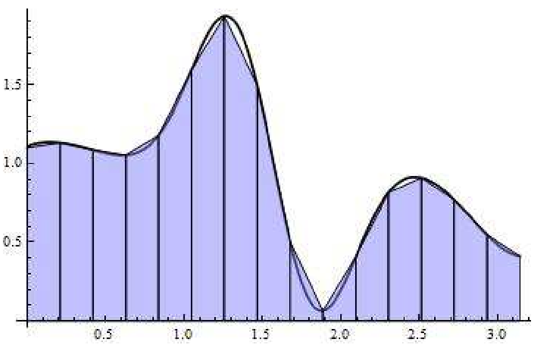
$$E_T \leqslant \frac{1}{12}(b - a)^3 \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|.$$

No caso de aplicar-se repetidamente a regra do trapézio a n subintervalos de $[a, b]$ com amplitude $h = \dfrac{b - a}{n}$, obtém-se a **Regra do trapézio composta** e a correspondente fórmula de majoração do erro cometido:

Regra do trapézio composta

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\right],$$

$$\text{Se } f \text{ é de classe } C^2 \text{ em } [a, b] : E_T^C \leqslant \frac{1}{12}\frac{(b - a)^3}{n^2} \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|.$$



4 Regra de Simpson

Na regra de Simpson a função integranda é aproximada por uma função polinomial de grau 2. Note-se que para determinar este polinómio no intervalo $[a, b]$ usam-se os nós

$$a, \quad \frac{a+b}{2} \quad \text{e} \quad b.$$

Ou seja, o intervalo de integração se encontra particionado em dois subintervalos de idêntico comprimento ($h = \dfrac{b-a}{2}$). Então,

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right].$$

Se $f \in C^4([a, b])$, um majorante do erro cometido é dado por

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

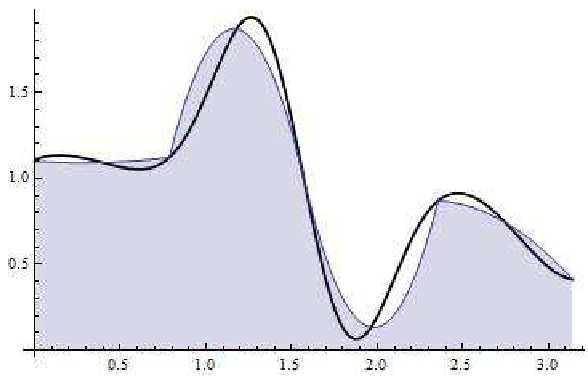
Ao aplicar-se a regra de Simpson a um número par n de subintervalos de $[a, b]$, de amplitude $h = \dfrac{b-a}{n}$, obtém-se a **Regra de Simpson composta**:

Regra de Simpson composta

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx \quad &\approx \quad \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots \\ &\qquad \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)],\end{aligned}$$

Se f é de classe C^4 em $[a, b]$: $E_S^C \leqslant \dfrac{(b-a)^5}{180n^4} \max\limits_{x\in[a,b]} \left|f^{(4)}(x)\right|.$

Note-se que em cada intervalo definem-se os três pontos de interpolação necessários.



Neste gráfico usaram-se 8 intervalos em vez dos 15 intervalos usados nos gráficos anteriores.

Exemplo. *Calcule-se*

$$\int_1^5 \frac{x}{x+1}dx$$

aplicando a regra dos trapézios e a regra de Simpson utilizando 4 intervalos equidistantes. Estime majorantes dos erros cometidos.

Com 4 intervalos equidistantes resulta: $x_i = 1 + hi$ *com* $i = 0, \ldots, 4$ *e* $h = 1$*. Assim, pela regra do trapézio:*

$$\begin{aligned}
\int_1^5 \frac{x}{x+1}dx &\approx \frac{h}{2}\left[f\left(x_0\right) + 2f\left(x_1\right) + 2f\left(x_2\right) + 2f\left(x_3\right) + f\left(x_4\right)\right] \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + \frac{4}{3} + \frac{6}{4} + \frac{8}{5} + \frac{5}{6}\right) \\
&= \frac{173}{60} \approx 2.883\,3.
\end{aligned}$$

Pela regra de Simpson:

$$\begin{aligned}
\int_1^5 \frac{x}{x+1}dx &\approx \frac{h}{3}\left[f\left(x_0\right) + 4f\left(x_1\right) + 2f\left(x_2\right) + 4f\left(x_3\right) + f\left(x_4\right)\right] \\
&= \frac{1}{3}\left(\frac{1}{2} + \frac{8}{3} + \frac{3}{2} + \frac{16}{5} + \frac{5}{6}\right) \\
&= \frac{29}{10} = 2.9.
\end{aligned}$$

Note-se que

$$\begin{aligned}
\left|\left(\frac{x}{x+1}\right)''\right| &= \frac{2}{\left(x+1\right)^3}, \\
\left|\left(\frac{x}{x+1}\right)^{(4)}\right| &= \frac{24}{\left(x+1\right)^5}.
\end{aligned}$$

Como qualquer uma destas funções é decrescente (no intervalo indicado) o respectivo máximo ocorre em $x = 1$*. Assim, os majorantes são*

$$E_T^C \leqslant \frac{\left(5-1\right)^3}{12 \times 4^2} \times \frac{2}{\left(1+1\right)^3} \leqslant 8.4 \times 10^{-2}$$

e

$$E_S^C \leqslant \frac{\left(5-1\right)^5}{180 \times 4^4} \times \frac{24}{\left(1+1\right)^5} \leqslant 1.7 \times 10^{-2}.$$

5 Fórmulas de Newton-Cotes

As fórmulas de integração numérica em que se substitui a função por um polinómio e em que se utilizam os pontos igualmentes espaçados, denominam-se por **fórmulas de Newton-Cotes** e são caracterizadas por expressões do tipo

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\,.$$

Os coeficientes A_k, $k = 0, \ldots, n$, chamam-se de coeficientes de ponderação.

Estas fórmulas, também conhecidas como fórmulas de quadratura, podem ser deduzidas recorrendo ao polinómio interpolador de Lagrange

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} L_k(x)\, f(x_k)$$

no intervalo $[a, b]$ e nos $n+1$ nós equidistantes

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b.$$

Desta forma,

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P_n(x)\,dx \\ &= \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \int_a^b L_k(x)\,dx \\ &= \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\,, \end{aligned}$$

com

$$A_k = \int_a^b L_k(x)\,dx.$$

Como exemplo, demonstre-se a regra de Simpson. Deduza-se o polinómio interpolador de grau menor ou igual a dois que tem a seguinte árvore de suporte:

$$(a, f(a))\,, \left(\frac{a+b}{2}, f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right) \ \text{ e } \ (b, f(b))\,.$$

Os correspondentes polinómios de Lagrange são

$$\begin{aligned} L_0(x) &= \frac{\left(x - \frac{a+b}{2}\right)(x-b)}{\left(a - \frac{a+b}{2}\right)(a-b)} \\ L_1(x) &= \frac{(x-a)(x-b)}{\left(\frac{a+b}{2} - a\right)\left(\frac{a+b}{2} - b\right)} \\ L_2(x) &= \frac{(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)}{(b-a)\left(b - \frac{a+b}{2}\right)}. \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
A_0 &= \int_a^b L_0(x)\,dx = \int_a^b \frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)}{\left(a-\frac{a+b}{2}\right)(a-b)}dx = \frac{1}{6}(b-a) \\
A_1 &= \int_a^b L_1(x)\,dx = \int_a^b \frac{(x-a)(x-b)}{\left(\frac{a+b}{2}-a\right)\left(\frac{a+b}{2}-b\right)}dx = \frac{2}{3}(b-a) \\
A_2 &= \int_a^b L_2(x)\,dx = \int_a^b \frac{(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)}{(b-a)\left(b-\frac{a+b}{2}\right)}dx = \frac{1}{6}(b-a)
\end{aligned}$$

e a regra de Simpson é

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{1}{6}(b-a)\,f(a) + \frac{2}{3}(b-a)\,f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{6}(b-a)\,f(b),$$

isto é,

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{1}{6}(b-a)\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right].$$