

Capítulo 5

Integração numérica

Seja uma função $f(x)$ integrável no intervalo $[a, b]$, então

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a), \text{ onde } F'(x) = f(x).$$

Quando a forma analítica de $F(x)$ for de difícil obtenção ou se forem conhecidos somente valores discretos de $f(x)$, se faz necessário o uso de métodos numéricos para avaliar a integral de $f(x)$. Esses métodos consistem em aproximar a função $f(x)$ por um polinômio interpolador e determinar analiticamente a integral desse polinômio no intervalo $[a, b]$.

Neste capítulo serão abordadas duas classes de métodos para integração numérica: as fórmulas de Newton-Cotes e a quadratura de Gauss-Legendre. Elas serão utilizadas tanto para o cálculo de integrais simples quanto para integrais duplas.

5.1 Fórmulas de Newton-Cotes

Seja uma função $f(x)$ aproximada por um polinômio interpolador, por exemplo, um polinômio de Gregory-Newton (3.12)

$$f(x) \approx P_n(x) = y_0 + \sum_{i=1}^n \frac{\Delta^i y_0}{i!} \prod_{j=0}^{i-1} (u_x - j), \text{ onde } u_x = \frac{x - x_0}{h}. \quad (5.1)$$

Para (5.1) com $n = 1$, isto é, utilizando um polinômio interpolador de grau 1, tem-se

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_{a=x_0}^{b=x_1} P_1(x) dx.$$

Fazendo mudança de variável de $x \rightarrow u_x$ e simplificando a notação de $u_x \rightarrow u$, obtêm-se

$$x = a = x_0 \longrightarrow u = \frac{x_0 - x_0}{h} \rightsquigarrow u = 0 \text{ e}$$

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

e usando a notação $y_i = f(x_i)$, a equação de integração resulta em

$$I_1 = \int_{a=x_0}^{b=x_1} P_1(x) dx = \int_0^1 (y_0 + u\Delta y_0)h du.$$

Integrando, analiticamente, este polinômio de grau 1 em relação a u , tem-se que

$$I_1 = h \left[y_0 u + \frac{u^2}{2} \Delta y_0 \right] \Big|_0^1 = h \left(y_0 + \frac{y_1 - y_0}{2} \right) = \frac{h}{2} (2y_0 + y_1 - y_0),$$

$$\boxed{I_1 = \frac{h}{2} (y_0 + y_1)}, \quad (5.2)$$

que é conhecida como a regra do trapézio.

Exemplo 5.1 Calcular $\int_1^7 \frac{1}{x} dx$ pela regra do trapézio (5.2).

O polinômio de grau 1 passa pelos pontos com abscissas $a = x_0 = 1$ e $b = x_1 = 7$, assim

$$h = 7 - 1 = 6 \rightarrow I_1 = \frac{6}{2} \left(\frac{1}{1} + \frac{1}{7} \right) \rightsquigarrow I_1 = 3,4286.$$

A Figura 5.1 mostra a aproximação da função $f(x) = 1/x$ por um polinômio interpolador $P(x)$ de grau 1. ■

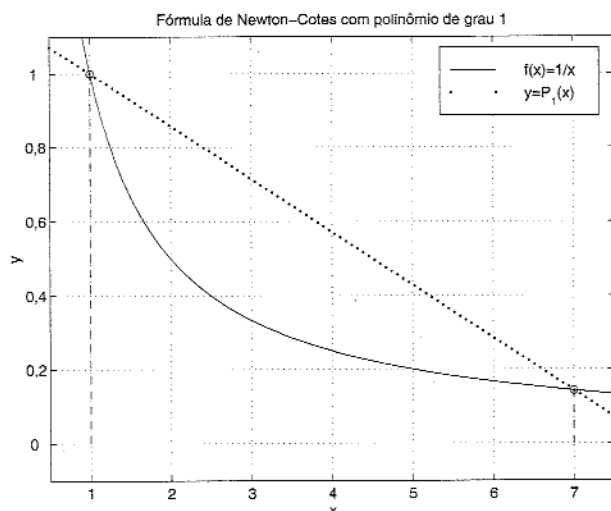


Figura 5.1 Integração numérica pela regra do trapézio.

Aproximando agora $f(x)$ por um polinômio interpolador $P_2(x)$ de grau 2, ou seja, para (5.1) com $n = 2$, tem-se

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_{a=x_0}^{b=x_2} P_2(x) dx.$$

Fazendo mudança de variável, obtêm-se

$$x = a = x_0 \longrightarrow u = \frac{x_0 - x_0}{h} \rightsquigarrow u = 0 \text{ e}$$

$$x = b = x_2 \longrightarrow u = \frac{x_2 - x_0}{h} = \frac{2h}{h} \rightsquigarrow u = 2$$

e com a notação $y_i = f(x_i)$, a equação de integração resulta em

$$I_2 = \int_{a=x_0}^{b=x_2} P_2(x) dx = \int_0^2 \left(y_0 + u\Delta y_0 + \frac{u^2 - u}{2} \Delta^2 y_0 \right) h du.$$

Integrando, analiticamente, este polinômio de grau 2 em relação a u , tem-se que

$$I_2 = h \left[y_0 u + \frac{u^2}{2} \Delta y_0 + \left(\frac{u^3}{6} - \frac{u^2}{4} \right) \Delta^2 y_0 \right] \Big|_0^2,$$

$$I_2 = h \left[2y_0 + 2(y_1 - y_0) + \frac{1}{3}(y_2 - 2y_1 + y_0) \right],$$

$$\boxed{I_2 = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2)}, \quad (5.3)$$

que é a regra do 1/3 de Simpson ou primeira regra de Simpson.

Exemplo 5.2 Calcular $\int_1^7 \frac{1}{x} dx$, usando a regra do 1/3 de Simpson (5.3).

Para construir um polinômio de grau 2 são necessários 3 pontos; portanto, as abscissas por onde o polinômio irá passar são $a = x_0 = 1$, $x_1 = 4$ e $b = x_2 = 7$. Assim,

$$h = \frac{7-1}{2} = 3 \rightarrow I_2 = \frac{3}{3} \left(\frac{1}{1} + 4\frac{1}{4} + \frac{1}{7} \right) \rightsquigarrow I_2 = 2,1429.$$

A aproximação da função $f(x) = 1/x$ por um polinômio interpolador $P(x)$ de grau 2 é exibida na Figura 5.2. ■

Se $f(x)$ for aproximada por um polinômio interpolador de grau 3, então

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

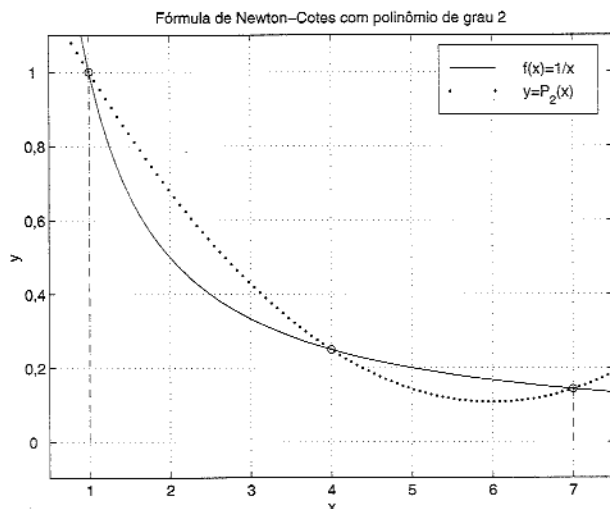


Figura 5.2 Integração numérica pela regra do 1/3 de Simpson.

Fazendo mudança de variável, tem-se que

$$x = a = x_0 \longrightarrow u = \frac{x - x_0}{h} \rightsquigarrow u = 0 \text{ e}$$

$$x = b = x_3 \longrightarrow u = \frac{x_3 - x_0}{h} = \frac{3h}{h} \rightsquigarrow u = 3$$

e com $y_i = f(x_i)$, a equação de integração resulta em

$$I_3 = \int_{a=x_0}^{b=x_3} P_3(x) dx,$$

$$I_3 = \int_0^3 \left(y_0 + u\Delta y_0 + \frac{u^2 - u}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{u^3 - 3u^2 + 2u}{6} \Delta^3 y_0 \right) h du.$$

Integrando, analiticamente, este polinômio de grau 3 em relação a u , tem-se que

$$I_3 = h \left[y_0 u + \frac{u^2}{2} \Delta y_0 + \left(\frac{u^3}{6} - \frac{u^2}{4} \right) \Delta^2 y_0 + \left(\frac{u^4}{24} - \frac{u^3}{6} + \frac{u^2}{6} \right) \Delta^3 y_0 \right] \Big|_0^3,$$

$$I_3 = h \left[3y_0 + \frac{9}{2}(y_1 - y_0) + \frac{9}{4}(y_2 - 2y_1 + y_0) + \frac{3}{8}(y_3 - 3y_2 + 3y_1 - y_0) \right],$$

$$\boxed{I_3 = \frac{3h}{8}(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3)}, \quad (5.4)$$

que é a regra dos 3/8 de Simpson ou segunda regra de Simpson.

Exemplo 5.3 Calcular $\int_1^7 \frac{1}{x} dx$ pela regra dos 3/8 de Simpson (5.4).

São necessários 4 pontos para construir um polinômio de grau 3; conseqüentemente, $a = x_0 = 1$, $x_1 = 3$, $x_2 = 5$ e $b = x_3 = 7$. Por isso,

$$h = \frac{7-1}{3} = 2 \rightarrow I_3 = \frac{3 \times 2}{8} \left(\frac{1}{1} + 3\frac{1}{3} + 3\frac{1}{5} + \frac{1}{7} \right) \sim I_3 = 2,0571.$$

A Figura 5.3 ilustra a aproximação da função $f(x) = 1/x$ por um polinômio interpolador $P(x)$ de grau 3. ■

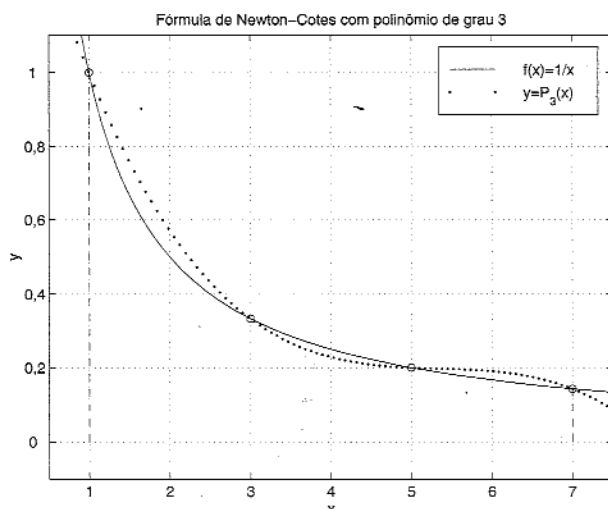


Figura 5.3 Integração numérica pela regra dos 3/8 de Simpson.

Considerando que $\int_1^7 \frac{1}{x} dx = \log_e(x) \Big|_1^7 = \log_e(7) \approx 1,9459$, deve ser observado que o resultado da integração melhora à medida que o grau do polinômio interpolador aumenta

n	I_n	$ I_n - \log_e(7) $
1	3,4286	1,4827
2	2,1429	0,1970
3	2,0571	0,1112

Comparando (5.2), (5.3) e (5.4), nota-se que as fórmulas de Newton-Cotes apresentam a forma geral

$$I_n = \frac{nh}{d_n} \sum_{i=0}^n c_i y_i, \quad (5.5)$$

onde c_i são chamados de coeficientes de Cotes. A Tabela 5.1 apresenta d_n e os coeficientes de Cotes para $n = 1, 2, \dots, 8$, conforme Demidovich e Maron [10, Tabela 65].

Tabela 5.1 Coeficientes de Cotes.

n	d_n	c_0	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6	c_7	c_8
1	2	1	1							
2	6	1	4	1						
3	8	1	3	3	1					
4	90	7	32	12	32	7				
5	288	19	75	50	50	75	19			
6	840	41	216	27	272	27	216	41		
7	17280	751	3577	1323	2989	2989	1323	3577	751	
8	28350	989	5888	-928	10496	-4540	10496	-928	5888	989

Na prática, dificilmente é usado um polinômio de grau superior a 3 para a integração numérica. O resultado é melhorado pela subdivisão do intervalo de integração e subsequente aplicação de uma fórmula de Newton-Cotes em cada subintervalo, resultando nos três métodos compostos que serão vistos a seguir.

5.1.1 Regra do trapézio

Seja (5.2) a fórmula de integração que utiliza um polinômio interpolador de grau 1

$$I_1 = \frac{h}{2}(y_0 + y_1).$$

Subdividindo o intervalo $[a, b]$ em m subintervalos iguais e aplicando a equação acima a cada 2 pontos, tem-se

$$\int_{a=x_0}^{b=x_m} f(x) dx \approx I_1, \text{ com}$$

$$I_1 = \frac{h}{2}(y_0 + y_1) + \frac{h}{2}(y_1 + y_2) + \frac{h}{2}(y_2 + y_3) + \cdots + \frac{h}{2}(y_{m-1} + y_m),$$

$$I_1 = \frac{h}{2}(y_0 + 2y_1 + 2y_2 + \cdots + 2y_{m-1} + y_m),$$

$$I_1 = \frac{h}{2} \sum_{i=0}^m c_i y_i, \quad (5.6)$$

com $c_0 = c_m = 1$ e $c_i = 2$, $i = 1, 2, \dots, m-1$. Para a regra do trapézio composta, pode ser utilizado qualquer valor de número de subintervalos m .

A Figura 5.4 mostra a integração da função $f(x) = e^x \sin(10x) + 8$ utilizando 6 polinômios interpoladores $P(x)$ de grau 1.

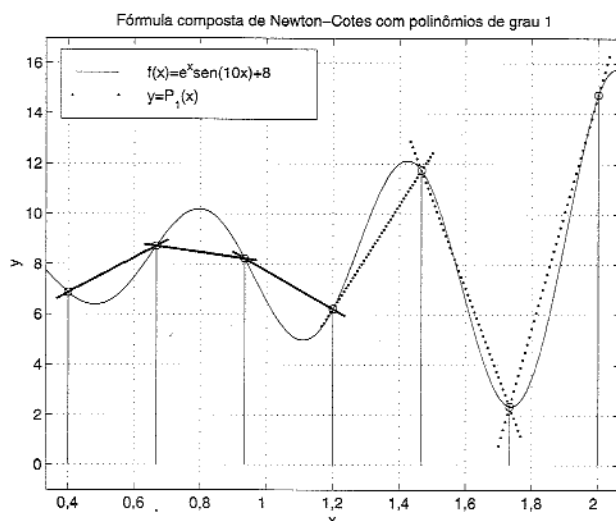


Figura 5.4 Integração numérica pela regra do trapézio composta.

Exemplo 5.4 Calcular $\int_1^3 x^3 \log_e(x) dx$ pela regra do trapézio composta (5.6) com $m = 4$ subintervalos.

$$h = \frac{b-a}{m} = \frac{3-1}{4} \rightarrow h = 0,5.$$

Pode ser construído um dispositivo prático formado por quatro colunas, com $i = 0, 1, \dots, m$, $x_i = a, a+h, a+2h, \dots, b$, $y_i = f(x_i)$ e c_i sendo os coeficientes de Cotes

i	x_i	y_i	c_i
0	1,0	0,0000	1
1	1,5	1,3684	2
2	2,0	5,5452	2
3	2,5	14,3170	2
4	3,0	29,6625	1

$$I_1 = \frac{0,5}{2}(0,0000 + 2(1,3684 + 5,5452 + 14,3170) + 29,6625) \rightsquigarrow I_1 = 18,0309. \quad \blacksquare$$

Exemplo 5.5 Calcular $\int_0^2 \frac{e^{-\cos(x)}}{\sqrt{2x+4}} dx$ pela regra do trapézio composta (5.6) com $m = 5$ subintervalos.

$$h = \frac{b-a}{m} = \frac{2-0}{5} \rightarrow h = 0,4$$

i	x_i	y_i	c_i
0	0,0	0,1839	1
1	0,4	0,1817	2
2	0,8	0,2105	2
3	1,2	0,2751	2
4	1,6	0,3837	2
5	2,0	0,5360	1

$$I_1 = \frac{0,4}{2}(0,1839 + 2(0,1817 + 0,2105 + 0,2751 + 0,3837) + 0,5360) \leadsto I_1 = 0,5644. \blacksquare$$

5.1.2 Regra do 1/3 de Simpson

Considere (5.3) baseada em um polinômio interpolador de grau 2,

$$I_2 = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2).$$

Subdividindo o intervalo $[a, b]$ em m (múltiplo de 2) subintervalos iguais e aplicando a equação acima a cada 3 pontos, tem-se

$$\int_{a=x_0}^{b=x_m} f(x) dx \approx I_2, \text{ com}$$

$$I_2 = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) + \frac{h}{3}(y_2 + 4y_3 + y_4) + \cdots + \frac{h}{3}(y_{m-2} + 4y_{m-1} + y_m),$$

$$I_2 = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + 2y_4 + \cdots + 2y_{m-2} + 4y_{m-1} + y_m),$$

$$I_2 = \frac{h}{3} \sum_{i=0}^m c_i y_i, \quad (5.7)$$

com $c_0 = c_m = 1$, $c_i = 4$ se i for ímpar e $c_i = 2$ se i for par. Para a regra do 1/3 de Simpson composta, o número de subintervalos m deve ser múltiplo de 2, que é o grau do polinômio interpolador usado pela regra. A Figura 5.5 ilustra a integração da função $f(x) = e^x \sin(10x) + 8$ utilizando 3 polinômios interpoladores $P(x)$ de grau 2.

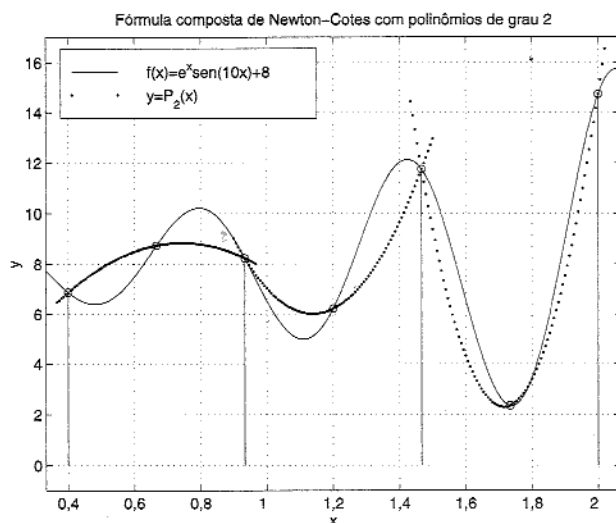


Figura 5.5 Integração numérica pela regra do 1/3 de Simpson composta.

Exemplo 5.6 Verificar que $\pi = 4 \int_0^1 \frac{1}{1+x^2} dx$ usando a regra do 1/3 de Simpson composta (5.7) com passo de integração $h = 0,25$.

$$m = \frac{b-a}{h} = \frac{1-0}{0,25} \rightarrow m = 4 \quad (\text{múltiplo de } 2).$$

No dispositivo prático, tem-se que $i = 0, 1, \dots, m$, $x_i = a, a+h, a+2h, \dots, b$, $y_i = f(x_i)$ e c_i são os coeficientes de Cotes para a regra do 1/3 de Simpson composta

i	x_i	y_i	c_i
0	0,00	1,0000	1
1	0,25	0,9412	4
2	0,50	0,8000	2
3	0,75	0,6400	4
4	1,00	0,5000	1

$$I_2 = \frac{0,25}{3}(1,0000 + 4(0,9412 + 0,6400) + 2(0,8000) + 0,5000) \rightsquigarrow I_2 = 0,7854 \text{ e}$$

$$4 \times I_2 = 3,1416 \approx \pi. \quad \blacksquare$$

Exemplo 5.7 Calcular $\int_0^3 \frac{xe^{2x}}{(1+2x)^2} dx$ usando a regra do 1/3 de Simpson composta (5.7) com $m = 6$ (múltiplo de 2) subintervalos.

$$h = \frac{b-a}{m} = \frac{3-0}{6} \rightarrow h = 0,5$$

i	x_i	y_i	c_i
0	0,0	0,0000	1
1	0,5	0,3398	4
2	1,0	0,8210	2
3	1,5	1,8830	4
4	2,0	4,3679	2
5	2,5	10,3065	4
6	3,0	24,6997	1

$$I_2 = \frac{0,5}{3}(0,0000 + 4(0,3398 + 1,8830 + 10,3065) + 2(0,8210 + 4,3679) + 24,6997) \rightsquigarrow$$

$$I_2 = 14,1991. \quad \blacksquare$$

5.1.3 Regra dos 3/8 de Simpson

Seja (5.4) baseada em um polinômio interpolador de grau 3,

$$I_3 = \frac{3h}{8}(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3).$$

Subdividindo o intervalo $[a, b]$ em m (múltiplo de 3) subintervalos iguais e aplicando a equação acima a cada 4 pontos, tem-se

$$\int_{a=x_0}^{b=x_m} f(x) dx \approx I_3 = \frac{3h}{8}(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3) + \\ \frac{3h}{8}(y_3 + 3y_4 + 3y_5 + y_6) + \cdots + \frac{3h}{8}(y_{m-3} + 3y_{m-2} + 3y_{m-1} + y_m),$$

$$I_3 = \frac{3h}{8}(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + 2y_3 + 3y_4 + 3y_5 + 2y_6 + \cdots + 2y_{m-3} + 3y_{m-2} + 3y_{m-1} + y_m).$$

$$I_3 = \frac{3h}{8} \sum_{i=0}^m c_i y_i, \quad (5.8)$$

com $c_0 = c_m = 1$ e se i for múltiplo de 3, então $c_i = 2$ senão $c_i = 3$. Para a regra dos 3/8 de Simpson composta, o número de subintervalos m deve ser múltiplo de 3, que é o grau do polinômio interpolador no qual a regra se baseia. Deste modo, para qualquer regra de integração composta, o número de subintervalos m tem que ser múltiplo do grau n do polinômio interpolador utilizado pela regra. A integração da função $f(x) = e^x \sin(10x) + 8$, utilizando 2 polinômios interpoladores $P(x)$ de grau 3, pode ser vista na Figura 5.6.

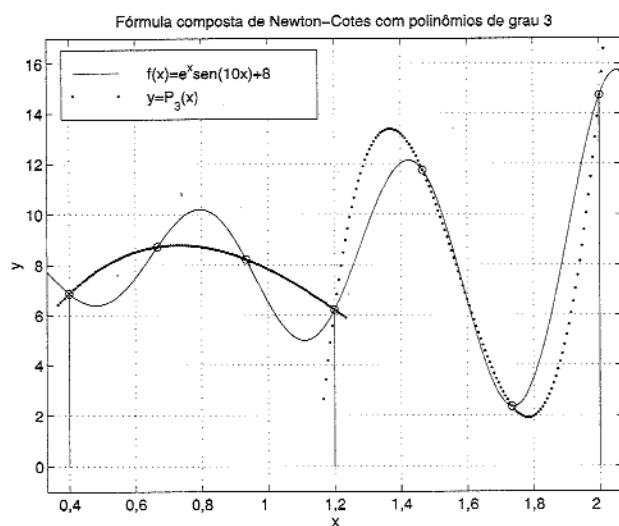


Figura 5.6 Integração numérica pela regra dos 3/8 de Simpson composta.

Exemplo 5.8 Calcular $\int_1^4 \log_e (x^3 + \sqrt{e^x + 1}) dx$ pela regra dos 3/8 de Simpson composta (5.8) com $m = 6$ (múltiplo de 3) subintervalos.

$$h = \frac{b-a}{m} = \frac{4-1}{6} \rightarrow h = 0,5.$$

No dispositivo prático, tem-se que $i = 0, 1, \dots, m$, $x_i = a, a+h, a+2h, \dots, b$, $y_i = f(x_i)$ e c_i são os coeficientes de Cotes para a regra dos 3/8 de Simpson composta,

i	x_i	y_i	c_i
0	1,0	1,0744	1
1	1,5	1,7433	3
2	2,0	2,3884	3
3	2,5	2,9578	2
4	3,0	3,4529	3
5	3,5	3,8860	3
6	4,0	4,2691	1

$$I_3 = \frac{3 \times 0,5}{8} (1,0744 + 3(1,7433 + 2,3884 + 3,4529 + 3,8860) + 2 \times 2,9578 + 4,2691) \rightsquigarrow$$

$$I_3 = 8,5633. \quad \blacksquare$$

Exemplo 5.9 Calcular $\int_0^{2,7} \frac{x + \sin(x)}{1 + \cos(x)} dx$, usando a regra dos 3/8 de Simpson composta (5.8) com passo de integração $h = 0,3$.

$$m = \frac{b-a}{h} = \frac{2,7-0}{0,3} \rightarrow m = 9 \quad (\text{múltiplo de } 3),$$

i	x_i	y_i	c_i
0	0,0	0,0000	1
1	0,3	0,3046	3
2	0,6	0,6380	3
3	0,9	1,0381	2
4	1,2	1,5650	3
5	1,5	2,3325	3
6	1,8	3,5894	2
7	2,1	5,9844	3
8	2,4	11,7113	3
9	2,7	32,6014	1

$$I_3 = \frac{3 \times 0,3}{8} (0,0000 + 3(0,3046 + 0,6380 + 1,5650 + 2,3325 + 5,9844 + 11,7113) +$$

$$2(1,0381 + 3,5894) + 32,6014) \rightsquigarrow I_3 = 12,3147. \quad \blacksquare$$

5.1.4 Erro de integração dos métodos de Newton-Cotes

Seja o erro de truncamento do polinômio de Gregory-Newton de grau n dado por (3.13)

$$T_n(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i) \frac{f^{n+1}(\theta)}{(n+1)!}, \quad x_0 < \theta < x_n.$$

Como a regra do trapézio é baseada em um polinômio de grau $n = 1$, tem-se que

$$T_1(x) = (x - x_0)(x - x_1) \frac{f''(\theta_1)}{2!}, \quad x_0 < \theta_1 < x_1.$$

O erro de integração $E_{1,1}$ cometido ao utilizar a regra do trapézio será a integral da fórmula acima no intervalo $[x_0, x_1]$

$$E_{1,1} = \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1) \frac{f''(\theta_1)}{2} dx.$$

Fazendo uma mudança de variável de x para $u = u_x = \frac{x - x_0}{h}$, tem-se

$$E_{1,1} = \int_0^1 (hu)(h(u-1)) \frac{f''(\theta_1)}{2} h du = \frac{h^3 f''(\theta_1)}{2} \left(\frac{u^3}{3} - \frac{u^2}{2} \right) \Big|_0^1 \sim$$

$$E_{1,1} = -\frac{h^3 f''(\theta_1)}{12}.$$

O erro de integração global considerando os m subintervalos é

$$E_1 = \sum_{i=1}^m E_{1,i} = -\frac{h^3}{12} (f''(\theta_1) + f''(\theta_2) + \cdots + f''(\theta_m)),$$

onde θ_i é determinado em cada um dos m subintervalos. Se $f''(x)$ for contínua no intervalo $[a, b]$, então existe algum valor de $x = \theta \in [a, b]$ para o qual o somatório acima é igual a $m f''(\theta)$. Deste modo, considerando que $h = (b - a)/m$, o erro global de integração da regra do trapézio torna-se

$$E_1 = -\frac{h^3 m f''(\theta)}{12} = -\frac{(b-a)^3}{m^3} \frac{m f''(\theta)}{12}, \quad a < \theta < b,$$

$$E_1 = -\frac{(b-a)^3}{12m^2} f''(\theta), \quad a < \theta < b.$$

(5.9)

Similarmente, pode ser mostrado que para a regra do 1/3 de Simpson,

$$E_2 = -\frac{(b-a)^5}{180m^4} f^{iv}(\theta), \quad a < \theta < b$$

(5.10)

e, para a regra dos 3/8 de Simpson,

$$E_3 = -\frac{(b-a)^5}{80m^4} f^{iv}(\theta), \quad a < \theta < b.$$

(5.11)

Devido à dificuldade de determinar o valor de θ , ele é tomado como sendo o ponto no intervalo $[a, b]$, no qual a derivada de $f(x)$ apresenta o maior valor em módulo. Conseqüentemente, as três equações acima fornecem a cota máxima do erro de integração.

Apesar de a regra do 1/3 de Simpson aproximar a função $f(x)$ a ser integrada por um polinômio de grau 2, ela fornecerá resultado exato quando $f(x)$ for um polinômio de grau até 3, visto que, neste caso, $f^{iv}(x) = 0 \rightarrow E_2 = 0$.

Exemplo 5.10 Calcular $\int_1^3 (4x^3 + 3x^2 + x + 1) dx$ utilizando a regra do 1/3 de Simpson (5.7) com $m = 2$ subintervalos.

$$h = \frac{b-a}{m} = \frac{3-1}{2} \rightarrow h = 1,$$

i	x_i	y_i	c_i
0	1	9	1
1	2	47	4
2	3	139	1

$$I_2 = \frac{1}{3}(9 + 4 \times 47 + 139) \rightsquigarrow I_2 = 112.$$

O erro de integração por (5.10) é zero, pois

$$f(x) = 4x^3 + 3x^2 + x + 1, \quad f'(x) = 12x^2 + 6x + 1, \quad f''(x) = 24x + 6, \quad f'''(x) = 24,$$

$$f^{iv}(x) = 0 \rightarrow E_2 = -\frac{(b-a)^5}{180m^4} f^{iv}(\theta) = -\frac{(3-1)^5}{180 \times 2^4} \times 0 \rightsquigarrow E_2 = 0.$$

De fato, o resultado é exato porque

$$\int_1^3 (4x^3 + 3x^2 + x + 1) dx = \left(x^4 + x^3 + \frac{x^2}{2} + x \right) \Big|_1^3 = 115,5 - 3,5 = 112. \quad \blacksquare$$

O próximo exemplo ilustra que, comparando (5.9), (5.10) e (5.11), verifica-se que a regra do 1/3 de Simpson apresenta o menor erro de integração para um mesmo número de subintervalos m .

Exemplo 5.11 Calcular a integral $\int_0^\pi (e^x + \sin(x) + 2) dx$ usando as três primeiras fórmulas de Newton-Cotes com $m = 6$ subintervalos.

$$h = \frac{b-a}{m} = \frac{\pi-0}{6} \rightarrow h = \frac{\pi}{6},$$

i	x_i	y_i	$c_i(t)$	$c_i(1S)$	$c_i(2S)$
0	0	3,0000	1	1	1
1	$\pi/6$	4,1881	2	4	3
2	$\pi/3$	5,7157	2	2	3
3	$\pi/2$	7,8105	2	4	2
4	$2\pi/3$	10,9866	2	2	3
5	$5\pi/6$	16,2082	2	4	3
6	π	25,1407	1	1	1

A regra do trapézio fornece, por (5.6),

$$I_1 = \frac{\pi}{6 \times 2} (3,0000 + 2(4,1881 + 5,7157 + 7,8105 + 10,9866 + 16,2082) + 25,1407),$$

$$I_1 = 30,8816.$$

A regra do 1/3 de Simpson dará, por (5.7),

$$I_2 = \frac{\pi}{6 \times 3} (3,0000 + 4(4,1881 + 7,8105 + 16,2082) + 2(5,7157 + 10,9866) + 25,1407),$$

$$I_2 = 30,4337.$$

E a regra dos 3/8 de Simpson produzirá, por (5.8),

$$I_3 = \frac{3\pi}{6 \times 8} (3,0000 + 3(4,1881 + 5,7157 + 10,9866 + 16,2082) + 2 \times 7,8105 + 25,1407),$$

$$I_3 = 30,4455.$$

Para calcular o erro de integração de cada fórmula,

$$f(x) = e^x + \sin(x) + 2, \quad f'(x) = e^x + \cos(x), \quad f''(x) = e^x - \sin(x) \rightsquigarrow \theta = \pi,$$

$$f'''(x) = e^x - \cos(x) \text{ e } f^{iv}(x) = e^x + \sin(x) \rightsquigarrow \theta = \pi,$$

sendo θ a abscissa do ponto onde a derivada apresenta o maior valor em módulo. Por (5.9), (5.10) e (5.11), tem-se

$$E_1 = -\frac{(b-a)^3}{12m^2} f''(\theta) = -\frac{(\pi-0)^3}{12 \times 6^2} (e^\pi - \sin(\pi)) \rightsquigarrow E_1 = -1,6609,$$

$$E_2 = -\frac{(b-a)^5}{180m^4} f^{iv}(\theta) = -\frac{(\pi-0)^5}{180 \times 6^4} (e^\pi + \sin(\pi)) \rightsquigarrow E_2 = -0,0304 \text{ e}$$

$$E_3 = -\frac{(b-a)^5}{80m^4} f^{iv}(\theta) = -\frac{(\pi-0)^5}{80 \times 6^4} (e^\pi + \sin(\pi)) \rightsquigarrow E_3 = -0,0683.$$

Considerando que $\int_0^\pi (e^x + \sin(x) + 2) dx = (e^x - \cos(x) + 2x) \Big|_0^\pi \approx 30,4239$, então o erro de integração máximo e real cometidos foram

n	I_n	E_n	$30,4239 - I_n$
1	30,8816	-1,6609	-0,4577
2	30,4337	-0,0304	-0,0098
3	30,4455	-0,0683	-0,0216

A regra do 1/3 de Simpson produziu os menores erro máximo e erro real. O sinal negativo de E_n indica que a integração numérica foi por excesso, ou seja, $I_n > I_{\text{exata}}$. O exemplo a seguir mostra como calcular uma integral com um determinado erro máximo de integração.

Exemplo 5.12 Calcular $\int_0^\pi \left(\frac{x^4}{4} + x^2 + \sin(x) \right) dx$ com $E < 10^{-2}$ usando uma das três primeiras fórmulas de Newton-Cotes.

Inicialmente, determina-se o valor de m para cada fórmula usando (5.9), (5.10) e (5.11)

$$f(x) = \frac{x^4}{4} + x^2 + \sin(x), \quad f'(x) = x^3 + 2x + \cos(x), \quad f''(x) = 3x^2 + 2 - \sin(x) \rightsquigarrow$$

$$\theta = \pi,$$

$$f'''(x) = 6x - \cos(x) \text{ e } f^{iv}(x) = 6 + \sin(x) \rightsquigarrow \theta = \frac{\pi}{2}.$$

Assim,

$$\left| \frac{(b-a)^3}{12m_1^2} f''(\theta) \right| < 10^{-2} \rightarrow m_1 > \left(\frac{(\pi-0)^3}{12 \times 10^{-2}} (3\pi^2 + 2 - \sin(\pi)) \right)^{\frac{1}{2}} \approx 90,37 \rightsquigarrow$$

$$m_1 = 91.$$

$$\left| \frac{(b-a)^5}{180m_2^4} f^{iv}(\theta) \right| < 10^{-2} \rightarrow m_2 > \left(\frac{(\pi-0)^5}{180 \times 10^{-2}} (6 + \sin(\pi/2)) \right)^{\frac{1}{4}} \approx 5,87 \rightsquigarrow$$

$$m_2 = 6.$$

$$\left| \frac{(b-a)^5}{80m_3^4} f^{iv}(\theta) \right| < 10^{-2} \rightarrow m_3 > \left(\frac{(\pi-0)^5}{80 \times 10^{-2}} (6 + \sin(\pi/2)) \right)^{\frac{1}{4}} \approx 7,19 \rightsquigarrow$$

$$m_3 = 9.$$

Os resultados de m_2 e m_3 foram arredondados para valores inteiros maiores e múltiplos de 2 e 3, respectivamente, para atender às restrições de cada uma das regras de integração. Como o menor m é m_2 , então a regra do 1/3 de Simpson deve ser usada, pois requer o menor esforço computacional para alcançar a exatidão requerida.

$$h = \frac{b-a}{m} = \frac{\pi-0}{6} \rightarrow h = \frac{\pi}{6},$$

i	x_i	y_i	c_i
0	0	0,0000	1
1	$\pi/6$	0,7929	4
2	$\pi/3$	2,2633	2
3	$\pi/2$	4,9894	4
4	$2\pi/3$	10,0628	2
5	$5\pi/6$	19,0979	4
6	π	34,2219	1

Pela regra do 1/3 de Simpson (5.7)

$$I_2 = \frac{\pi}{6 \times 3} (0,0000 + 4(0,7929 + 4,9894 + 19,0979) + 2(2,2633 + 10,0628) + 34,2219),$$

$$I_2 = 27,6451.$$

Com o intuito de verificar se a exatidão requerida foi mesmo satisfeita,

$$\int_0^\pi \left(\frac{x^4}{4} + x^2 + \sin(x) \right) dx = \left(\frac{x^5}{20} + \frac{x^3}{3} - \cos(x) \right) \Big|_0^\pi \approx 27,6364,$$

$$|27,6364 - 27,6451| = 0,0087 < 10^{-2}.$$

5.1.5 Algoritmo e complexidade

A Figura 5.7 apresenta um algoritmo para calcular $\int_a^b f(x) dx$ por uma fórmula de Newton-Cotes gerada a partir de um polinômio de grau n , para $1 \leq n \leq 8$, utilizando m subintervalos iguais. Os parâmetros de entrada são o limite de integração inferior a e o superior b , o grau n do polinômio interpolador usado pela regra de integração e o número m de subintervalos. A função $f(x)$ deve ser especificada de acordo com a linguagem de programação escolhida. Os parâmetros de saída são o resultado da integração *Integral* e a condição de erro *CondErro*, em que *CondErro* = 0 significa que não houve erro de consistência dos parâmetros de entrada, *CondErro* = 1, o grau do polinômio é menor que 1 ou maior que 8, e *CondErro* = 2 indica que o número de subintervalos m não é múltiplo do grau do polinômio n . Se ambas as condições ocorrerem, então *CondErro* = 3.

Os coeficientes de Cotes são aqueles compilados na Tabela 5.1, os quais são simétricos em relação à trunca($n/2$), isto é, $c_i = c_{n-i}$, $i = 0, 1, \dots, \text{trunca}(n/2)$, (truncar significa desprezar a parte fracionária). Deste modo, não é necessário armazenar todos os coeficientes c_i . Dado o grau n do polinômio, o apontador p indica a posição a partir da qual estão os coeficientes de Cotes no vetor c .

A Tabela 5.2 mostra a complexidade computacional da fórmula de Newton-Cotes implementada pelo algoritmo da Figura 5.7. Os polinômios são dados em termos do número de subintervalos m , pois independem do grau n do polinômio interpolador utilizado.

Algoritmo Newton-Cotes{ **Objetivo:** Integrar uma função pelo método de Newton-Cotes }**parâmetros de entrada** a, b, n, m

{ limite inferior, limite superior, grau do polinômio, número de subintervalos }

parâmetros de saída $Integral, CondErro$

{ valor da integral e condição de erro, sendo }

{ $CondErro = 0$ se não houve erro de consistência dos parâmetros dados, }{ $CondErro = 1$ se $(n < 1$ ou $n > 8)$, }{ $CondErro = 2$ se $resto(m, n) \neq 0$ e }{ $CondErro = 3$ se ambas as condições ocorrerem } $d(1) \leftarrow 2; d(2) \leftarrow 6; d(3) \leftarrow 8; d(4) \leftarrow 90; d(5) \leftarrow 288; d(6) \leftarrow 840$ $d(7) \leftarrow 17280; d(8) \leftarrow 28350$ $c(1) \leftarrow 1; c(2) \leftarrow 1; c(3) \leftarrow 4; c(4) \leftarrow 1; c(5) \leftarrow 3; c(6) \leftarrow 7; c(7) \leftarrow 32$ $c(8) \leftarrow 12; c(9) \leftarrow 19; c(10) \leftarrow 75; c(11) \leftarrow 50; c(12) \leftarrow 41; c(13) \leftarrow 216$ $c(14) \leftarrow 27; c(15) \leftarrow 272; c(16) \leftarrow 751; c(17) \leftarrow 3577; c(18) \leftarrow 1323$ $c(19) \leftarrow 2989; c(20) \leftarrow 989; c(21) \leftarrow 5888; c(22) \leftarrow -928; c(23) \leftarrow 10496$ $c(24) \leftarrow -4540$ $CondErro \leftarrow 0; Integral \leftarrow 0$

{ consistência dos parâmetros }

se $n < 1$ ou $n > 8$ então $CondErro \leftarrow CondErro + 1$, fimsese $resto(m, n) \neq 0$ então $CondErro \leftarrow CondErro + 2$, fimsese $CondErro \neq 0$ então abandone, fimse

{ cálculo da integral }

 $p \leftarrow \text{trunca}(0,25 * (n * (n + 2) + \text{resto}(n, 2))); h \leftarrow (b - a)/m$ para $i \leftarrow 0$ até m faça $x \leftarrow a + i * h$ $y \leftarrow f(x)$ { avaliar a função integrando em x } $j \leftarrow p + \text{trunca}(0,5 * n - \text{abs}(\text{resto}(i, n) - 0,5 * n))$ $k \leftarrow 1 + \text{trunca}((n - \text{resto}(i, n))/n) - \text{trunca}((m - \text{resto}(i, m))/m)$ $Integral \leftarrow Integral + y * c(j) * k$ escreva $i, x, y, c(j) * k$

fimpara

 $Integral \leftarrow n * h/d(n) * Integral$

fim algoritmo

Figura 5.7 Integração numérica pelo método de Newton-Cotes.(Ver significado das funções abs , resto e trunca na Tabela 1.1, na página 6.)

Exemplo 5.13 Calcular $\int_0^\pi \sin(x) dx$ pelo algoritmo da Figura 5.7 com polinômios de grau $n = 2$ e $n = 3$, utilizando $m = 6$ subintervalos.

Para $n = 2$

Tabela 5.2 Complexidade da integração pelo método de Newton-Cotes.

Operações	Complexidade
adições	$9m + 12$
multiplicações	$5m + 9$
divisões	$2m + 4$

```
% Os parametros de entrada
a = 0
b = 3.14159
n = 2
m = 6
% fornecem os resultados
Integracao por Newton-Cotes com polinomio de grau 2
      i      x(i)      y(i)      c(i)
      0      0.00000    0.00000      1
      1      0.52360    0.50000      4
      2      1.04720    0.86602      2
      3      1.57080    1.00000      4
      4      2.09439    0.86603      2
      5      2.61799    0.50000      4
      6      3.14159    0.00000      1

Integral = 2.00086
CondErro = 0
```

Para $n = 3$

```
% Os parametros de entrada
a = 0
b = 3.14159
n = 3
m = 6
% fornecem os resultados
Integracao por Newton-Cotes com polinomio de grau 3
      i      x(i)      y(i)      c(i)
      0      0.00000    0.00000      1
      1      0.52360    0.50000      3
      2      1.04720    0.86602      3
      3      1.57080    1.00000      2
      4      2.09439    0.86603      3
      5      2.61799    0.50000      3
      6      3.14159    0.00000      1

Integral = 2.00201
CondErro = 0
```

Não houve erro de consistência dos parâmetros de entrada e, como era de esperar, a regra do $1/3$ de Simpson forneceu um resultado mais exato que a regra dos $3/8$, para um mesmo número de subintervalos. ■

O próximo exemplo mostra que o uso de fórmulas baseadas em polinômios interpoladores de grau par é mais vantajoso.

Exemplo 5.14 Verificar o erro real cometido no cálculo de $\int_0^5 x \sin(3x) dx$, a ser apresentada na Seção 5.3, usando as sete primeiras fórmulas de Newton-Cotes, com $m = 420$

n	$ I_{\text{exata}} - I_n $
1	$1,2690 \times 10^{-4}$
2	$9,4861 \times 10^{-9}$
3	$2,1346 \times 10^{-8}$
4	$3,9775 \times 10^{-12}$
5	$8,5454 \times 10^{-12}$
6	$6,6613 \times 10^{-16}$
7	$2,6645 \times 10^{-15}$

De forma global, à medida que o grau n do polinômio interpolador aumenta, o erro diminui. No entanto, uma fórmula utilizando grau par é melhor do que a de grau ímpar seguinte. ■

5.2 Quadratura de Gauss-Legendre

O fato de escolher pontos igualmente espaçados nas fórmulas de Newton-Cotes certamente simplifica os cálculos. Contudo, se as abscissas não tiverem esta imposição de espaçamento constante, então podem ser obtidas fórmulas que forneçam uma maior exatidão, usando o mesmo número de pontos.

5.2.1 Fórmula para dois pontos

A Figura 5.8(a) ilustra a integração de uma função $f(x)$ pela regra do trapézio, a qual é baseada em um polinômio interpolador de grau 1 passando pelos pontos A e B . Pela Figura 5.8(b), os pontos C e D da curva podem ser escolhidos de tal maneira que a área do trapézio seja a mais próxima possível da área sob a curva.

Com esse objetivo, é feita, inicialmente, uma mudança de variável de x para t , definida no intervalo $[-1, 1]$, por intermédio da expressão

$$x = x(t) = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2} \quad (5.12)$$

de modo que

$$dx = \frac{b-a}{2} dt.$$

Definindo

$$F(t) = \frac{b-a}{2} f(x(t)), \quad (5.13)$$

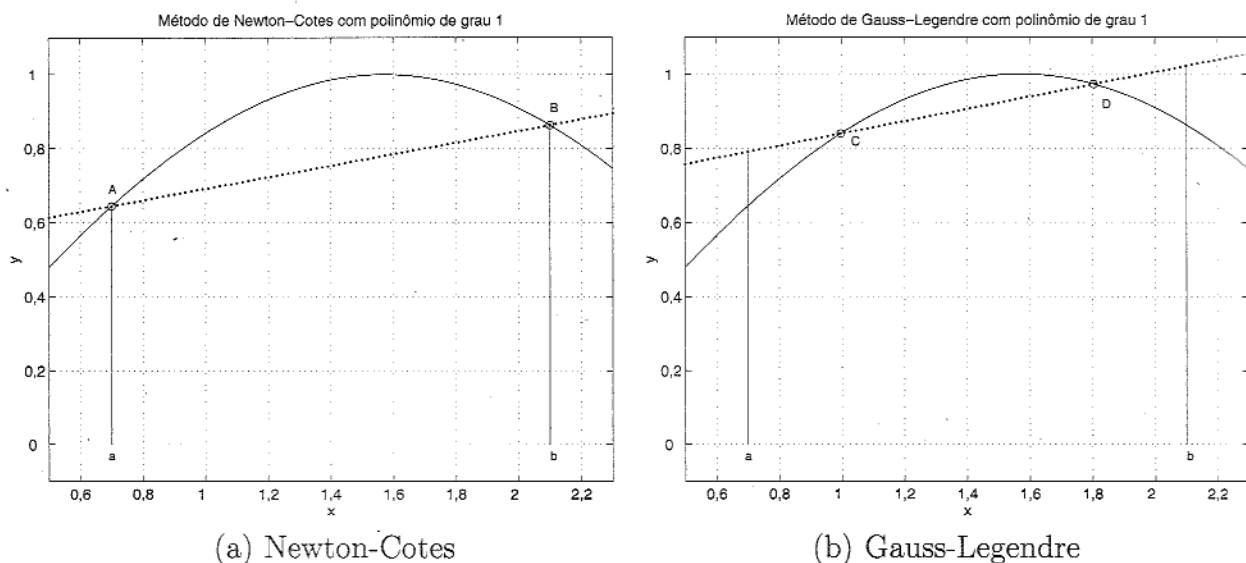


Figura 5.8 Aproximação da função por polinômio de grau 1.

então

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{2}{b-a} F(t) \frac{b-a}{2} dt \rightsquigarrow \int_a^b f(x) dx = \int_{-1}^1 F(t) dt.$$

Considere agora a Figura 5.9. Como o ponto C tem coordenadas $C[t_1, F(t_1)]$ e o $D[t_2, F(t_2)]$, então deseja-se que,

$$\int_{-1}^1 F(t) dt \approx I_2,$$

sendo

$$I_2 = A_1 F(t_1) + A_2 F(t_2). \quad (5.14)$$

Em vista de (5.13) e com $x_i = x(t_i)$, tem-se

$$I_2 = \frac{b-a}{2} (A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)). \quad (5.15)$$

Deve-se notar que a expressão acima é análoga à regra do trapézio, dada por (5.2), na qual

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} f(a) + \frac{h}{2} f(b).$$

O problema consiste em encontrar valores de t_1 , t_2 , A_1 e A_2 que tornem a exatidão a maior possível. Para isso, o método é construído de modo a ser exato para polinômios de grau até 3, pois deste modo ter-se-á quatro incógnitas (t_1 , t_2 , A_1 e A_2) e quatro equações, uma para cada

$$F(t) = t^k, \quad k = 0, 1, 2, 3.$$

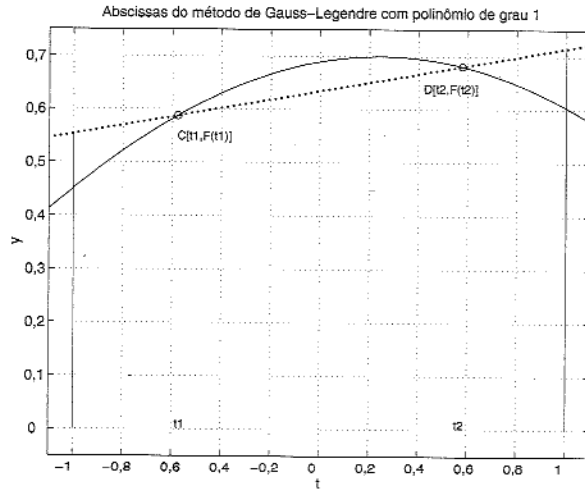


Figura 5.9 Escolha das abscissas no método de Gauss-Legendre.

Impondo (5.14) ser igual à integral analítica de $F(t)$, então

para $k = 0$

$$F(t) = 1 \rightarrow \int_{-1}^1 1 \, dt = 1 - (-1) = 2 = A_1 1 + A_2 1,$$

para $k = 1$

$$F(t) = t \rightarrow \int_{-1}^1 t \, dt = \left. \frac{t^2}{2} \right|_{-1}^1 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 = A_1 t_1 + A_2 t_2,$$

para $k = 2$

$$F(t) = t^2 \rightarrow \int_{-1}^1 t^2 \, dt = \left. \frac{t^3}{3} \right|_{-1}^1 = \frac{1}{3} - \left(-\frac{1}{3} \right) = \frac{2}{3} = A_1 t_1^2 + A_2 t_2^2 \text{ e}$$

para $k = 3$

$$F(t) = t^3 \rightarrow \int_{-1}^1 t^3 \, dt = \left. \frac{t^4}{4} \right|_{-1}^1 = \frac{1}{4} - \frac{1}{4} = 0 = A_1 t_1^3 + A_2 t_2^3.$$

As expressões acima constituem um sistema de equações não lineares de ordem 4

$$A_1 + A_2 = 2,$$

$$A_1 t_1 + A_2 t_2 = 0,$$

$$A_1 t_1^2 + A_2 t_2^2 = \frac{2}{3} \text{ e}$$

$$A_1 t_1^3 + A_2 t_2^3 = 0,$$

cuja solução é

$$t_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \approx -0,5774, \quad t_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0,5774, \quad A_1 = 1 \text{ e } A_2 = 1.$$

Exemplo 5.15 Calcular $\int_1^5 (2x^3 + 3x^2 + 6x + 1)dx$, usando (5.15).

Por (5.12),

$$x_i = \frac{b-a}{2}t_i + \frac{a+b}{2} = \frac{5-1}{2}t_i + \frac{1+5}{2} \leadsto x_i = 2t_i + 3.$$

Os cálculos podem ser sistematizados em um dispositivo prático composto por cinco ~~colunas~~, de modo que $i = 1, 2$; $t_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$ e $t_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ (para $n = 2$), x_i , $f(x_i)$ e $A_1 = A_2 = 1$ (para $n = 2$),

i	t_i	x_i	$f(x_i)$	A_i
1	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	1,8453	34,8542	1
2	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	4,1547	221,1458	1

$$I_2 = \frac{b-a}{2}(A_1f(x_1) + A_2f(x_2)) = \frac{5-1}{2}(1 \times 34,8542 + 1 \times 221,1458) \leadsto$$

$$I_2 = 512,0000.$$

Este resultado, de fato, é exato porque

$$\int_1^5 (2x^3 + 3x^2 + 6x + 1)dx = \left(\frac{x^4}{2} + x^3 + 3x^2 + x \right) \Big|_1^5 = 517,5 - 5,5 = 512.$$

Exemplo 5.16 Calcular $\int_0^\pi (e^x + \sin(x) + 2) dx$, usando (5.15).

Por (5.12),

$$x_i = \frac{b-a}{2}t_i + \frac{a+b}{2} = \frac{\pi-0}{2}t_i + \frac{0+\pi}{2} \leadsto x_i = \frac{\pi}{2}(t_i + 1).$$

i	t_i	x_i	$f(x_i)$	A_i
1	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	0,6639	4,5585	1
2	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	2,4777	14,5300	1

Assim,

$$I_2 = \frac{b-a}{2}(A_1f(x_1) + A_2f(x_2)) = \frac{\pi-0}{2}(1 \times 4,5585 + 1 \times 14,5300) \leadsto$$

$$I_2 = 29,9841.$$

No Exemplo 5.11, foi visto que o valor exato dessa integral é aproximadamente 30,4239, portanto o erro cometido pela quadratura de Gauss-Legendre com 2 pontos foi de $|30,4239 - 29,9841| = 0,4398$, que é mais exato que aquele obtido pela regra do trapézio com $m = 6$ subintervalos, equivalente a 7 pontos ($|30,4239 - 30,8816| = 0,4577$).

Exemplo 5.17 Calcular a soma das áreas S_1 , S_2 e S_3 entre o polinômio de Legendre de grau 1 e a função $f(x) = x^3 - 6x^2 + 11x - 5$ obtidas no intervalo $[1, 4]$ e mostradas na Figura 5.10.

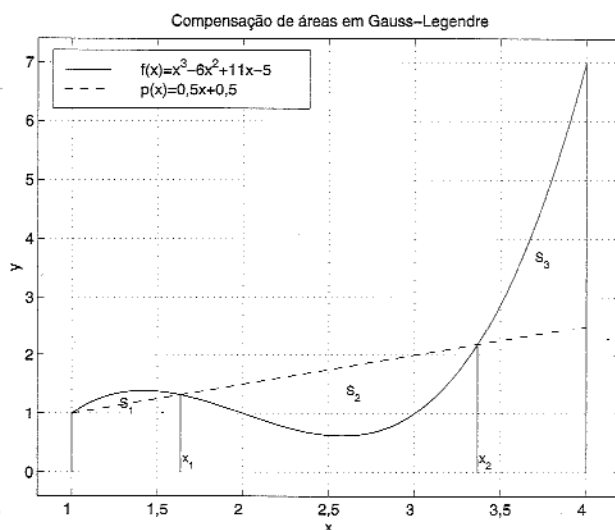


Figura 5.10 Áreas entre a função e o polinômio no método de Gauss-Legendre.

Inicialmente, calculam-se as abscissas x_1 e x_2 a partir de $t_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$ e $t_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Por (5.12)

$$x_1 = \frac{4-1}{2}t_1 + \frac{1+4}{2} = \frac{5-\sqrt{3}}{2} \approx 1,63397,$$

$$x_2 = \frac{4-1}{2}t_2 + \frac{1+4}{2} = \frac{5+\sqrt{3}}{2} \approx 3,36603.$$

A forma analítica do polinômio de Legendre de grau 1 que passa pelos pontos de coordenadas $(x_1, f(x_1))$ e $(x_2, f(x_2))$ é

$$p(x) = f(x_1) + \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}(x - x_1),$$

$$p(x) = 0,5x + 0,5.$$

Sendo $g(x) = f(x) - p(x) = x^3 - 6x^2 + 10,5x - 5,5$, tem-se que

$$S_1 = \int_1^{x_1} g(x)dx \approx 0,08702,$$

$$S_2 = \int_{x_1}^{x_2} g(x)dx \approx -1,29904,$$

$$S_3 = \int_{x_2}^4 g(x)dx \approx 1,21202.$$

Portanto, a soma das três áreas é igual a 0, mostrando que para $n = 2$ pontos, existe uma compensação exata das áreas entre o polinômio de Legendre de grau 1 e a função polinomial de grau 3. ■

5.2.2 Fórmula geral

Agora, o problema é determinar os valores dos pesos A_i , e das abscissas t_i , $i = 1, 2, \dots, n$, as quais se encontram no intervalo $[-1, 1]$, para utilizá-los na fórmula

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 F(t)dt \approx I_n,$$

sendo

$$I_n = A_1 F(t_1) + A_2 F(t_2) + \dots + A_n F(t_n), \quad (5.16)$$

de modo que a mesma seja exata para polinômios de grau menor ou igual a $2n - 1$. Fazendo

$$F(t) = t^k, \quad k = 0, 1, \dots, 2n - 1,$$

e sabendo que

$$\int_{-1}^1 t^k dt = \begin{cases} 0, & \text{se } k \text{ for ímpar,} \\ \frac{2}{k+1}, & \text{se } k \text{ for par,} \end{cases}$$

então impondo que (5.16) seja exata para a integração de $F(t)$ acima, é obtido o seguinte sistema de equações não lineares de ordem $2n$

$$A_1 + A_2 + A_3 + \dots + A_n = 2,$$

$$A_1 t_1 + A_2 t_2 + A_3 t_3 + \dots + A_n t_n = 0,$$

$$A_1 t_1^2 + A_2 t_2^2 + A_3 t_3^2 + \dots + A_n t_n^2 = \frac{2}{3},$$

...

$$A_1 t_1^{2n-1} + A_2 t_2^{2n-1} + A_3 t_3^{2n-1} + \dots + A_n t_n^{2n-1} = 0,$$

cujas soluções fornece os n pesos A_i e as n abscissas t_i desejados. Em vista de (5.13) e com $x_i = x(t_i)$, (5.16) é equivalente a

$$I_n = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n A_i f(x_i). \quad (5.17)$$

A necessidade de resolver este sistema não linear pode ser evitada usando um processo alternativo. Inicialmente, sejam os polinômios de Legendre [8] definidos pela fórmula de recorrência

$$L_n(x) = \frac{(2n-1)xL_{n-1}(x) - (n-1)L_{n-2}(x)}{n}, \quad (5.18)$$

com $L_0(x) = 1$ e $L_1(x) = x$. Por exemplo,

$$L_2(x) = \frac{3x^2 - 1}{2},$$

$$L_3(x) = \frac{5x^3 - 3x}{2},$$

$$L_4(x) = \frac{35x^4 - 30x^2 + 3}{8} \text{ e}$$

$$L_5(x) = \frac{63x^5 - 70x^3 + 15x}{8}.$$

Os polinômios de Legendre possuem as seguintes propriedades básicas

$$L_n(1) = 1 \text{ e } L_n(-1) = (-1)^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \text{ e}$$

$$\int_{-1}^1 L_n(x) Q_k(x) dx = 0, \quad n > k, \quad (5.19)$$

sendo $Q_k(x)$ um polinômio qualquer de grau $k < n$. A integral de (5.19) é chamada de produto escalar das funções $L_n(x)$ e $Q_k(x)$. Duas funções são ditas ortogonais se seu produto escalar for nulo, portanto, $L_n(x)$ e $Q_k(x)$ são ortogonais. Além disso,

$$\int_{-1}^1 L_n(x) L_k(x) dx \begin{cases} = 0, & \text{se } n \neq k, \\ > 0, & \text{se } n = k. \end{cases}$$

Uma outra propriedade é que as equações algébricas $L_n(x) = 0$ possuem n raízes reais distintas pertencentes ao intervalo $(-1, 1)$ e simétricas em relação à origem, conforme pode ser observado na Figura 5.11.

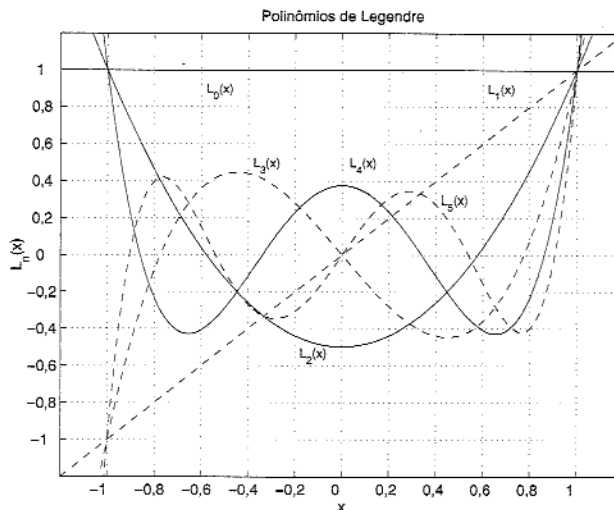


Figura 5.11 Polinômios de Legendre de grau até 5.

Considere agora os polinômios

$$F_k(t) = t^k L_n(t), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1,$$

onde $L_n(t)$ é um polinômio de Legendre de grau n . Desde que $F_k(t)$ é de grau menor ou igual a $2n-1$, então (5.16) é exata

$$\int_{-1}^1 F_k(t) dt = \sum_{i=1}^n A_i F_k(t_i), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1,$$

$$\int_{-1}^1 t^k L_n(t) dt = \sum_{i=1}^n A_i t_i^k L_n(t_i), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

Devido à ortogonalidade dos polinômios de Legendre com qualquer polinômio de grau menor que o de Legendre, mostrado em (5.19), tem-se que

$$\int_{-1}^1 t^k L_n(t) dt = 0, \quad n > k.$$

Portanto,

$$\sum_{i=1}^n A_i t_i^k L_n(t_i) = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

Essa expressão será verdadeira para qualquer valor de A_i se $L_n(t_i) = 0$ para todo i . Assim, para obter uma maior exatidão na fórmula de quadratura (5.16) é suficiente que t_i , $i = 1, 2, \dots, n$ sejam os zeros do polinômio de Legendre de grau n .

Sendo conhecidas as abscissas t_i , então o sistema não linear se reduz a um sistema linear de ordem n , cuja solução fornece os pesos A_i , $i = 1, 2, \dots, n$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ t_1 & t_2 & t_3 & \cdots & t_n \\ t_1^2 & t_2^2 & t_3^2 & \cdots & t_n^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_1^{n-1} & t_2^{n-1} & t_3^{n-1} & \cdots & t_n^{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ \frac{2}{3} \\ \vdots \\ . \end{bmatrix}.$$

No entanto, em vez de resolver este sistema via decomposição LU , os pesos A_i podem ser obtidos mais facilmente pela expressão abaixo, conforme Rybicki [34],

$$A_i = \frac{2}{(1-t_i^2)(L'_n(t_i))^2}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (5.20)$$

onde $L'_n(t_i)$ é a derivada de $L_n(x)$ na abscissa t_i . Os valores de t_i e A_i para $n = 1, 2, \dots, 10$, extraídos de Abramowitz e Stegun [1, página 916], estão compilados na Tabela 5.3.

Tabela 5.3 Abscissas e pesos para quadratura de Gauss-Legendre.

n	i	t_i	A_i
1	1	0	2
2	2; 1	$\pm 0,57735\ 02691\ 89626$	1
3	2	0	0,88888 88888 88889
	3; 1	$\pm 0,77459\ 66692\ 41483$	0,55555 55555 55556
4	3; 2	$\pm 0,33998\ 10435\ 84856$	0,65214 51548 62546
	4; 1	$\pm 0,86113\ 63115\ 94053$	0,34785 48451 37454
5	3	0	0,56888 88888 88889
	4; 2	$\pm 0,53846\ 93101\ 05683$	0,47862 86704 99366
	5; 1	$\pm 0,90617\ 98459\ 38664$	0,23692 68850 56189
6	4; 3	$\pm 0,23861\ 91860\ 83197$	0,46791 39345 72691
	5; 2	$\pm 0,66120\ 93864\ 66265$	0,36076 15730 48139
	6; 1	$\pm 0,93246\ 95142\ 03152$	0,17132 44923 79170
7	4	0	0,41795 91836 73469
	5; 3	$\pm 0,40584\ 51513\ 77397$	0,38183 00505 05119
	6; 2	$\pm 0,74153\ 11855\ 99394$	0,27970 53914 89277
	7; 1	$\pm 0,94910\ 79123\ 42759$	0,12948 49661 68870
8	5; 4	$\pm 0,18343\ 46424\ 95650$	0,36268 37833 78362
	6; 3	$\pm 0,52553\ 24099\ 16329$	0,31370 66458 77887
	7; 2	$\pm 0,79666\ 64774\ 13627$	0,22238 10344 53374
	8; 1	$\pm 0,96028\ 98564\ 97536$	0,10122 85362 90376
9	5	0	0,33023 93550 01260
	6; 4	$\pm 0,32425\ 34234\ 03809$	0,31234 70770 40003
	7; 3	$\pm 0,61337\ 14327\ 00590$	0,26061 06964 02935
	8; 2	$\pm 0,83603\ 11073\ 26636$	0,18064 81606 94857
	9; 1	$\pm 0,96816\ 02395\ 07626$	0,08127 43883 61574
10	6; 5	$\pm 0,14887\ 43389\ 81631$	0,29552 42247 14753
	7; 4	$\pm 0,43339\ 53941\ 29247$	0,26926 67193 09996
	8; 3	$\pm 0,67940\ 95682\ 99024$	0,21908 63625 15982
	9; 2	$\pm 0,86506\ 33666\ 88985$	0,14945 13491 50581
	10; 1	$\pm 0,97390\ 65285\ 17172$	0,06667 13443 08688

Exemplo 5.18 Verificar a ortogonalidade dos polinômios $L_2(x)$ e $L_3(x)$ de Legendre.

Os polinômios serão ortogonais se

$$\int_{-1}^1 L_2(x)L_3(x)dx = 0.$$

Assim,

$$\int_{-1}^1 L_2(x)L_3(x)dx = \int_{-1}^1 \left(\frac{3x^2-1}{2}\right) \left(\frac{5x^3-3x}{2}\right) dx,$$

$$\int_{-1}^1 L_2(x)L_3(x)dx = \int_{-1}^1 \frac{1}{4} (15x^5 - 14x^3 + 3x) dx,$$

$$\int_{-1}^1 L_2(x)L_3(x)dx = \frac{1}{4} \left(\frac{15}{6}x^6 - \frac{7}{2}x^4 + \frac{3}{2}x^2 \right) \Big|_{-1}^1,$$

$$\int_{-1}^1 L_2(x)L_3(x)dx = 0.$$

Exemplo 5.19 Verificar que $\pi = 4 \int_0^1 \frac{1}{1+x^2} dx$ por intermédio de (5.17) com $n = 3$ e $n = 4$.

Por (5.12),

$$x_i = \frac{b-a}{2}t_i + \frac{a+b}{2} = \frac{1-0}{2}t_i + \frac{0+1}{2} \leadsto x_i = \frac{1}{2}(t_i + 1).$$

No dispositivo prático, $i = 1, 2, \dots, n$; t_i são os n zeros do polinômio de Legendre de grau n e A_i são os n pesos obtidos da Tabela 5.3 ou pela expressão (5.20).

Para $n = 3$

i	t_i	x_i	$f(x_i)$	A_i
1	-0,77460	0,11270	0,98746	0,55556
2	0	0,50000	0,80000	0,88889
3	0,77460	0,88730	0,55950	0,55556

Usando (5.17) com $n = 3$, tem-se que

$$I_3 = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^3 A_i f(x_i) \rightarrow I_3 = 0,78527 \leadsto 4 \times I_3 = 3,14108 \approx \pi.$$

Para $n = 4$

i	t_i	x_i	$f(x_i)$	A_i
1	-0,86114	0,06943	0,99520	0,34785
2	-0,33998	0,33001	0,90179	0,65215
3	0,33998	0,66999	0,69019	0,65215
4	0,86114	0,93057	0,53592	0,34785

Utilizando (5.17) com $n = 4$, obtém-se

$$I_4 = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^4 A_i f(x_i) \rightarrow I_4 = 0,78540 \leadsto 4 \times I_4 = 3,14160 \approx \pi.$$

Exemplo 5.20 Calcular $\int_0^\pi (e^x + \sin(x) + 2)dx$ do Exemplo 5.11, pela quadratura de Gauss-Legendre com $n = 5$.

Por (5.12),

$$x_i = \frac{b-a}{2}t_i + \frac{a+b}{2} = \frac{\pi-0}{2}t_i + \frac{0+\pi}{2} \leadsto x_i = \frac{\pi}{2}(t_i + 1).$$

i	t_i	x_i	$f(x_i)$	A_i
1	-0,90618	0,14737	3,30562	0,23693
2	-0,53847	0,72497	4,72778	0,47863
3	0	1,57080	7,81050	0,56889
4	0,53847	2,41662	13,87103	0,47863
5	0,90618	2,99422	22,11662	0,23693

Usando (5.17) com $n = 5$, tem-se

$$I_5 = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^5 A_i f(x_i) \rightarrow I_5 = 30,42406.$$

Comparando com o resultado exato que é aproximadamente 30,42388, a quadratura de Gauss-Legendre com $n = 5$ produz um resultado mais exato do que a primeira regra de Simpson com $m = 6$ (30,4337).

5.2.3 Erro de integração da fórmula de Gauss-Legendre

O erro de integração da fórmula de Gauss-Legendre é, conforme Demidovich e Maron [10], dado por

$$E_n = \frac{(b-a)^{2n+1}(n!)^4}{((2n)!)^3(2n+1)} f^{2n}(\theta), \quad a < \theta < b, \quad (5.21)$$

onde θ é a abscissa, na qual a derivada $f^{2n}(x)$ apresenta o maior valor em módulo no intervalo $[a, b]$. Conseqüentemente, (5.21) fornece a cota máxima do erro de integração da fórmula de Gauss-Legendre.

Exemplo 5.21 Calcular $\int_0^\pi \left(\frac{x^4}{4} + x^2 + \sin(x) \right) dx$ usando o método de Gauss-Legendre com $n = 2$ e o respectivo erro de integração.

Por (5.12),

$$x_i = \frac{b-a}{2}t_i + \frac{a+b}{2} = \frac{\pi-0}{2}t_i + \frac{0+\pi}{2} \leadsto x_i = \frac{\pi}{2}(t_i + 1).$$

Para $n = 2$

i	t_i	x_i	$f(x_i)$	A_i
1	-0,57735	0,66390	1,10552	1
2	0,57735	2,47770	16,17701	1

Usando (5.17) com $n = 2$, tem-se que

$$I_2 = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^2 A_i f(x_i) \rightsquigarrow I_2 = 27,14733.$$

Para o cálculo do erro máximo,

$$f(x) = \frac{x^4}{4} + x^2 + \sin(x), \quad f'(x) = x^3 + 2x + \cos(x),$$

$$f''(x) = 3x^2 + 2 - \sin(x), \quad f'''(x) = 6x - \cos(x) \text{ e}$$

$$f^{iv}(x) = 6 + \sin(x) \rightsquigarrow \theta = \frac{\pi}{2}.$$

Por (5.21),

$$E_n = \frac{(b-a)^{2n+1} (n!)^4}{((2n)!)^3 (2n+1)} f^{2n}(\theta) \rightarrow E_2 = \frac{(\pi-0)^5 (2!)^4}{(4!)^3 (5)} \left(6 + \sin\left(\frac{\pi}{2}\right)\right) \rightsquigarrow$$

$$E_2 = 0,49587.$$

Considerando que o valor exato da integral é aproximadamente 27,63641, então o erro real é $|27,63641 - 27,14733| = 0,48908 < E_2$. ■

5.2.4 Algoritmos e complexidade

Inicialmente, as abscissas t_i , isto é, os zeros do polinômio de Legendre (5.18), são calculadas pelo método de Newton (ver Seção 6.5.1), e os pesos A_i pela expressão (5.20), segundo um esquema proposto por Rybicki [34, página 145]. Esse esquema foi implementado no algoritmo **PesAbsGL** da Figura 5.12.

O parâmetro de entrada é o número de pontos n da fórmula desejada. Os parâmetros de saída são o vetor A com os pesos, o vetor T com as abscissas e **CondErro**, a condição de erro no parâmetro de entrada. Se **CondErro** = 0 não houve erro de consistência ($n \geq 1$), e **CondErro** = 1 significa que $n < 1$. Como os zeros dos polinômios de Legendre são simétricos em relação à origem, somente as abscissas não negativas são calculadas. Este algoritmo pode ser utilizado também para gerar os valores de t_i e A_i como aqueles descritos na Tabela 5.3.

Exemplo 5.22 Calcular os pesos e as abscissas para a fórmula de Gauss-Legendre com $n = 5$, utilizando o algoritmo da Figura 5.12.

Algoritmo PesAbsGL

```

{ Objetivo: Calcular pesos e abscissas para a fórmula de Gauss-Legendre }
parâmetros de entrada  $n$  { número de pontos }
parâmetros de saída  $A$ ,  $T$ ,  $CondErro$ 
{ Pesos, abscissas e condição de erro, sendo }
{  $CondErro = 0$  se não houve erro ( $n \geq 1$ ) e  $CondErro = 1$  se  $n < 1$  }
se  $n < 1$  então  $CondErro \leftarrow 1$ , abandone, fimse
 $CondErro \leftarrow 0$ ;  $pi \leftarrow 3,14159265358979323846$ ;  $m \leftarrow \text{trunca}(0,5 * (n + 1))$ 
para  $i \leftarrow 1$  até  $m$  faça
     $z \leftarrow \cos(pi * (i - 0,25)/(n + 0,5))$ 
    repita
         $p1 \leftarrow 1$ ;  $p2 \leftarrow 0$ 
        para  $j \leftarrow 1$  até  $n$  faça
             $p3 \leftarrow p2$ ;  $p2 \leftarrow p1$ 
            { polinômio de Legendre no ponto  $z$  }
             $p1 \leftarrow ((2 * j - 1) * z * p2 - (j - 1) * p3)/j$ 
        fimpara
        { derivada do polinômio de Legendre no ponto  $z$  }
         $pp \leftarrow n * (z * p1 - p2)/(z^2 - 1)$ ;  $z1 \leftarrow z$ 
        { método de Newton para calcular os zeros do polinômio }
         $z \leftarrow z1 - p1/pp$ 
        se  $\text{abs}(z - z1) < 10^{-15}$  então interrompa, fimse
    fimrepita
     $T(m + 1 - i) \leftarrow z$  { abscissa }
     $A(m + 1 - i) \leftarrow 2/((1 - z^2) * pp^2)$  { peso }
    { somente as raízes não negativas são calculadas devido à simetria }
fimpara
fim algoritmo

```

Figura 5.12 Cálculo das abscissas e pesos para as fórmulas de Gauss-Legendre.

(Ver significado das funções abs , \cos e trunca na Tabela 1.1, na página 6.)

```

% 0 parametro de entrada
n = 5
% produz os resultados
A = 0.568888888888889    0.47862867049937    0.23692688505619
T =                      0    0.53846931010568    0.90617984593866
CondErro = 0

```

A Figura 5.13 apresenta o algoritmo **Gauss-Legendre** para integrar uma função $f(x)$ de a até b pelo método de Gauss-Legendre com qualquer número de pontos $n \geq 1$. Os parâmetros de entrada são os limites de integração inferior a e superior b e o número de pontos n da fórmula desejada. A função $f(x)$ deve ser especificada de acordo com a linguagem de programação adotada. Os parâmetros de saída são o valor da integração *Integral* e *CondErro*,

a condição de erro do número de pontos, sendo que $CondErro = 0$ significa que não houve erro de consistência ($n \geq 1$) e $CondErro = 1$ indica que $n < 1$. Os pesos e as abscissas são calculados pelo algoritmo **PesAbsGL** da Figura 5.12. No entanto, o algoritmo **Gauss-Legendre** pode ser adaptado de forma que os pesos e as abscissas possam ser fornecidos como parâmetros de entrada.

Algoritmo Gauss-Legendre

```
{ Objetivo: Integrar uma função pelo método de Gauss-Legendre }
parâmetros de entrada a, b, n
    { limite inferior, limite superior, número de pontos }
parâmetros de saída Integral, CondErro
    { valor da integral e condição de erro, sendo }
    { CondErro = 0 se não houve erro ( $n \geq 1$ ) e CondErro = 1 se  $n < 1$  }
    Integral  $\leftarrow$  0
    { cálculo dos pesos e abscissas }
    [Avet, Tvet, CondErro]  $\leftarrow$  PesAbsGL(n) (ver Figura 5.12)
    se CondErro  $\neq$  0 então abandone, fimse
    { cálculo da integral }
    e1  $\leftarrow$  (b - a) / 2
    e2  $\leftarrow$  (a + b) / 2
    se resto(n, 2) = 0 então
        c1  $\leftarrow$  1; c2  $\leftarrow$  0.5
    senão
        c1  $\leftarrow$  0; c2  $\leftarrow$  1
    fimse
    para i  $\leftarrow$  1 até n faça
        k  $\leftarrow$  trunca(i - 0,5 * (n + 1) + sinal(i - 0,5 * (n + c1)) * c2)
        t  $\leftarrow$  sinal(k) * Tvet(abs(k))
        x  $\leftarrow$  e1 * t + e2
        y  $\leftarrow$  f(x) { avaliar a função integrando em x }
        c  $\leftarrow$  Avet(abs(k))
        Integral  $\leftarrow$  Integral + y * c
        escreva i, t, x, y, c
    fimpara
    Integral  $\leftarrow$  e1 * Integral
fim algoritmo
```

Figura 5.13 Integração numérica pelo método de Gauss-Legendre.

(Ver significado das funções *abs*, *resto*, *trunca* e *sinal* na Tabela 1.1, na página 6.)

Durante o cálculo da integral, a variável *k*, avaliada de modo não trivial, fornece a posição dos pesos e das abscissas nos vetores *Avet* e *Tvet*, respectivamente, além de controlar o sinal das abscissas, visto que somente aquelas positivas e nulas são calculadas e armazenadas.

A Tabela 5.4 apresenta a complexidade computacional da quadratura de Gauss-Legendre quando implementada pelo algoritmo da Figura 5.13.

Tabela 5.4 Complexidade da integração pela quadratura de Gauss-Legendre.

Operações	Complexidade
adições	$7n + 2$
multiplicações	$6n + 1$
divisões	2

Exemplo 5.23 Calcular $\int_0^\pi \sin(x) dx$ pelo algoritmo da Figura 5.13 com $n = 5$ e $n = 6$.

Para $n = 5$

```
% Os parametros de entrada
a = 0
b = 3.14159
n = 5
% produzem os resultados
Integracao numerica pelo metodo de Gauss-Legendre
i      t(i)      x(i)      f(x(i))      A(i)
1      -0.90618   0.14737   0.14684   0.23693
2      -0.53847   0.72497   0.66311   0.47863
3       0.00000   1.57080   1.00000   0.56889
4       0.53847   2.41662   0.66312   0.47863
5       0.90618   2.99422   0.14684   0.23693

Integral = 2.0000001103
CondErro = 0
```

Para $n = 6$

```
% Os parametros de entrada
a = 0
b = 3.14159
n = 6
% produzem os resultados
Integracao numerica pelo metodo de Gauss-Legendre
i      t(i)      x(i)      f(x(i))      A(i)
1      -0.93247   0.10608   0.10588   0.17132
2      -0.66121   0.53217   0.50740   0.36076
3      -0.23862   1.19597   0.93057   0.46791
4       0.23862   1.94562   0.93057   0.46791
5       0.66121   2.60942   0.50741   0.36076
6       0.93247   3.03551   0.10588   0.17132

Integral = 1.9999999995
CondErro = 0
```

Exemplo 5.24 Verificar que $\pi = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$ com $n = 10$ utilizando o algoritmo descrito na Figura 5.13.

```
% Os parametros de entrada
a = 0
b = 1
n = 10
% produzem os resultados
Integracao numerica pelo metodo de Gauss-Legendre


| i  | t(i)     | x(i)    | f(x(i)) | A(i)    |
|----|----------|---------|---------|---------|
| 1  | -0.97391 | 0.01305 | 3.99932 | 0.06667 |
| 2  | -0.86506 | 0.06747 | 3.98187 | 0.14945 |
| 3  | -0.67941 | 0.16030 | 3.89980 | 0.21909 |
| 4  | -0.43340 | 0.28330 | 3.70281 | 0.26927 |
| 5  | -0.14887 | 0.42556 | 3.38666 | 0.29552 |
| 6  | 0.14887  | 0.57444 | 3.00757 | 0.29552 |
| 7  | 0.43340  | 0.71670 | 2.64261 | 0.26927 |
| 8  | 0.67941  | 0.83970 | 2.34590 | 0.21909 |
| 9  | 0.86506  | 0.93253 | 2.13948 | 0.14945 |
| 10 | 0.97391  | 0.98695 | 2.02626 | 0.06667 |


Integral = 3.1415926536
CondErro = 0
```

5.3 Comparação dos métodos de integração simples

Pelos exemplos apresentados neste capítulo, parece óbvio que a quadratura de Gauss-Legendre é bem superior aos métodos de Newton-Cotes. A seguir, serão feitas comparações entre essas duas classes de métodos por intermédio de três exemplos.

Primeiramente, seja a integral da função apresentada na Figura 5.14(a),

$$\int_0^{\pi} \sin(x) dx,$$

cuja solução exata é

$$I = -\cos(x) \Big|_0^{\pi} = 2.$$

A Tabela 5.5 mostra a diferença entre o valor exato e os resultados obtidos pelas diversas fórmulas de integração.

Foram utilizadas regras simples de Newton-Cotes, isto é, o grau do polinômio é igual ao número de subintervalos. Além disso, o número de pontos de Gauss-Legendre é igual a $m + 1$, sendo m o número de subintervalos de Newton-Cotes, de forma a ter um mesmo número de pontos avaliados da função. É inquestionável a vantagem da quadratura de Gauss-Legendre sobre a de Newton-Cotes.

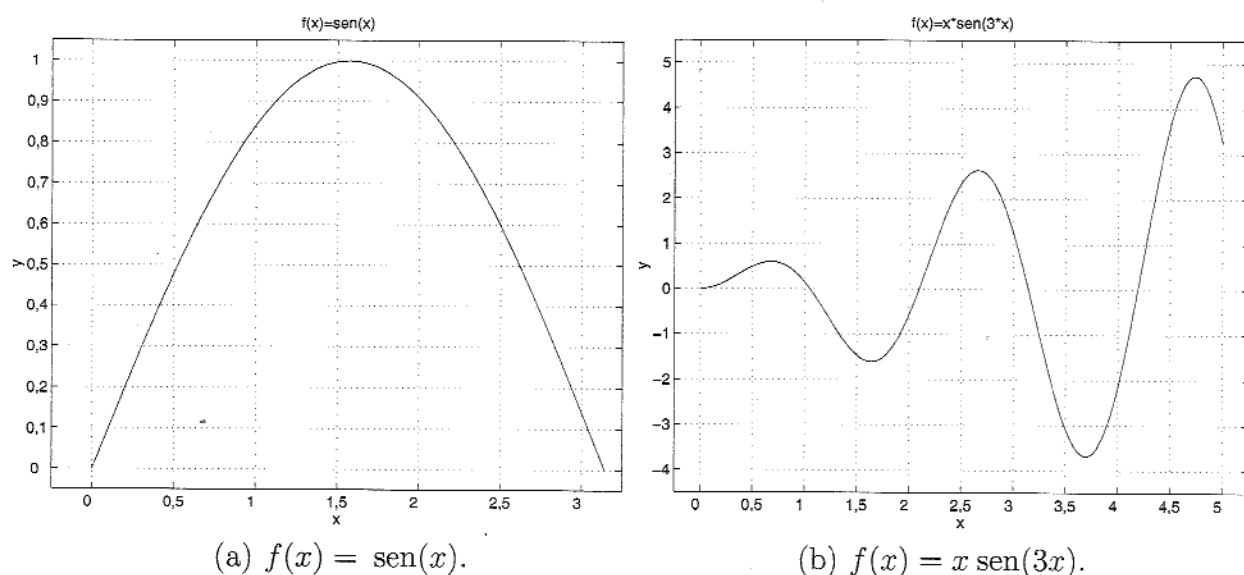


Figura 5.14 Funções usadas na comparação das regras de integração.

Tabela 5.5 Comparação entre Newton-Cotes e Gauss-Legendre.

Grau do polinômio	Número de subintervalos	Newton-Cotes	Número de pontos	Gauss-Legendre
1	1	$2,000 \times 10^0$	2	$6,418 \times 10^{-2}$
2	2	$9,440 \times 10^{-2}$	3	$1,389 \times 10^{-3}$
3	3	$4,052 \times 10^{-2}$	4	$1,577 \times 10^{-5}$
4	4	$1,429 \times 10^{-3}$	5	$1,103 \times 10^{-7}$
5	5	$7,969 \times 10^{-4}$	6	$5,227 \times 10^{-10}$
6	6	$1,781 \times 10^{-5}$	7	$1,791 \times 10^{-12}$
7	7	$1,087 \times 10^{-5}$	8	$4,441 \times 10^{-15}$
8	8	$1,647 \times 10^{-7}$	9	$4,441 \times 10^{-16}$

Seja agora a integral da função apresentada na Figura 5.14(b)

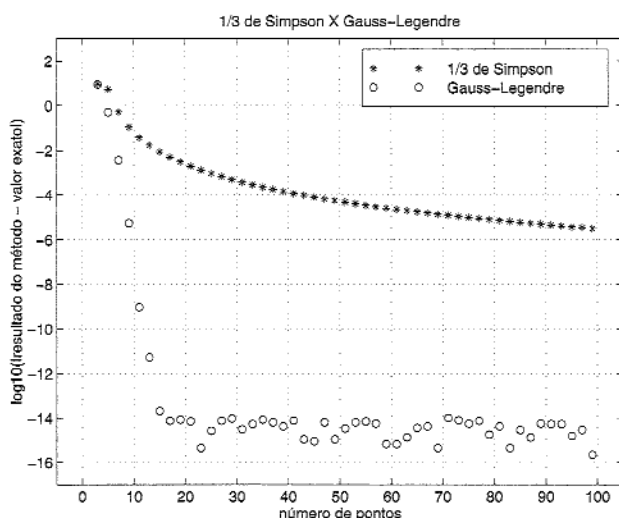
$$\int_0^5 x \text{sen}(3x) dx = \left. \frac{\text{sen}(3x)}{9} - \frac{x \cos(3x)}{3} \right|_0^5 \approx 1,3384.$$

A Figura 5.15(a) mostra uma tabela com a diferença entre o valor exato e o obtido pela regra do 1/3 de Simpson com vários números de subintervalos m e Gauss-Legendre com $m + 1$ pontos.

Por sua vez, a Figura 5.15(b) exibe um gráfico de \log_{10} da diferença entre o valor exato e o valor calculado pelos dois métodos de integração para cada valor de m . A partir de $m = 15$, os resultados obtidos por Gauss-Legendre estabilizam em torno da precisão do computador ($\approx 10^{-15}$), enquanto os valores da primeira regra de Simpson tendem lentamente para uma maior exatidão. Também por este exemplo é evidente a supremacia da quadratura de Gauss-Legendre sobre a primeira regra de Simpson.

m	1/3 de Simpson	Gauss-Legendre
2	$9,188 \times 10^0$	$8,819 \times 10^0$
4	$5,269 \times 10^0$	$4,990 \times 10^{-1}$
6	$5,221 \times 10^{-1}$	$3,629 \times 10^{-3}$
8	$1,093 \times 10^{-1}$	$5,452 \times 10^{-6}$
10	$3,799 \times 10^{-2}$	$9,417 \times 10^{-10}$
12	$1,688 \times 10^{-2}$	$5,250 \times 10^{-12}$
14	$8,689 \times 10^{-3}$	$8,660 \times 10^{-15}$
16	$4,944 \times 10^{-3}$	$1,110 \times 10^{-15}$

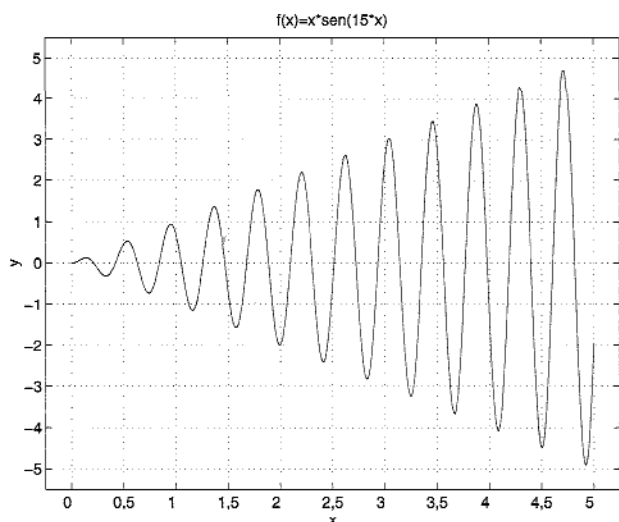
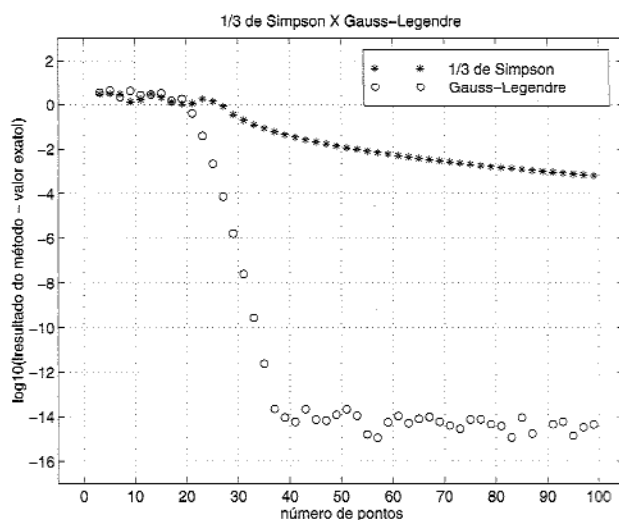
(a) | método - exato |

(b) $\log_{10}(| \text{método} - \text{exato} |) \times m$ **Figura 5.15** Comparação entre a regra do 1/3 de Simpson e Gauss-Legendre.

Finalmente, considere a integral da função mostrada na Figura 5.16(a),

$$\int_0^5 x \sin(15x) dx = \frac{\sin(15x)}{225} - \frac{x \cos(15x)}{15} \Big|_0^5 \approx -0,3090.$$

Como esta é uma função menos suave que as outras duas, as fórmulas de integração necessitam de mais pontos para fornecerem uma exatidão aceitável, conforme a Figura 5.16(b). Somente para $m > 37$, Gauss-Legendre produz resultados que estabilizam em torno da precisão do computador. Todavia, para este exemplo, a primeira regra de Simpson está longe de gerar um resultado aceitável com $m < 100$.

(a) $f(x) = x \sin(15x)$.

(b) 1/3 de Simpson e Gauss-Legendre.

Figura 5.16 Integração de uma função não suave.

5.4 Integração numérica iterativa

As Figuras 5.15(b) e 5.16(b) evidenciam que as fórmulas de integração, principalmente de Gauss-Legendre, calculam a integral com grau crescente de exatidão à medida que aumenta o número de pontos. O algoritmo **Gauss-Legendre iterativo**, apresentado na Figura 5.17, calcula a integral de uma função $f(x)$ de a até b , pelo método de Gauss-Legendre, utilizando um processo iterativo. Inicialmente, a integral é calculada com $n = 8$ pontos e depois com $n = 13$ pontos. Se a diferença relativa entre os dois valores da integral for menor ou igual a uma dada tolerância, então o processo termina. Caso contrário, o valor de n é incrementado, seguindo uma série de Fibonacci, e a integral é calculada novamente. O processo repete até que a diferença relativa entre os dois últimos valores da integral seja menor ou igual à tolerância predefinida.

Os parâmetros de entrada do algoritmo da Figura 5.17 são os limites de integração inferior a e superior b , a tolerância *Toler* e o número máximo de iterações *IterMax*. A função $f(x)$ deve ser especificada de acordo com a linguagem de programação escolhida. Os parâmetros de saída são o resultado da integração *Integral*, a menor diferença relativa obtida *Delta* e a condição de erro *CondErro*, em que *CondErro* = 0 significa que $\Delta \leq \text{Toler}$ e *CondErro* = 1 avisa que $\Delta > \text{Toler}$. O algoritmo **Gauss-Legendre** da Figura 5.13 é evocado para calcular a integral.

Exemplo 5.25 Calcular $\int_0^{20} x \sin(15x) dx$ utilizando o algoritmo mostrado na Figura 5.17, com uma tolerância de 10^{-10} e com, no máximo, 10 iterações. Um esboço desta função é exibido na Figura 5.16(a), para $0 \leq x \leq 5$.

```
% Os parametros de entrada
a = 0
b = 20
Toler = 1e-10
IterMax = 10
% produzem os resultados
Integracao iterativa pelo metodo de Gauss-Legendre


| Iter | n   | Integral       | Dif. relativa |
|------|-----|----------------|---------------|
| 1    | 8   | 32.7305341124  |               |
| 2    | 13  | 24.9187432521  | 3.135e-01     |
| 3    | 21  | -16.8767733573 | 2.477e+00     |
| 4    | 34  | 49.5529883366  | 1.341e+00     |
| 5    | 55  | -31.2365609799 | 2.586e+00     |
| 6    | 89  | 0.0247820806   | 1.261e+03     |
| 7    | 144 | 0.0250187998   | 9.462e-03     |
| 8    | 233 | 0.0250187997   | 1.006e-11     |


Integral = 2.5018799750e-02
Delta = 1.00649e-11
CondErro = 0
```

Como *CondErro* = 0, isto significa que a integral foi calculada com sucesso, com uma diferença relativa menor ou igual à tolerância desejada. ■

Algoritmo Gauss-Legendre iterativo
 { **Objetivo:** Integrar uma função iterativamente pelo método de Gauss-Legendre }
parâmetros de entrada $a, b, Toler, IterMax$
 { limite inferior, limite superior, tolerância e número máximo de iterações }
parâmetros de saída $Integral, Delta, CondErro$
 { valor da integral, menor diferença relativa obtida e condição de erro, sendo }
 { $CondErro = 0$ se $Delta \leq Toler$ e $CondErro = 1$ se $Delta > Toler$ }
 $Iter \leftarrow 1; n1 \leftarrow 5; n2 \leftarrow 8$
 $[Int, CondErro] \leftarrow \text{Gauss-Legendre}(a, b, n2)$ (ver Figura 5.13)
 escreva $Iter, n2, Int$
 { sucessivos cálculos das integrais }
repita
 $Iter \leftarrow Iter + 1; n \leftarrow n1 + n2$
 $[Integral, CondErro] \leftarrow \text{Gauss-Legendre}(a, b, n)$
 se $Integral \neq 0$ então
 $Delta \leftarrow \text{abs}((Integral - Int)/Integral)$
 senão
 $Delta \leftarrow \text{abs}(Integral - Int)$
 fim se
 escreva $Iter, n, Integral, Delta$
 se $Delta \leq Toler$ ou $Iter = IterMax$ então interrompa, fim se
 $Int \leftarrow Integral; n1 \leftarrow n2; n2 \leftarrow n$
fim repita
 { teste de convergência }
 se $Delta \leq Toler$ então
 $CondErro \leftarrow 0$
 senão
 $CondErro \leftarrow 1$
 fim se
fim algoritmo

Figura 5.17 Integração iterativa pelo método de Gauss-Legendre.

(Ver significado da função abs na Tabela 1.1, na página 6.)

5.5 Integração dupla pelas fórmulas de Newton-Cotes

O cálculo de uma integral dupla definida

$$I = \int_a^b \int_c^d f(x, y) dy dx \quad (5.22)$$

é de grande valia na solução de problemas de diversas áreas. De modo similar à integração simples, a função integrando $f(x, y)$ pode ser aproximada por um polinômio interpolador, e a integral deste polinômio é, então, obtida analiticamente. O texto sobre integração dupla, a seguir, é baseado em um trabalho de Bocanegra, Medeiros e Campos [5].

Fazendo $G(x) = \int_c^d f(x, y) dy$ em (5.22), tem-se que

$$I = \int_a^b G(x) dx. \quad (5.23)$$

Desse modo, o cálculo de uma integral dupla consiste na solução de duas integrais simples.

5.5.1 Fórmulas simples

Para resolver uma integral simples, pode-se aplicar qualquer uma das fórmulas de Newton-Cotes. Se for utilizada a regra do 1/3 de Simpson em (5.23), tem-se

$$I = \int_a^b G(x) dx = \frac{1}{3} h_x (G(x_0) + 4G(x_1) + G(x_2)), \quad (5.24)$$

$$I = \frac{1}{3} h_x \sum_{i=0}^2 c_{x_i} G(x_i),$$

onde $h_x = (b - a)/2$, $c_{x_0} = c_{x_2} = 1$, $c_{x_1} = 4$ e $G(x_i) = \int_c^d f(x_i, y) dy$, $i = 0, 1, 2$.

Para o cálculo de $G(x_i)$ pode ser utilizada também qualquer uma das fórmulas de Newton-Cotes, como, por exemplo, a regra dos 3/8 de Simpson

$$\begin{aligned} G(x_i) &= \int_c^d f(x_i, y) dy \\ &= \frac{3}{8} h_y (f(x_i, y_0) + 3f(x_i, y_1) + 3f(x_i, y_2) + f(x_i, y_3)), \\ G(x_i) &= \frac{3}{8} h_y \sum_{j=0}^3 c_{y_j} f(x_i, y_j), \end{aligned} \quad (5.25)$$

onde $h_y = (d - c)/3$, $c_{y_0} = c_{y_3} = 1$, $c_{y_1} = c_{y_2} = 3$ e $f(x_i, y_j)$ é o valor da função integrando no ponto (x_i, y_j) . Levando os valores de $G(x_i)$ dados por (5.25) em (5.24), obtém-se o valor da integral dupla

$$I = \frac{1}{3} h_x \frac{3}{8} h_y \sum_{i=0}^2 \sum_{j=0}^3 c_{x_i} c_{y_j} f(x_i, y_j). \quad (5.26)$$

Exemplo 5.26 Calcular $I = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{4}} \text{sen}(x + y) dy dx$.

Fazendo $G(x) = \int_0^{\frac{\pi}{4}} \text{sen}(x + y) dy \rightarrow I = \int_0^{\frac{\pi}{2}} G(x) dx$. Utilizando a regra do 1/3 de Simpson em x , tem-se

$$I = \frac{1}{3} h_x (G(x_0) + 4G(x_1) + G(x_2)), \text{ com } h_x = \frac{b - a}{2} = \frac{\pi}{4}.$$

Para o cálculo de $G(x_i) = \int_0^{\frac{\pi}{4}} \text{sen}(x_i + y) dy$, $i = 0, 1, 2$ e $x_i = a + ih_x = i\frac{\pi}{4}$, pode ser utilizada a regra dos 3/8 de Simpson

$$G(x_i) = \frac{3}{8}h_y(\text{sen}(x_i + y_0) + 3\text{sen}(x_i + y_1) + 3\text{sen}(x_i + y_2) + \text{sen}(x_i + y_3)),$$

com

$$h_y = \frac{d-c}{3} = \frac{\pi}{12} \text{ e } y_j = c + jh_y = j\frac{\pi}{12}.$$

Para $x_0 = 0 \times \frac{\pi}{4} = 0$

$$G(x_0) = \frac{3}{8}\frac{\pi}{12}(\text{sen}(0 + y_0) + 3\text{sen}(0 + y_1) + 3\text{sen}(0 + y_2) + \text{sen}(0 + y_3)),$$

$$G(x_0) = \frac{\pi}{32}\left(\text{sen}(0) + 3\text{sen}\left(\frac{\pi}{12}\right) + 3\text{sen}\left(\frac{\pi}{6}\right) + \text{sen}\left(\frac{\pi}{4}\right)\right) \leadsto$$

$$G(x_0) = 0,2929.$$

Para $x_1 = 1 \times \frac{\pi}{4} = \frac{\pi}{4}$

$$G(x_1) = \frac{3}{8}\frac{\pi}{12}\left(\text{sen}\left(\frac{\pi}{4} + y_0\right) + 3\text{sen}\left(\frac{\pi}{4} + y_1\right) + 3\text{sen}\left(\frac{\pi}{4} + y_2\right) + \text{sen}\left(\frac{\pi}{4} + y_3\right)\right),$$

$$G(x_1) = \frac{\pi}{32}\left(\text{sen}\left(\frac{\pi}{4}\right) + 3\text{sen}\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{12}\right) + 3\text{sen}\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{6}\right) + \text{sen}\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{4}\right)\right) \leadsto$$

$$G(x_1) = 0,7071.$$

Para $x_2 = 2 \times \frac{\pi}{4} = \frac{\pi}{2}$

$$G(x_2) = \frac{3}{8}\frac{\pi}{12}\left(\text{sen}\left(\frac{\pi}{2} + y_0\right) + 3\text{sen}\left(\frac{\pi}{2} + y_1\right) + 3\text{sen}\left(\frac{\pi}{2} + y_2\right) + \text{sen}\left(\frac{\pi}{2} + y_3\right)\right),$$

$$G(x_2) = \frac{\pi}{32}\left(\text{sen}\left(\frac{\pi}{2}\right) + 3\text{sen}\left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{12}\right) + 3\text{sen}\left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{6}\right) + \text{sen}\left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right)\right) \leadsto$$

$$G(x_2) = 0,7071.$$

Considerando que

$$I = \frac{1}{3}h_x(G(x_0) + 4G(x_1) + G(x_2)),$$

$$I = \frac{1}{3}\frac{\pi}{4}(0,2929 + 4 \times 0,7071 + 0,7071) \leadsto I = 1,0023.$$

Resolvendo esta integral analiticamente, tem-se que

$$I = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{4}} \sin(x+y) dy dx = - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos(x+y) \Big|_0^{\frac{\pi}{4}} dx,$$

$$I = - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(\cos\left(x + \frac{\pi}{4}\right) - \cos(x+0) \right) dx = - \left[\sin\left(x + \frac{\pi}{4}\right) - \sin(x) \right] \Big|_0^{\frac{\pi}{2}},$$

$$I = - \left(\sin\left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right) - \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \right) + \left(\sin\left(0 + \frac{\pi}{4}\right) - \sin(0) \right) \leadsto I = 1.$$

Dispositivo prático

Os dados necessários para calcular uma integral dupla pelas fórmulas de Newton-Cotes podem ser sumarizados em um dispositivo prático. Se a regra do 1/3 de Simpson for utilizada para a integração em x e a regra dos 3/8 em y , ter-se-á um dispositivo como o mostrado na Tabela 5.6.

Tabela 5.6 Dispositivo prático para integração dupla por Newton-Cotes.

		j	0	1	2	3
		y_j	c	$c + h_y$	$c + 2h_y$	$c + 3h_y$
i	x_i	$c_{x_i} \backslash c_{y_j}$	1	3	3	1
0	a	1	$c_{x_0} \times c_{y_0}$ $f(x_0, y_0)$	$c_{x_0} \times c_{y_1}$ $f(x_0, y_1)$	$c_{x_0} \times c_{y_2}$ $f(x_0, y_2)$	$c_{x_0} \times c_{y_3}$ $f(x_0, y_3)$
1	$a + h_x$	4	$c_{x_1} \times c_{y_0}$ $f(x_1, y_0)$	$c_{x_1} \times c_{y_1}$ $f(x_1, y_1)$	$c_{x_1} \times c_{y_2}$ $f(x_1, y_2)$	$c_{x_1} \times c_{y_3}$ $f(x_1, y_3)$
2	$a + 2h_x$	1	$c_{x_2} \times c_{y_0}$ $f(x_2, y_0)$	$c_{x_2} \times c_{y_1}$ $f(x_2, y_1)$	$c_{x_2} \times c_{y_2}$ $f(x_2, y_2)$	$c_{x_2} \times c_{y_3}$ $f(x_2, y_3)$

Fazendo

$$S = \sum_{i=0}^2 \sum_{j=0}^3 c_{x_i} c_{y_j} f(x_i, y_j), \text{ então por (5.26), tem-se } I = \frac{1}{3} h_x \frac{3}{8} h_y S,$$

onde S é a soma obtida, tomando-se todas as células da tabela, do produto $c_{x_i} \times c_{y_j}$ dos coeficientes de Cotes pelo valor da função $f(x_i, y_j)$.

Exemplo 5.27 Calcular $I = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{4}} \sin(x+y) dy dx$ usando o dispositivo prático mostrado na Tabela 5.6.

Para tal,

$$h_x = \frac{b-a}{2} = \frac{\pi/2-0}{2} \rightarrow h_x = \frac{\pi}{4} \text{ e } x_i = a + i h_x = 0 + i \frac{\pi}{4} \rightarrow x_i = i \frac{\pi}{4},$$

$$h_y = \frac{d-c}{3} = \frac{\pi/4-0}{3} \rightarrow h_y = \frac{\pi}{12} \text{ e } y_j = c + j h_y = 0 + j \frac{\pi}{12} \rightarrow y_j = j \frac{\pi}{12}.$$

			j	0	1	2	3
			y_j	0	$\pi/12$	$\pi/6$	$\pi/4$
i	x_i	$c_{x_i} \setminus c_{y_j}$	1	3	3	1	
0	0	1	$\boxed{1}$ 0,0000	$\boxed{3}$ 0,2588	$\boxed{3}$ 0,5000	$\boxed{1}$ 0,7071	
1	$\pi/4$	4	$\boxed{4}$ 0,7071	$\boxed{12}$ 0,8660	$\boxed{12}$ 0,9659	$\boxed{4}$ 1,0000	
2	$\pi/2$	1	$\boxed{1}$ 1,0000	$\boxed{3}$ 0,9659	$\boxed{3}$ 0,8660	$\boxed{1}$ 0,7071	

Portanto, o valor da integral é

$$I = \frac{1}{3} h_x \frac{3}{8} h_y S = \frac{1}{3} \frac{\pi}{4} \frac{3}{8} \frac{\pi}{12} 38,9975 \leadsto I = 1,0023.$$

5.5.2 Fórmulas compostas

Para melhorar a exatidão de uma integral, deve-se subdividir o intervalo $[a, b]$ em m_x subintervalos iguais, sendo m_x múltiplo do grau n_x do polinômio interpolador utilizado para obter a regra de integração em x . No caso da regra do 1/3 de Simpson, m_x deve ser múltiplo de 2 ($= n_x$). Aplicando (5.24) a cada 3 ($= n_x + 1$) pontos, tem-se

$$\begin{aligned}
 I &= \int_a^b G(x) dx \\
 &= \frac{1}{3} h_x (G(x_0) + 4G(x_1) + G(x_2)) + \frac{1}{3} h_x (G(x_2) + 4G(x_3) + G(x_4)) + \\
 &\quad \dots + \frac{1}{3} h_x (G(x_{m_x-2}) + 4G(x_{m_x-1}) + G(x_{m_x})), \\
 I &= \frac{1}{3} h_x (G(x_0) + 4G(x_1) + 2G(x_2) + 4G(x_3) + 2G(x_4) + \dots \\
 &\quad + 2G(x_{m_x-2}) + 4G(x_{m_x-1}) + G(x_{m_x})) \leadsto \\
 I &= \frac{1}{3} h_x \sum_{i=0}^{m_x} c_{x_i} G(x_i), \tag{5.27}
 \end{aligned}$$

onde $c_{x_0} = c_{x_{m_x}} = 1$, $c_{x_i} = 4$ para todo i ímpar, $c_{x_i} = 2$ para todo i par e $h_x = (b - a)/m_x$. Para o cálculo de $G(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, m_x$ também pode ser utilizada qualquer uma das fórmulas de Newton-Cotes, como, por exemplo, a regra dos 3/8 de Simpson

$$G(x_i) = \int_c^d f(x_i, y) dy = \frac{3}{8} h_y (f(x_i, y_0) + 3f(x_i, y_1) + 3f(x_i, y_2) + f(x_i, y_3)). \tag{5.28}$$

Novamente, para uma melhor exatidão, também subdivide-se o intervalo $[c, d]$ em m_y subintervalos iguais, sendo m_y múltiplo do grau n_y do polinômio interpolador usado para construir a regra de integração em y no caso em questão múltiplo de 3 ($= n_y$). Aplicando-se (5.28) a cada 4 ($= n_y + 1$) pontos, tem-se

$$\begin{aligned}
 G(x_i) &= \int_c^d f(x_i, y) dy \\
 &= \frac{3}{8}h_y(f(x_i, y_0) + 3f(x_i, y_1) + 3f(x_i, y_2) + f(x_i, y_3)) \\
 &\quad + \frac{3}{8}h_y(f(x_i, y_3) + 3f(x_i, y_4) + 3f(x_i, y_5) + f(x_i, y_6)) + \dots \\
 &\quad + \frac{3}{8}h_y(f(x_i, y_{m_y-3}) + 3f(x_i, y_{m_y-2}) + 3f(x_i, y_{m_y-1}) + f(x_i, y_{m_y})), \\
 G(x_i) &= \frac{3}{8}h_y(f(x_i, y_0) + 3f(x_i, y_1) + 3f(x_i, y_2) + 2f(x_i, y_3) \\
 &\quad + 3f(x_i, y_4) + 3f(x_i, y_5) + 2f(x_i, y_6) + \dots \\
 &\quad + 2f(x_i, y_{m_y-3}) + 3f(x_i, y_{m_y-2}) + 3f(x_i, y_{m_y-1}) + f(x_i, y_{m_y})), \\
 G(x_i) &= \frac{3}{8}h_y \sum_{j=0}^{m_y} c_{y_j} f(x_i, y_j), \quad i = 0, 1, 2, \dots, m_x,
 \end{aligned}$$

onde $c_{y_0} = c_{y_{m_y}} = 1$, e para os j 's restantes, $c_{y_j} = 2$ se j for múltiplo de 3 e $c_{y_j} = 3$ se j não for múltiplo de 3 e $h_y = (d - c)/m_y$. Levando os valores de $G(x_i)$ em (5.27), obtém-se o valor da integral dupla

$$I = \frac{1}{3}h_x \sum_{i=0}^{m_x} c_{x_i} \left(\frac{3}{8}h_y \sum_{j=0}^{m_y} c_{y_j} f(x_i, y_j) \right) \rightsquigarrow I = \frac{1}{3}h_x \frac{3}{8}h_y \sum_{i=0}^{m_x} \sum_{j=0}^{m_y} c_{x_i} c_{y_j} f(x_i, y_j).$$

Esta fórmula pode ser generalizada para qualquer grau do polinômio interpolador utilizado

$$I = \frac{n_x}{d_{n_x}} h_x \frac{n_y}{d_{n_y}} h_y \sum_{i=0}^{m_x} \sum_{j=0}^{m_y} c_{x_i} c_{y_j} f(x_i, y_j), \quad (5.29)$$

sendo os parâmetros $h_x = (b - a)/m_x$ e $h_y = (d - c)/m_y$. Os valores de d_{n_x} , d_{n_y} , c_{x_i} e c_{y_j} , para $n = 1, 2, \dots, 8$, são dados na Tabela 5.1.

5.5.3 Algoritmo

O algoritmo da Figura 5.18 calcula uma integral dupla pelas fórmulas de Newton-Cotes. Os parâmetros de entrada são ax (limite inferior de integração no eixo x), bx (limite superior de

integração no eixo x), nx (grau do polinômio utilizado para integração em x), mx (número de subintervalos para integração em x), ay (limite inferior de integração no eixo y), by (limite superior de integração no eixo y), ny (grau do polinômio utilizado para integração em y) e my (número de subintervalos para integração em y). A função $f(x, y)$ deve ser especificada de acordo com a linguagem de programação adotada. Os parâmetros de saída são *Integral* (valor da integral) e *CondErro* (condição de erro), em que *CondErro* = 0 significa que não houve erro de consistência nos parâmetros de entrada. Se *CondErro* = 1, então o grau do polinômio $nx < 1$ ou $nx > 8$ ou $ny < 1$ ou $ny > 8$, e se *CondErro* = 2, mx não é múltiplo de nx ou que my não é múltiplo de ny . O parâmetro *CondErro* = 3 se ambas condições ocorrerem.

Exemplo 5.28 Calcular $\int_2^5 \int_0^1 \sin(x^2 + y^2) dy dx$, utilizando o algoritmo da Figura 5.18, com $n_x = 3$ (regra dos 3/8), $m_x = 3$ subintervalos em x , $n_y = 2$ (regra do 1/3) e $m_y = 4$ subintervalos em y .

% Os parametros de entrada

ax = 2

bx = 5

nx = 3

mx = 3

ay = 0

by = 1

ny = 2

my = 4

% fornecem os resultados

Integracao dupla por Newton-Cotes

i	x(i)	c(i)	j	y(j)	c(j)	f(x(i),y(j))
0	2.00000e+00	1	0	0.00000e+00	1	-7.56802e-01
			1	2.50000e-01	4	-7.96151e-01
			2	5.00000e-01	2	-8.94989e-01
			3	7.50000e-01	4	-9.88788e-01
			4	1.00000e+00	1	-9.58924e-01
1	3.00000e+00	3	0	0.00000e+00	1	4.12118e-01
			1	2.50000e-01	4	3.54405e-01
			2	5.00000e-01	2	1.73889e-01
			3	7.50000e-01	4	-1.37287e-01
			4	1.00000e+00	1	-5.44021e-01
2	4.00000e+00	3	0	0.00000e+00	1	-2.87903e-01
			1	2.50000e-01	4	-3.47156e-01
			2	5.00000e-01	2	-5.15882e-01
			3	7.50000e-01	4	-7.54267e-01
			4	1.00000e+00	1	-9.61397e-01
3	5.00000e+00	1	0	0.00000e+00	1	-1.32352e-01
			1	2.50000e-01	4	-7.01835e-02
			2	5.00000e-01	2	1.16990e-01
			3	7.50000e-01	4	4.16652e-01
			4	1.00000e+00	1	7.62558e-01

Integral = -0.78758

CondErro = 0

O resultado da integral é $I = -0,78758$ e o valor de *CondErro* indica que os parâmetros de entrada estão consistentes.

Algoritmo Newton-Cotes-Dupla

```

{ Objetivo: Cálculo de integral dupla pelas fórmulas de Newton-Cotes }
parâmetros de entrada  $ax, bx, nx, mx, ay, by, ny, my$ 
  { limite inferior em  $x$ , limite superior em  $x$ , }
  { grau do polinômio em  $x$ , número de subintervalos em  $x$ , }
  { limite inferior em  $y$ , limite superior em  $y$ , }
  { grau do polinômio em  $y$ , número de subintervalos em  $y$  }
parâmetros de saída  $Integral, CondErro$ 
  { valor da integral e condição de erro, sendo }
  {  $CondErro = 0$  se não houve erro de consistência dos parâmetros dados, }
  {  $CondErro = 1$  se  $(n < 1$  ou  $n > 8)$ , }
  {  $CondErro = 2$  se  $resto(m, n) \neq 0$  e }
  {  $CondErro = 3$  se ambas as condições ocorreram. }
 $d(1) \leftarrow 2; d(2) \leftarrow 6; d(3) \leftarrow 8; d(4) \leftarrow 90; d(5) \leftarrow 288; d(6) \leftarrow 840$ 
 $d(7) \leftarrow 17280; d(8) \leftarrow 28350$ 
 $c(1) \leftarrow 1; c(2) \leftarrow 1; c(3) \leftarrow 4; c(4) \leftarrow 1; c(5) \leftarrow 3; c(6) \leftarrow 7; c(7) \leftarrow 32$ 
 $c(8) \leftarrow 12; c(9) \leftarrow 19; c(10) \leftarrow 75; c(11) \leftarrow 50; c(12) \leftarrow 41; c(13) \leftarrow 216$ 
 $c(14) \leftarrow 27; c(15) \leftarrow 272; c(16) \leftarrow 751; c(17) \leftarrow 3577; c(18) \leftarrow 1323$ 
 $c(19) \leftarrow 2989; c(20) \leftarrow 989; c(21) \leftarrow 5888; c(22) \leftarrow -928; c(23) \leftarrow 10496$ 
 $c(24) \leftarrow -4540$ 
  { consistência dos parâmetros }
   $CondErro \leftarrow 0; Integral \leftarrow 0$ 
  se  $nx < 1$  ou  $nx > 8$  ou  $ny < 1$  ou  $ny > 8$  então  $CondErro \leftarrow CondErro + 1$ , fim se
  se  $resto(mx, nx) \neq 0$  ou  $resto(my, ny) \neq 0$  então  $CondErro \leftarrow CondErro + 2$ , fim se
  se  $CondErro \neq 0$  então abandone, fim se
  { cálculo da integral }
   $px \leftarrow \text{trunca}(0,25 * (nx * (nx + 2) + \text{resto}(nx, 2)))$ 
   $py \leftarrow \text{trunca}(0,25 * (ny * (ny + 2) + \text{resto}(ny, 2)))$ 
   $hx \leftarrow (bx - ax)/mx; hy \leftarrow (by - ay)/my$ 
  para  $i \leftarrow 0$  até  $mx$  faça
     $x \leftarrow ax + i * hx; jx \leftarrow px + \text{trunca}(0,5 * nx - \text{abs}(\text{resto}(i, nx) - 0,5 * nx))$ 
     $kx \leftarrow 1 + \text{trunca}((nx - \text{resto}(i, nx))/nx) - \text{trunca}((mx - \text{resto}(i, mx))/mx)$ 
    para  $j \leftarrow 0$  até  $my$  faça
       $y \leftarrow ay + j * hy; jy \leftarrow py + \text{trunca}(0,5 * ny - \text{abs}(\text{resto}(j, ny) - 0,5 * ny))$ 
       $ky \leftarrow 1 + \text{trunca}((ny - \text{resto}(j, ny))/ny) - \text{trunca}((my - \text{resto}(j, my))/my)$ 
       $fxj \leftarrow f(x, y)$  { avaliar a função integrando em  $(x, y)$  }
       $Integral \leftarrow Integral + fxj * c(jx) * kx * c(jy) * ky$ 
      se  $j = 0$  então escreva  $i, x, c(jx) * kx, j, y, c(jy) * ky, fxj$ 
      senão escreva  $j, y, c(jy) * ky, fxj$ 
    fim se
  fim para
fim para
 $Integral \leftarrow nx * ny * hx * hy / (d(nx) * d(ny)) * Integral$ 
fim algoritmo

```

Figura 5.18 Integração dupla pelas fórmulas de Newton-Cotes.(Ver significado das funções *abs*, *resto* e *trunca* na Tabela 1.1, na página 6.)

5.6 Integração dupla via fórmulas de Gauss-Legendre

De modo similar à integração simples, as fórmulas de Gauss-Legendre também podem ser utilizadas para o cálculo aproximado da integral dupla definida (5.22). Fazendo $G(x) = \int_c^d f(x, y) dy$, tem-se que $I = \int_a^b G(x) dx$. Será mostrado, a seguir, que o cálculo de uma integral dupla por Gauss-Legendre também consiste na determinação de duas integrais simples.

5.6.1 Fórmula para dois pontos

Fazendo uma mudança de variável de x para t , sendo $-1 \leq t \leq 1$, tem-se

$$x = x(t) = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2} \longrightarrow dx = \frac{b-a}{2}dt.$$

Assim, pode-se tomar

$$x_i = \frac{b-a}{2}t_i + \frac{a+b}{2}.$$

Definindo

$$H(t) = \frac{b-a}{2}G(x(t)),$$

tem-se que

$$I = \int_a^b G(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{2}{b-a} H(t) \frac{b-a}{2} dt = \int_{-1}^1 H(t) dt.$$

Resolvendo esta integral simples por Gauss-Legendre, com $n_x = 2$ pontos, obtém-se

$$I = \int_{-1}^1 H(t) dt = A_1 H(t_1) + A_2 H(t_2), \quad (5.30)$$

onde A_i , $i = 1, 2$ são os pesos e t_i são as abscissas ou os zeros do polinômio de Legendre de grau $n_x = 2$. Os valores de A_i e t_i podem ser obtidos na Tabela 5.3 ou gerados pelo algoritmo da Figura 5.12. Particularmente, para $n_x = 2$, tem-se que $A_1 = A_2 = 1$ e $t_1 = -1/\sqrt{3}$ e $t_2 = 1/\sqrt{3}$.

Para o cálculo de $G(x_i) = \int_c^d f(x_i, y) dy$ é feita uma mudança de variável de y para u tal que $-1 \leq u \leq 1$

$$y = y(u) = \frac{d-c}{2}u + \frac{c+d}{2} \longrightarrow dy = \frac{d-c}{2} du$$

e, então, pode-se tomar

$$y_j = \frac{d-c}{2}u_j + \frac{c+d}{2}.$$

Definindo

$$F_i(u) = \frac{d-c}{2} f(x_i, y(u)),$$

tem-se que

$$G(x_i) = \int_c^d f(x_i, y) dy = \int_{-1}^1 \frac{2}{d-c} F_i(u) \frac{d-c}{2} du = \int_{-1}^1 F_i(u) du.$$

Usando, novamente, a fórmula para $n_y = 2$ pontos, obtém-se

$$G(x_i) = \int_{-1}^1 F_i(u) du = B_1 F_i(u_1) + B_2 F_i(u_2), \quad i = 1, 2,$$

onde B_j , $j = 1, 2$, são os pesos e $F_i(u_j) = \frac{d-c}{2} f(x_i, y_j)$, para $j = 1, 2$. Logo,

$$H(t_i) = \frac{b-a}{2} G(x_i) = \frac{b-a}{2} (B_1 F_i(u_1) + B_2 F_i(u_2)), \quad i = 1, 2.$$

Levando-se esses valores de $H(t_i)$ em (5.30), obtém-se

$$I = A_1 \left(\frac{b-a}{2} (B_1 F_1(u_1) + B_2 F_1(u_2)) \right) + A_2 \left(\frac{b-a}{2} (B_1 F_2(u_1) + B_2 F_2(u_2)) \right).$$

Substituindo $F_i(u_j)$, $j = 1, 2$, tem-se

$$\begin{aligned} I = & A_1 \left(\frac{b-a}{2} \left(B_1 \frac{d-c}{2} f(x_1, y_1) + B_2 \frac{d-c}{2} f(x_1, y_2) \right) \right) \\ & + A_2 \left(\frac{b-a}{2} \left(B_1 \frac{d-c}{2} f(x_2, y_1) + B_2 \frac{d-c}{2} f(x_2, y_2) \right) \right). \end{aligned}$$

Rearranjando,

$$\begin{aligned} I = & \frac{(b-a)(d-c)}{2} (A_1 B_1 f(x_1, y_1) + A_1 B_2 f(x_1, y_2) + A_2 B_1 f(x_2, y_1) \\ & + A_2 B_2 f(x_2, y_2)), \end{aligned}$$

$$I = \frac{1}{4} (b-a)(d-c) \sum_{i=1}^2 A_i \sum_{j=1}^2 B_j f(x_i, y_j). \quad (5.31)$$

Dispositivo prático

A Tabela 5.7 mostra um dispositivo prático para sistematizar os dados necessários para calcular uma integral dupla pela fórmula de Gauss-Legendre com $n_x = 2$ pontos em x e $n_y = 2$ pontos em y . O valor da integral é

$$I = \frac{1}{4} (b-a)(d-c) S, \text{ sendo } S = \sum_{i=1}^2 A_i \sum_{j=1}^2 B_j f(x_i, y_j).$$

Tabela 5.7 Dispositivo prático para integração dupla por Gauss-Legendre.

			j	1	2
			u_j	$-1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$
			y_j	y_1	y_2
i	t_i	x_i	$A_i \setminus B_j$	1	1
1	$-1/\sqrt{3}$	x_1	1	$f(x_1, y_1)$	$f(x_1, y_2)$
2	$1/\sqrt{3}$	x_2	1	$f(x_2, y_1)$	$f(x_2, y_2)$

Exemplo 5.29 Calcular $\int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/4} \sin(x+y) dy dx$ usando a fórmula de Gauss-Legendre para $n_x = n_y = 2$ pontos.

$$x_i = \frac{b-a}{2}t_i + \frac{a+b}{2} = \frac{\pi/2-0}{2}t_i + \frac{0+\pi/2}{2} \rightarrow x_i = \frac{\pi}{4}(t_i + 1) \text{ e}$$

$$y_j = \frac{d-c}{2}u_j + \frac{c+d}{2} = \frac{\pi/4-0}{2}u_j + \frac{0+\pi/4}{2} \rightarrow y_j = \frac{\pi}{8}(u_j + 1).$$

			j	1	2
			u_j	$-1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$
			y_j	0,1660	0,6194
i	t_i	x_i	$A_i \setminus B_j$	1	1
1	$-1/\sqrt{3}$	0,3319	1	0,4776	0,8142
2	$1/\sqrt{3}$	1,2388	1	0,9863	0,9590

A integral é

$$I = \frac{1}{4}(b-a)(d-c)S = \frac{1}{4}(\pi/2-0)(\pi/4-0) \times 3,2371 \leadsto I = 0,9984.$$

5.6.2 Fórmula geral

A Fórmula (5.31) para $n_x = n_y = 2$ pontos pode ser modificada para um número qualquer de pontos em x e em y , resultando na fórmula geral para integração dupla por Gauss-Legendre

$$I = \int_a^b \int_c^d f(x, y) dy dx = \frac{1}{4}(b-a)(d-c) \sum_{i=1}^{n_x} A_i \sum_{j=1}^{n_y} B_j f(x_i, y_j), \quad (5.32)$$

onde $x_i = \frac{b-a}{2}t_i + \frac{a+b}{2}$ e $y_j = \frac{d-c}{2}u_j + \frac{c+d}{2}$ e os pesos A_i , $i = 1, 2, \dots, n_x$ e B_j , $j = 1, 2, \dots, n_y$ e as abscissas t_i e u_j podem ser obtidos na Tabela 5.3 ou gerados pelo algoritmo mostrado na Figura 5.12.

Dispositivo prático

Um dispositivo prático para calcular uma integral dupla pela fórmula de Gauss-Legendre com n_x pontos em x e n_y em y é mostrado na Tabela 5.8. O valor da integral é, por (5.32),

$$I = \frac{1}{4}(b-a)(d-c)S, \text{ sendo } S = \sum_{i=1}^{n_x} A_i \sum_{j=1}^{n_y} B_j f(x_i, y_j).$$

Tabela 5.8 Dispositivo prático para integração dupla por Gauss-Legendre.

			j	1	2	...	n_y
			u_j	u_1	u_2	...	u_{n_y}
			y_j	y_1	y_2	...	y_{n_y}
i	t_i	x_i	$A_i \setminus B_j$	B_1	B_2	...	B_{n_y}
1	t_1	x_1	A_1	$f(x_1, y_1)$	$f(x_1, y_2)$...	$f(x_1, y_{n_y})$
2	t_2	x_2	A_2	$f(x_2, y_1)$	$f(x_2, y_2)$...	$f(x_2, y_{n_y})$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots
n_x	t_{n_x}	x_{n_x}	A_{n_x}	$f(x_{n_x}, y_1)$	$f(x_{n_x}, y_2)$...	$f(x_{n_x}, y_{n_y})$

Exemplo 5.30 Calcular $\int_1^4 \int_0^2 (y^2 \log_{10}(3x)) dy dx$ usando Gauss-Legendre com $n_x = 3$ e $n_y = 4$.

$$x_i = \frac{b-a}{2}t_i + \frac{a+b}{2} = \frac{4-1}{2}t_i + \frac{1+4}{2} \leadsto x_i = 1,5t_i + 2,5 \text{ e}$$

$$y_j = \frac{d-c}{2}u_j + \frac{c+d}{2} = \frac{2-0}{2}u_j + \frac{0+2}{2} \leadsto y_j = u_j + 1.$$

			j	1	2	3	4
			u_j	-0,8611	-0,3400	0,3400	0,8611
			y_j	0,1389	0,6600	1,3400	1,8611
i	t_i	x_i	$A_i \setminus B_j$	0,3479	0,6521	0,6521	0,3479
1	-0,7746	1,3381	0,5556	0,0116	0,2629	1,0838	2,0907
2	0,0000	2,5000	0,8889	0,0169	0,3812	1,5713	3,0309
3	0,7746	3,6619	0,5556	0,0201	0,4534	1,8689	3,6051

O valor da integral é

$$I = \frac{1}{4}(b-a)(d-c)S = \frac{1}{4}(4-1)(2-0) \times 4,5107 \leadsto I = 6,7660.$$

5.6.3 Algoritmo

O algoritmo apresentado na Figura 5.19 calcula uma integral dupla pelas fórmulas de Gauss-Legendre. Os parâmetros de entrada são *ax* (limite inferior de integração no eixo *x*), *bx* (limite superior de integração no eixo *x*), *nx* (número de pontos usados na integração em *x*), *ay* (limite inferior de integração no eixo *y*), *by* (limite superior de integração no eixo *y*) e *ny* (número de pontos usados na integração em *y*). A função $f(x, y)$ deve ser especificada de acordo com a linguagem de programação adotada. Os parâmetros de saída são *Integral* (valor da integral) e *CondErro* (condição de erro), em que *CondErro* = 0 significa que não houve erro de consistência no número de pontos, ou seja, $nx \geq 1$ e $ny \geq 1$. Por outro lado, *CondErro* = 1 indica que $nx < 1$ ou $ny < 1$. O algoritmo **PesAbsGL** da Figura 5.12 é chamado para calcular os pesos e as abscissas. Obviamente, o algoritmo da Figura 5.19 pode ser adaptado de modo a utilizar valores fixos dos pesos e das abscissas para evitar o uso do algoritmo **PesAbsGL**.

Exemplo 5.31 Calcular $\int_2^6 \int_1^3 \sqrt{x^2 + y} \cos(xy) dy dx$ utilizando o algoritmo da Figura 5.19, com $n_x = 5$ e $n_y = 4$.

```
% Os parametros de entrada
ax = 2
bx = 6
nx = 5
ay = 1
by = 3
ny = 4
% fornecem os resultados
```

Integracao dupla por Gauss-Legendre							
i	t(i)	x(i)	A(i)	j	u(j)	y(j)	B(j) f(x(i),y(j))
1	-0.9062	2.188e+00	0.2369	1	-0.8611	1.139e+00	0.3479 -1.93747e+00
				2	-0.3400	1.660e+00	0.6521 -2.24020e+00
				3	0.3400	2.340e+00	0.6521 1.05584e+00
				4	0.8611	2.861e+00	0.3479 2.76450e+00
2	-0.5385	2.923e+00	0.4786	1	-0.8611	1.139e+00	0.3479 -3.05731e+00
				2	-0.3400	1.660e+00	0.6521 4.45596e-01
				3	0.3400	2.340e+00	0.6521 2.80093e+00
				4	0.8611	2.861e+00	0.3479 -1.64659e+00
3	0.0000	4.000e+00	0.5689	1	-0.8611	1.139e+00	0.3479 -6.47030e-01
				2	-0.3400	1.660e+00	0.6521 3.93758e+00
				3	0.3400	2.340e+00	0.6521 -4.27352e+00
				4	0.8611	2.861e+00	0.3479 1.88500e+00
4	0.5385	5.077e+00	0.4786	1	-0.8611	1.139e+00	0.3479 4.54970e+00
				2	-0.3400	1.660e+00	0.6521 -2.84341e+00
				3	0.3400	2.340e+00	0.6521 4.10146e+00
				4	0.8611	2.861e+00	0.3479 -2.02780e+00
5	0.9062	5.812e+00	0.2369	1	-0.8611	1.139e+00	0.3479 5.57848e+00
				2	-0.3400	1.660e+00	0.6521 -5.80491e+00
				3	0.3400	2.340e+00	0.6521 3.07129e+00
				4	0.8611	2.861e+00	0.3479 -3.65773e+00

```
Integral = 1.5683954289
CondErro = 0
```

Algoritmo Gauss-Legendre-Dupla

```

{ Objetivo: Integração dupla de função pelas fórmulas de Gauss-Legendre }
parâmetros de entrada ax, bx, nx, ay, by, ny
    { limite inferior em x, limite superior em x, número de pontos em x, }
    { limite inferior em y, limite superior em y, número de pontos em y }
parâmetros de saída Integral, CondErro
    { valor da integral e condição de erro, sendo }
    { CondErro = 0 se não houve erro ( $nx \geq 1$  e  $ny \geq 1$ ) e }
    { CondErro = 1 se  $nx < 1$  ou  $ny < 1$  }
    { cálculo dos pesos e abscissas }
    [Avet, Tvet, CondErro]  $\leftarrow$  PesAbsGL(nx) (ver Figura 5.12)
    Integral  $\leftarrow$  0; se CondErro  $\neq$  0, abandone, fimse
    se ny = nx então
        para j  $\leftarrow$  1 até trunca(0,5 * (nx + 1)) faça
            Bvet(j)  $\leftarrow$  Avet(j); Uvet(j)  $\leftarrow$  Tvet(j)
        fimpara
    senão
        [Bvet, Uvet, CondErro]  $\leftarrow$  PesAbsGL(ny)
        se CondErro  $\neq$  0, abandone, fimse
    fimse
    { cálculo da integral dupla }
    ex1  $\leftarrow$  (bx - ax)/2; ex2  $\leftarrow$  (ax + bx)/2; ey1  $\leftarrow$  (by - ay)/2; ey2  $\leftarrow$  (ay + by)/2
    se resto(nx, 2) = 0 então cx1  $\leftarrow$  1; cx2  $\leftarrow$  0,5, senão cx1  $\leftarrow$  0; cx2  $\leftarrow$  1, fimse
    se resto(ny, 2) = 0 então cy1  $\leftarrow$  1; cy2  $\leftarrow$  0,5, senão cy1  $\leftarrow$  0; cy2  $\leftarrow$  1, fimse
    para i  $\leftarrow$  1 até nx faça
        kx  $\leftarrow$  trunca(i - 0,5 * (nx + 1) + sinal(i - 0,5 * (nx + cx1)) * cx2)
        tx  $\leftarrow$  sinal(kx) * Tvet(abs(kx)); Axx  $\leftarrow$  Avet(abs(kx))
        x  $\leftarrow$  ex1 * tx + ex2; Soma  $\leftarrow$  0
        para j  $\leftarrow$  1 até ny faça
            ky  $\leftarrow$  trunca(j - 0,5 * (ny + 1) + sinal(j - 0,5 * (ny + cy1)) * cy2)
            ty  $\leftarrow$  sinal(ky) * Uvet(abs(ky)); Ayy  $\leftarrow$  Bvet(abs(ky))
            y  $\leftarrow$  ey1 * ty + ey2
            fx  $\leftarrow$  f(x, y) { avaliar a função integrando em (x, y) }
            Soma  $\leftarrow$  Soma + Ayy * fx
            se j = 1 então escreva i, tx, x, Axx, j, ty, y, Ayy, fx
            senão escreva j, ty, y, Ayy, fx, fimse
        fimpara
        Integral  $\leftarrow$  Integral + Axx * Soma
    fimpara
    Integral  $\leftarrow$  ex1 * ey1 * Integral
finalgoritmo

```

Figura 5.19 Integração dupla pelas fórmulas de Gauss-Legendre.

(Ver significado das funções **abs**, **resto**, **sinal** e **trunca** na Tabela 1.1, na página 6.)

5.7 Comparação dos métodos para integração dupla

Serão utilizadas duas integrais para uma análise comparativa do desempenho das fórmulas de Newton-Cotes e Gauss-Legendre. O primeiro teste consiste em

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} 2xy \operatorname{sen}(xy^2) dy dx,$$

cujas solução analítica é $I = (4 \operatorname{sen}(\pi^3/8) - \operatorname{sen}(\pi^3/2))/\pi^2 \approx -0,2921$.

A Tabela 5.9 mostra a diferença entre os resultados obtidos por diversos métodos de integração e o valor exato. As fórmulas de Newton-Cotes não foram compostas, isto é, o número de subintervalos $m_x (= m_y)$ é igual ao grau do polinômio $n_x (= n_y)$ utilizado para construir o método. Além do mais, para ter um mesmo número de avaliações da função integrando, o número de pontos usados em Gauss-Legendre é igual a $m_x + 1$.

Tabela 5.9 Integração dupla por Newton-Cotes e Gauss-Legendre.

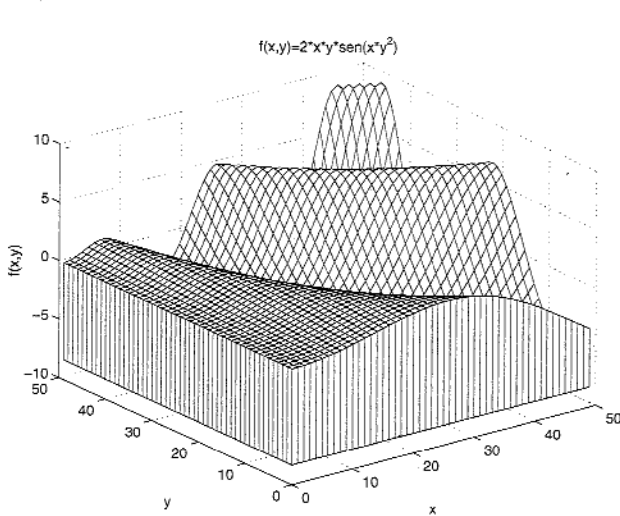
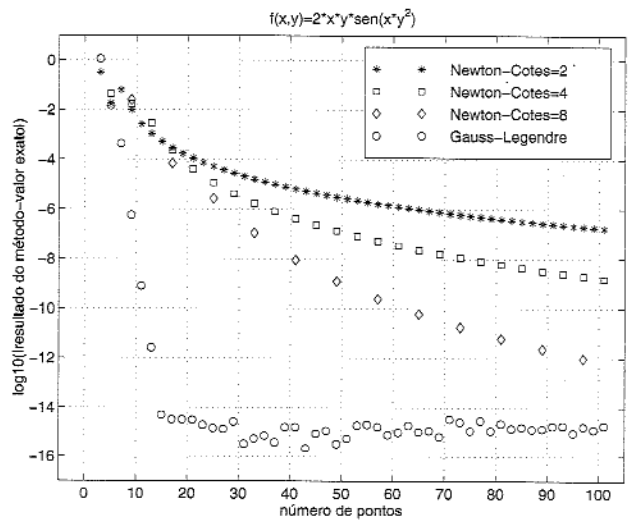
Grau do polinômio	Número de subintervalos	Newton-Cotes	Número de pontos	Gauss-Legendre
1	1	$5,090 \times 10^{-1}$	2	$2,733 \times 10^0$
2	2	$3,154 \times 10^{-1}$	3	$1,123 \times 10^0$
3	3	$6,787 \times 10^{-1}$	4	$7,703 \times 10^{-2}$
4	4	$4,335 \times 10^{-2}$	5	$1,448 \times 10^{-2}$
5	5	$1,644 \times 10^{-1}$	6	$4,001 \times 10^{-3}$
6	6	$1,480 \times 10^{-2}$	7	$4,331 \times 10^{-4}$
7	7	$2,935 \times 10^{-2}$	8	$2,440 \times 10^{-5}$
8	8	$2,500 \times 10^{-2}$	9	$5,705 \times 10^{-7}$

A Figura 5.20(a) mostra um gráfico da função $f(x, y) = 2xy \operatorname{sen}(xy^2)$. Por sua vez, a Figura 5.20(b) exibe o desempenho de quatro métodos: Newton-Cotes com grau do polinômio $n_x (= n_y) = 2, 4$ e 8 com o número de subintervalos $m_x (= m_y)$ múltiplo do grau n_x e Gauss-Legendre com número de pontos $m_x + 1 = 3, 5, 7, \dots, 101$. A abscissa contém o número de pontos avaliados, e a ordenada, o logaritmo decimal da diferença entre o valor obtido pelo método e o valor exato. Com número de pontos ≥ 15 , o método de Gauss-Legendre produz resultados que se estabilizam em torno da precisão do computador, enquanto as fórmulas de Newton-Cotes só geram resultados satisfatórios para valores elevados de número de pontos.

O segundo teste é a integral

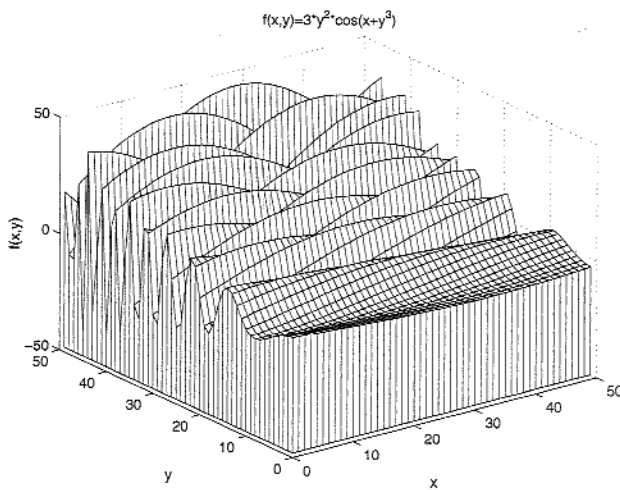
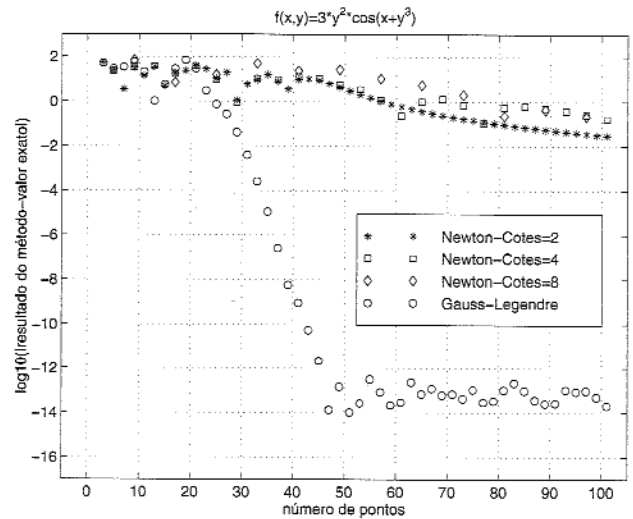
$$\int_0^{\pi} \int_1^4 3y^2 \cos(x + y^3) dy dx,$$

com o valor exato $I = \cos(64) + \cos(\pi + 1) - \cos(1) - \cos(\pi + 64) \approx -0,2969$. A Figura 5.21(a) exibe um gráfico da função, a qual não é nada simples. A Figura 5.21(b) mostra que somente o método de Gauss-Legendre obteve valores mais exatos no cálculo dessa integral.

(a) Gráfico da função $f(x, y)$.

(b) Desempenho dos métodos.

Figura 5.20 $\int_0^{\pi} \int_{\pi/2}^{\pi} 2xy \sin(xy^2) dy dx.$

(a) Gráfico da função $f(x, y)$.

(b) Desempenho dos métodos.

Figura 5.21 $\int_0^{\pi} \int_1^4 3y^2 \cos(x + y^3) dy dx.$

5.8 Exemplos de aplicação

Será mostrado, a seguir, como utilizar a integração numérica para calcular a densidade de uma distribuição de probabilidade. Além disso, será visto como calcular uma integral imprópria.

5.8.1 Distribuição de probabilidade

Definição do problema

Gerar uma tabela com os valores da distribuição de probabilidade normal padrão no intervalo $[0,6; 0,7]$, com incremento 0,005 e exibindo 5 decimais.

Modelagem matemática

A distribuição de probabilidade normal com média μ e variância σ é calculada pela função integral

$$\phi(z) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^z e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx = 0,5 + \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_0^z e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx.$$

A distribuição normal padrão possui média zero ($\mu = 0$) e variância unitária ($\sigma = 1$), resultando em

$$\phi(z) = 0,5 + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^z e^{-\frac{x^2}{2}} dx.$$

A Figura 5.22 apresenta o gráfico da função $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$. A área sob a curva de $f(x)$, de $-\infty$ até x , fornece o valor procurado.

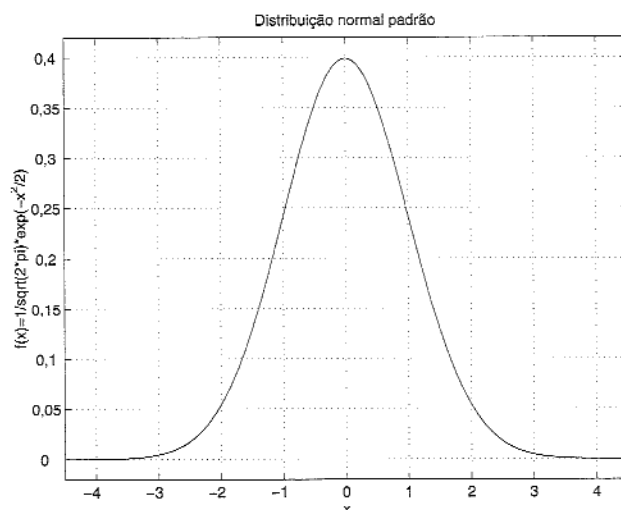


Figura 5.22 Distribuição de probabilidade normal padrão.

Solução numérica

A integral $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^z e^{-\frac{x^2}{2}} dx$ pode ser avaliada usando o algoritmo de quadratura de Gauss-Legendre mostrado na Figura 5.13. Considerando que os gráficos das Figuras 5.14(a) e 5.22 apresentam uma certa similaridade e os resultados da Tabela 5.5, então será utilizado $n = 5$.

Por exemplo, para $z = 0,6$

```
% Os parametros de entrada
a = 0
b = 0.6000
n = 5
% fornecem os resultados
Integracao numerica pelo metodo de Gauss-Legendre
i      t(i)      x(i)      f(x(i))      A(i)
1      -0.90618    0.02815    0.39878    0.23693
2      -0.53847    0.13846    0.39514    0.47863
3       0.00000    0.30000    0.38139    0.56889
4       0.53847    0.46154    0.35864    0.47863
5       0.90618    0.57185    0.33877    0.23693
```

```
Integral = 0.2257468823
```

```
CondErro = 0
```

Portanto, $\phi(0,6) = 0,5 + 0,22575 = 0,72575$. Os valores calculados de $\phi(z)$, $0,6 \leq z \leq 0,7$ estão compilados na Tabela 5.10.

Tabela 5.10 Distribuição de probabilidade normal padrão.

z	$\phi(z)$	z	$\phi(z)$	z	$\phi(z)$
0,600	0,72575	0,635	0,73729	0,670	0,74857
0,605	0,72741	0,640	0,73891	0,675	0,75016
0,610	0,72907	0,645	0,74054	0,680	0,75175
0,615	0,73072	0,650	0,74215	0,685	0,75333
0,620	0,73237	0,655	0,74377	0,690	0,75490
0,625	0,73401	0,660	0,74537	0,695	0,75647
0,630	0,73565	0,665	0,74697	0,700	0,75804

Análise dos resultados

Os resultados apresentados na Tabela 5.10 estão de acordo com os valores publicados na literatura [1]. Portanto, a quadratura de Gauss-Legendre é um processo válido para gerar valores da distribuição de probabilidade normal padrão. Cumpre salientar, no entanto, que existem outros métodos para gerar estes valores [28].

5.8.2 Integral imprópria

Definição do problema

Calcular a integral imprópria $\int_1^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx$, com 7 decimais exatas.

Modelagem matemática

Tanto as fórmulas de Newton-Cotes quanto a quadratura de Gauss-Legendre só devem ser aplicadas quando a função integrando $f(x)$ puder ser aproximada por um polinômio e for contínua no intervalo de integração.

No caso de integrais impróprias, uma maneira de resolver o problema é por meio de uma transformação de variável que conduza a um intervalo finito. Uma bela explanação sobre esta técnica é proposta por Acton [2].

Uma maneira alternativa de calcular uma integral imprópria $\int_a^\infty f(x) dx$ consiste em determinar intervalos $[a, b_1]$, $[b_1, b_2]$, $[b_2, b_3]$, ..., nos quais $f(x)$ apresenta um comportamento como um polinômio. Então, avalia-se a integral de $f(x)$ sobre esses intervalos, em sequência,

$$\int_a^{b_1} f(x) dx + \int_{b_1}^{b_2} f(x) dx + \int_{b_2}^{b_3} f(x) dx + \dots + \int_{b_{n-1}}^{b_n} f(x) dx,$$

interrompendo quando o valor da última integral aproximar-se de zero.

Solução numérica

Um esboço da função $f(x) = x^2 e^{-x^2}$ é mostrado na Figura 5.23, onde se pode observar o comportamento assintótico de $f(x)$.

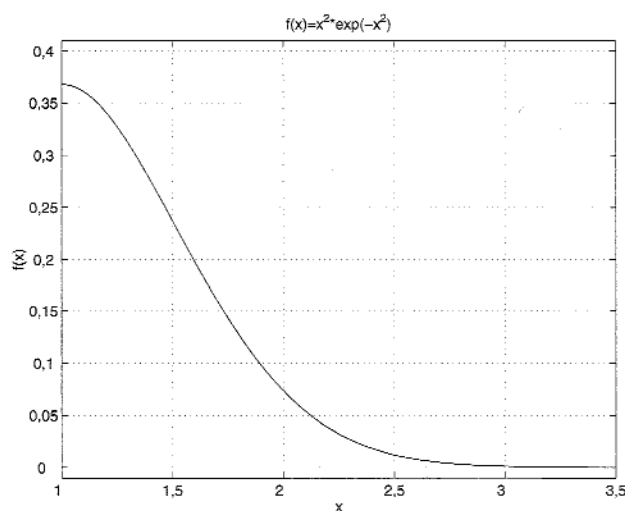


Figura 5.23 Integral imprópria.

A Tabela 5.11 apresenta os resultados da integração de $f(x) = x^2 e^{-x^2}$ sobre vários subintervalos, utilizando a quadratura de Gauss-Legendre com $n = 6$ (algoritmo da Figura 5.13).

Para o primeiro subintervalo $[1, 2]$


```
% Os parametros de entrada
a = 1
b = 2
n = 6
% fornecem os resultados
Integracao numerica pelo metodo de Gauss-Legendre
i      t(i)      x(i)      f(x(i))      A(i)
1      -0.93247    1.03377    0.36705    0.17132
2      -0.66121    1.16940    0.34836    0.36076
3      -0.23862    1.38069    0.28333    0.46791
4       0.23862    1.61931    0.19049    0.46791
5       0.66121    1.83060    0.11744    0.36076
6       0.93247    1.96623    0.08096    0.17132

Integral = 0.2332527106
CondErro = 0
```

As integrais nos demais subintervalos são obtidas de modo similar, sendo os resultados mostrados na Tabela 5.11.

Tabela 5.11 Cálculo de uma integral imprópria.

intervalo	integral	acumulado
[1, 2]	$2,332527 \times 10^{-1}$	$2,332527 \times 10^{-1}$
[2, 3]	$2,019350 \times 10^{-2}$	$2,534462 \times 10^{-1}$
[3, 5]	$1,949060 \times 10^{-4}$	$2,536411 \times 10^{-1}$
[5, 10]	$2,859342 \times 10^{-11}$	$2,536411 \times 10^{-1}$
[10, 20]	$3,546989 \times 10^{-45}$	$2,536411 \times 10^{-1}$

Análise dos resultados

Pelos resultados da Tabela 5.11, nota-se que a partir da abscissa $x = 5$ o valor da integral é menor que 10^{-10} e, portanto, menor que a precisão de sete casas decimais. Assim,

$$\int_1^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx \approx 0,2536411.$$

5.9 Exercícios

Seção 5.1

5.1. Calcular $\int_2^5 \frac{1}{x \log_e(x)} dx$ com $m = 6$ pelas regras abaixo.

- Trapézio.
- 1/3 de Simpson.
- 3/8 de Simpson.
- Comparar esses três resultados com o valor exato $\log_e(\log_e(5)) - \log_e(\log_e(2)) \approx 0,84240$.

5.2. Seja a função $f(x) = 10^x$.

- Achar o polinômio de Newton de grau 2 que passa pelos pontos de abscissas $-1, 0$ e 1 .
- Integrar, analiticamente, o polinômio obtido no item (a) no intervalo $[-1, 1]$.
- Calcular $\int_{-1}^1 10^x dx$ utilizando a regra do 1/3 de Simpson com $m = 2$ subintervalos.
- Justificar por que os resultados dos itens (b) e (c) são iguais.

5.3. Calcular $\int_0^2 e^x dx$ com $E < 2 \times 10^{-3}$ usando uma das fórmulas de Newton-Cotes com o menor número de subintervalos.

5.4. Implementar o algoritmo apresentado na Figura 5.7 em qualquer linguagem de programação.

5.5. Avaliar $\int_0^3 (e^x + 2x) dx$ pela regra do 1/3 Simpson e com número de subintervalos $m = 2, 4, 6, 8$ usando o programa acima.

Seção 5.2

5.6. Calcular $\int_0^3 (e^x + 2x) dx$ utilizando quadratura de Gauss-Legendre com $n = 4$.

5.7. Calcular $\int_0^\pi (0,2x^4 + \sin(x) + 2) dx$ pela quadratura de Gauss-Legendre com $n = 5$.

5.8. Calcular $\int_0^\pi \sqrt{1 + \cos(x)} dx$ usando quadra-

tura de Gauss-Legendre com $n = 7$.

5.9. Implementar, em qualquer linguagem de programação, o algoritmo da Figura 5.12 e o da Figura 5.13.

5.10. Resolver os Exercícios 5.6–5.8 usando os programas do Exercício 5.9.

Seção 5.3

Calcular as integrais dadas abaixo usando os métodos indicados e comparar o resultado com o valor analítico

5.11. $\int_0^1 e^x dx$ usando a regra do trapézio com $m = 1$ e Gauss-Legendre com $n = 2$.

5.12. $\int_0^3 (e^x + 2x) dx$ utilizando a regra do 1/3 de Simpson com $m = 4$ e Gauss-Legendre com $n = 5$.

5.13. $\int_0^\pi (0,2x^4 + \sin(x) + 2) dx$ pela regra dos 3/8 de Simpson com $m = 6$ e Gauss-Legendre com $n = 7$.

5.14. $\int_0^\pi \sqrt{1 + \cos(x)} dx$ por Newton-Cotes que utiliza um polinômio de grau 4 com $m = 8$ e Gauss-Legendre com $n = 9$.

5.15. $\int_0^3 xe^x dx$ pelo método de Newton-Cotes que utiliza um polinômio de grau 5 com $m = 10$ e Gauss-Legendre com $n = 11$.

Seção 5.4

5.16. Implementar o algoritmo da Figura 5.17 em qualquer linguagem de programação.

Calcular as integrais a seguir usando o programa do exercício anterior, com $Toler = 10^{-10}$ e $IterMax = 10$.

$$5.17. \int_0^{\pi} \sqrt{1+\cos(x)} dx.$$

$$5.18. \int_2^5 \frac{1}{x \log_e(x)} dx.$$

$$5.19. \int_0^{\pi} e^{1-x^2} \sin(10x) dx.$$

$$5.20. \int_{-\pi}^{\pi} \cos(2 + \cos^2(x)) dx.$$

Seção 5.5

5.21. Calcular $\int_0^{\pi} \int_{-1}^1 \sin(x)y^2 dy dx$ usando a fórmula de Newton-Cotes com $n_x = n_y = 2$ e $m_x = m_y = 4$.

5.22. Avaliar $\int_0^3 \int_1^4 \sqrt{x+y} - e^{x-y} dy dx$ pelas fórmulas de Newton-Cotes com $n_x = 2$, $n_y = 3$ e $m_x = m_y = 6$.

5.23. Determinar

$$\int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \cos(x^2 + 1) \sin(xy) + x dy dx$$

pelas fórmulas de Newton-Cotes com $n_x = 5$, $m_x = 5$, $n_y = 2$ e $m_y = 4$.

5.24. Implementar, em qualquer linguagem de programação, o algoritmo apresentado na Figura 5.18.

5.25. Calcular as integrais dos Exercícios 5.21 a 5.23 utilizando o programa implementado no Exercício 5.24.

Seção 5.6

5.26. Avaliar $\int_0^2 \int_1^3 \frac{\sqrt{xy}}{x+y} dy dx$ pela quadratura de Gauss-Legendre com $n_x = n_y = 2$.

5.27. Calcular $\int_0^1 \int_0^2 e^{x^2-y^2} \sin(x+y) dy dx$ via quadratura de Gauss-Legendre com $n_x = 3$ e $n_y = 4$.

5.28. Determinar

$$\int_1^2 \int_0^2 (x^3 y^2 + x^2 y) \log_e(xy) dy dx$$

pela quadratura de Gauss-Legendre com $n_x = n_y = 4$.

5.29. Utilizando qualquer linguagem de programação, implementar o algoritmo da Figura 5.19.

5.30. Calcular as integrais dadas nos Exercícios 5.26 a 5.28 usando o programa elaborado no Exercício 5.29.

Seção 5.7

Utilizando os programas implementados a partir dos algoritmos das Figuras 5.18 e 5.19, comparar os resultados das integrais abaixo com o valor exato fornecido.

5.31. $\int_0^1 \int_0^1 (x^3 y + xy^3) dy dx$ usando Newton-Cotes com $n_x = n_y = m_x = m_y = 1$ e Gauss-Legendre com $n_x = n_y = 2$. Exato = $1/4$.

5.32. $\int_{-1}^1 \int_0^1 (3x^5 y^5 + x^4 y + xy) dy dx$ usando Newton-Cotes com $n_x = n_y = m_x = m_y = 2$ e Gauss-Legendre com $n_x = n_y = 3$. Exato = $1/5$.

5.33. $\int_0^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin(x-y) dy dx$ usando Newton-Cotes com $n_x = n_y = m_x = m_y = 3$ e Gauss-Legendre com $n_x = n_y = 4$. Exato = 0.

5.34. $\int_1^2 \int_0^1 \frac{x}{2+y} dy dx$ usando Newton-Cotes com $n_x = n_y = m_x = m_y = 1$ e Gauss-Legendre com $n_x = n_y = 2$. Exato = $3 \log_e(3/2)/2 \approx 0,60820$.

5.35. $\int_0^1 \int_{-1}^1 x \sqrt{1+xy} dy dx$ usando Newton-Cotes com $n_x = n_y = m_x = m_y = 4$ e Gauss-Legendre com $n_x = n_y = 5$. Exato = $8(2\sqrt{2} - 1)/15 \approx 0,97516$.

Gerais

5.36. Seja a função $f(x) = \sqrt{x} + 1$.

a) Achar o polinômio de Lagrange de grau 1 que passa pelos pontos de abscissas 0 e 1.

b) Integrar, analiticamente, o polinômio obtido no item (a) no intervalo $[0, 1]$.

c) Calcular $\int_0^1 \sqrt{x} + 1 \, dx$ utilizando a regra do trapézio.

d) Justificar por que os resultados dos itens (b) e (c) são iguais.

5.37. Deduzir a fórmula de integração numérica que utiliza um polinômio interpolador de grau 4 e comparar seus coeficientes com aqueles compilados na Tabela 5.1.

5.38. Propor a fórmula composta de Newton-Cotes para a regra de integração baseada em um polinômio interpolador de grau 4.

5.39. Seja a integral $\int_0^2 (4x^3 + 2x + 1) \, dx$.

a) Avaliar pela regra do 1/3 de Simpson com $m = 2$.

b) O resultado é exato? Por quê?

5.40. Considere a integral $\int_0^\pi (x^2 + \sin(x)) \, dx$.

a) Determinar o número de subintervalos para que a regra dos 3/8 de Simpson calcule a integral com $E < 10^{-3}$.

b) Calcular utilizando o programa implementado no Exercício 5.16.

c) Comparar os resultados acima com o valor exato.

5.41. Deduzir a fórmula do erro de integração para a regra do 1/3 de Simpson composta.

5.42. Deduzir a fórmula do erro de integração para a regra dos 3/8 de Simpson composta.

5.43. Considere a integral

$$\int_1^3 \int_{-1}^1 (4x^3y^3 + 2x^2y^2 + 1) \, dy \, dx.$$

a) Calcular pela fórmula de Newton-Cotes com $n_x = n_y = m_x = m_y = 1$.

b) Calcular por Gauss-Legendre com $n_x = n_y = 2$.

c) Verificar a exatidão dos dois resultados acima.

d) Por que um dos resultados é exato e o outro não?

5.44. Gerar uma tabela com os valores da distribuição de probabilidade normal padrão no intervalo $[0,5; 0,6]$, com incremento 0,005 e exibindo 5 decimais.

5.45. Calcular a integral $\int_0^\infty \sqrt{x} e^{-x} \, dx$.

Capítulo 6

Raízes de equações

A necessidade de encontrar valores de $x = \xi$ que satisfaçam à equação $f(x) = 0$ aparece freqüentemente em uma ampla variedade de problemas provenientes das Ciências e das Engenharias. Esses valores especiais são chamados de raízes da equação $f(x) = 0$ ou zeros da função $f(x)$, os quais podem ser vistos na Figura 6.1. Para equações algébricas de grau até quatro, suas

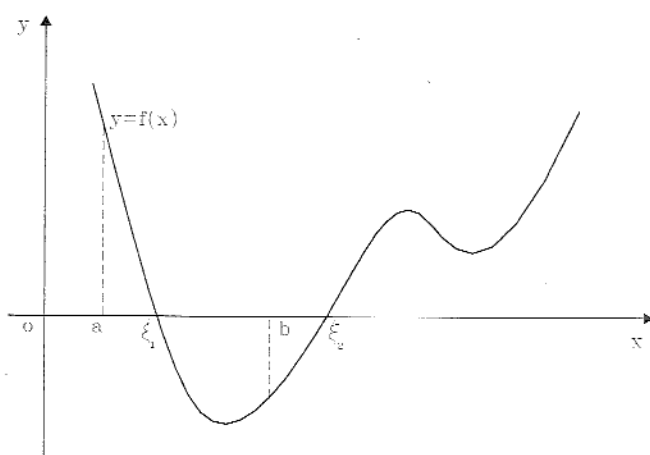


Figura 6.1 Raízes da equação $f(x) = 0$.

raízes podem ser calculadas por meio de uma expressão, tal como $x = (-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac})/2a$ para determinar as duas raízes de $f(x) = ax^2 + bx + c = 0$. No entanto, para equações algébricas de grau superior a quatro e para a grande maioria das equações transcendentais, as raízes não podem ser calculadas analiticamente. Nesses casos, têm que ser usados métodos que encontrem uma solução aproximada para essas raízes.

6.1 Isolamento de raízes

O problema de calcular uma raiz pode ser dividido em duas fases

1. Isolamento da raiz, isto é, encontrar um intervalo $[a, b]$ que contenha uma, e somente uma, raiz de $f(x) = 0$ (ver Figura 6.1).
2. Refinamento da raiz, ou seja, a partir de um valor inicial $x_0 \in [a, b]$, gerar uma sequência $\{x_0, x_1, x_2, \dots, x_k, \dots\}$ que convirja para uma raiz exata ξ de $f(x) = 0$.

Existem alguns métodos para cálculo das raízes de equações polinomiais que não requerem que haja um prévio isolamento de cada raiz. No entanto, a maioria dos métodos para cálculo de raízes necessita que a mesma esteja confinada em um dado intervalo e, além do mais, essa raiz deve ser única em tal intervalo. Devido à existência de alguns teoremas da Álgebra que fornecem importantes informações sobre as equações polinomiais, o isolamento de raízes das equações algébricas e das transcendentais será visto separadamente.

6.1.1 Equações algébricas

Seja uma equação algébrica de grau n , $n \geq 1$, escrita na forma de potências

$$P(x) = c_n x^n + c_{n-1} x^{n-1} + c_{n-2} x^{n-2} + \dots + c_2 x^2 + c_1 x + c_0 = 0 \quad (6.1)$$

com os coeficientes c_i sendo reais e $c_n \neq 0$. Antes de serem abordados métodos para determinar o número e os limites das raízes reais de uma equação polinomial, serão vistos modos de avaliar um polinômio e algumas propriedades importantes desse tipo de função.

Avaliação de polinômio

Para obter o valor de um polinômio $P(x) = c_n x^n + c_{n-1} x^{n-1} + c_{n-2} x^{n-2} + \dots + c_2 x^2 + c_1 x + c_0$ em um ponto $x = a$, usualmente, se faz

$$P(a) = c_n a^n + c_{n-1} a^{n-1} + c_{n-2} a^{n-2} + \dots + c_2 a^2 + c_1 a + c_0.$$

Dessa maneira, para avaliar $P(x)$ de grau n , em $x = a$, são necessárias $n(n+1)/2$ multiplicações e n adições.

Exemplo 6.1 Avaliar $P(x) = 3x^5 - 2x^4 + 5x^3 + 7x^2 - 3x + 1$ em $x = 2$.

$$P(2) = 3 \times 2^5 - 2 \times 2^4 + 5 \times 2^3 + 7 \times 2^2 - 3 \times 2 + 1 = 127,$$

sendo requeridas 15 multiplicações e 5 adições. ■

No entanto, uma maneira mais eficiente de avaliar um polinômio é o método de Horner, que consiste em reescrever o polinômio de forma a evitar potências.