

Objetivos Específicos de Aprendizagem

Ao finalizar este Capítulo, você será capaz de:

- Efetuar operações de integração numérica com os métodos newtonianos;
- Efetuar operações de integração numérica com os métodos gaussianos;
- Efetuar o controle dos erros envolvidos na aplicação computacional dos métodos de integração numérica abordados; e
- Utilizar os algoritmos disponibilizados.

1 Integração Numérica

Neste Capítulo, faremos uso da aproximação de funções para efetuar, via computador com processamento numérico, a **operação clássica do cálculo diferencial e integral**, SAIBA MAIS Essa operação é emblemática para a atual era dos computadores, pois motivou a criação daquele considerado o primeiro computador eletrônico em grande escala, denominado de Electronic Numerical Integrator and Computer (ENIAC I). Disponível em: <<https://pt.wikipedia.org/wiki/ENIAC>>. Acesso em: 12 jul. 2017. FIM DO SAIBA MAIS que consiste em obter o valor de $I = \int_a^b f(x) dx$, em que $[a, b]$ é o **domínio de integração**, $f(x)$ a **função integranda** e a expressão I é denominada de **integral simples e definida**.

Conceitualmente, I possui duas definições clássicas:

Definição 1: obtemos a **integral indefinida** $\tilde{I} = \int f(x) dx$ determinando outra função $F(x)$, tal que $F'(x) = f(x)$, então $\tilde{I} = F(x) + C$, em que C é uma constante e $F(x)$ é denominada de **primitiva** ou **antiderivada**.

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

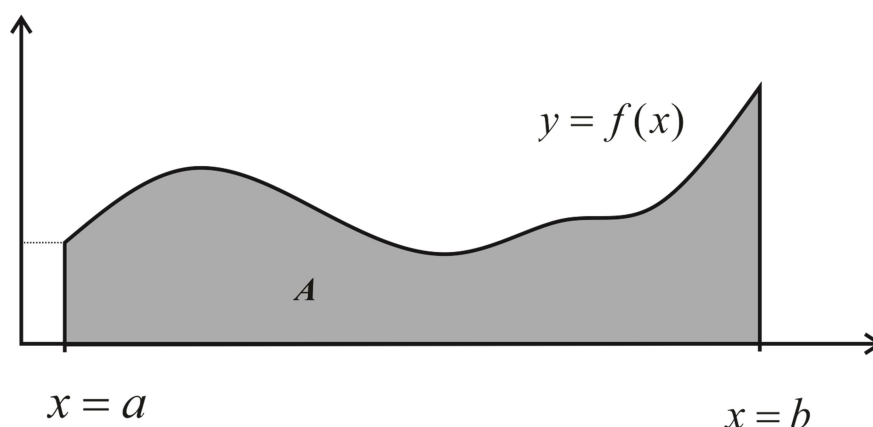
Definição 2: obtemos **integral definida** $I = \int_a^b f(x) dx$ por meio dos seguintes passos:

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

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

segmento do gráfico da $y = f(x)$ situado entre as retas $x = a$ e $x = b$, e o eixo das abscissas x , conforme o Gráfico 8.1.

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



Fonte: Elaboração própria

A conexão entre as duas definições de integral é o **Teorema Fundamental do Cálculo (TFC)**, por meio do qual provamos simplesmente que, se a $f(x)$ for contínua em $[a, b]$ e $F(x)$, a sua primitiva, então:

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

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

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

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

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

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

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

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

Definição 3 – a **integração numérica** $I = \int_a^b f(x)dx$ consiste em aplicar o TFC não diretamente na $y = f(x)$ original, mas em aproximadoras da $y = f(x)$.

Os métodos de integração numérica podem ser agrupados em duas famílias, conforme podemos ver na literatura, de acordo com a forma de aproximação da função integranda $y = f(x)$:

- a) por interpolação polinomial simples sobre pontos uniformemente distribuídos em $[a, b]$ – **métodos de Newton-Cotes**; e
- b) por interpolação polinomial sobre pontos predefinidos em $[a, b]$ – **métodos gaussianos**.

Assim, considerando a interpretação geométrica de uma integral definida, vamos desenvolver métodos e implementar algoritmos para calculá-la numericamente, com erro máximo controlado, por meio de aproximações do cálculo da área delimitada por $y = f(x)$, $x = a$, $x = b$ e $y = 0$.

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

Nas seções a seguir, vamos detalhar dois representantes clássicos da família de métodos de integração numérica de **Newton-Cotes**.

8.1.1 Método dos Trapézios

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

- a) Dividimos $[a, b]$ em n subintervalos de comprimento uniforme $h = \frac{(b-a)}{n}$.
- b) Obtemos os $n+1$ valores funcionais (x_i, y_i) , em que

$$x_1 = a, \quad x_{i+1} = x_i + h \quad (\forall i = 1, 2, \dots, n); \text{ e}$$

$$y_i = f(x_i), \quad (\forall i = 1, 2, \dots, n+1).$$

- c) Para cada 2 pontos sucessivos (x_i, y_i) e (x_{i+1}, y_{i+1}) , determinamos o seu interpolador polinomial na forma de Gregory-Newton com diferenças como:

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

Então, pelo **TFC**, obtemos cada área aproximada A_i no subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$ que é dada por:

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

Adicionando as áreas correspondentes aos n subintervalos, teremos a área aproximada total denotada por T_n ,

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

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

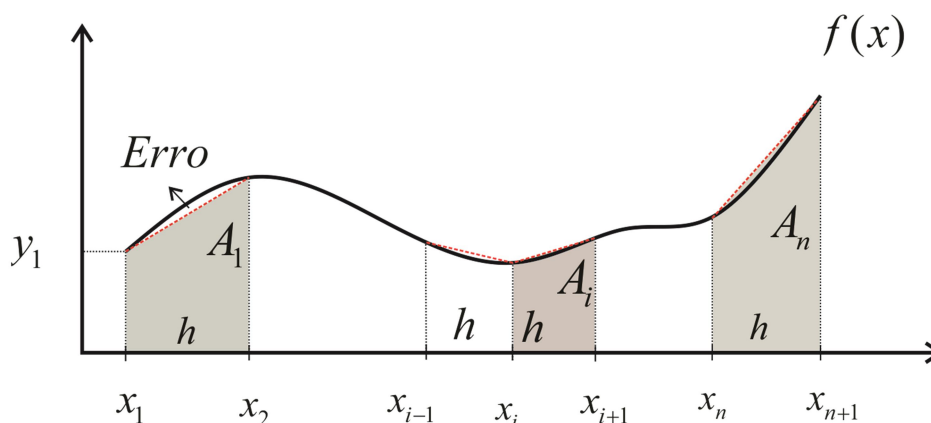
$$T_n = \frac{h}{2} [y_1 + 2y_2 + 2y_3 + \dots + 2y_n + y_{n+1}]$$

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

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

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

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



Fonte: Elaboração própria

Da eq. (1), podemos demonstrar o:

Teorema 1: para uma $y = f(x)$ continuamente diferenciável, $I = \int_a^b f(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} T_n$.

Exemplo 8.1: calcule por trapézios $I = \int_a^b f(x) dx$, em que a $f(x)$ é a função discreta a seguir:

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

Solução:

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

Aplicando a eq.(1), resulta \Rightarrow

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

$$I \cong T_n = 4.875$$

Podemos observar que, no primeiro trapézio da Gráfico 8.2, ocorre uma diferença, ou erro, entre a área desse trapézio e a área exata no domínio $[x_1, x_2]$. Esse erro, que é de truncamento, ocorre em todos os demais trapézios, desde que a integranda não seja uma reta.

Na sequência, vamos abordar como estimamos o erro total gerado pelos n trapézios na aproximação de uma integração I pela eq. (1).

Teorema do Erro de Truncamento de T_n

Em uma $I = \int_a^b f(x) dx$, se $y = f(x)$ for contínua e duplamente diferenciável em $[a, b]$ e aplicarmos trapézios com intervalo $[a, b]$ subdividido em n partes iguais, então o **erro de truncamento** de T_n será:

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

Demonstração:

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

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

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

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

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

$$x \in [x_i, x_{i+1}].$$

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

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

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

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

Logo, o erro em cada subintervalo é dado por:

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

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

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

Por meio de algumas simplificações algébricas, temos que:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Exemplo 8.2: determine o n mínimo para que o erro de truncamento máximo seja menor do que $\varepsilon = 10^{-6}$ ao efetuar $I = \int_1^6 \frac{1}{1+x} dx$ pelo método dos trapézios.

Solução:

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

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

Aplicando a eq. (2), temos

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

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

Recomendamos que você utilize n como potência de 2, para obter valores de h exatos, na base decimal e binária, portanto valores de x_i com mais precisão.

A aproximação T_n da integral I do **Exemplo 8.2**, obtida pelo método dos trapézios com $n=1614$ subdivisões do intervalo $[1, 6]$, em precisão simples de 8 dígitos significativos, é $T_n=1.25276315$. Como a integral exata é $I_e=1.252762968495368$ (com 16 dígitos significativos), temos o **Erro Exato** = $|T_n - I_e| = 1.8 \cdot 10^{-7}$, ou seja, um **Erro de truncamento** inferior à $\varepsilon = 10^{-6}$. LINK Para estimar isoladamente o **Erro de Arredondamento** de T_n , podemos calcular um T_n^* com precisão dupla (16 dígitos significativos) e compará-lo com o T_n . FIM DO LINK

Podemos calcular também o **Erro de Truncamento Estimado** = $|T_n - T_{2n}|$, usando precisão de 16 dígitos significativos, para isolar os efeitos dos arredondamentos.

Note que o Teorema 1, quando utilizado com $n \rightarrow \infty$, pode ser inválido se aplicado com precisão finita, pois os arredondamentos podem se acumular e desestabilizar os resultados. Nesses casos, existe um n limite ótimo em que conseguimos o resultado com menor erro total, mas que não é conhecido previamente. Para comprovar essa situação, vamos efetuar por trapézios a integral do **Exemplo 8.2**, aumentando sucessivamente o valor do n e avaliando o comportamento dos resultados obtidos nos testes, que foram feitos em linguagem C, com variáveis de 32 *bits* (8 dígitos significativos), conforme a Tabela 8.1.

Tabela 8.1 – Comparativo de erros de truncamento exatos de T_n , obtido com 32 *bits*

n	Erro de truncamento Exato = $ T_n - I_e $
1614	$1.8 \cdot 10^{-7}$
2048	$2.8 \cdot 10^{-8}$
4096	$3.0 \cdot 10^{-7}$
32768	$2.9 \cdot 10^{-7}$
65536	$8.5 \cdot 10^{-6}$
131072	$3.3 \cdot 10^{-5}$
262144	$5.6 \cdot 10^{-5}$
4194304	$2.1 \cdot 10^{-2}$

Fonte: Elaboração própria

Observe que os erros de arredondamentos começaram a influenciar o T_n já a partir de 4.096 subdivisões e deturparam completamente o resultado nas últimas tentativas.

No caso de cálculos com precisão de 8 dígitos, perceba que existe um n limite ótimo em torno de $n = 2048$, ocorrendo o menor erro total. Quando aumentamos o valor de n , além de 1614, reduzimos sempre os erros de truncamento para valores menores do que 10^{-6} , mas aumentamos o erro de arredondamento acumulado, que ocorre em torno do 7º dígito significativo, nesse exemplo.

Entretanto, com variáveis de 64 *bits* (precisão de 16 dígitos), os erros de arredondamento influenciam muito menos, como podemos ver na Tabela 8.2.

Tabela 8.2 – Comparativo de erros de truncamento exatos de T_n^* , obtido com 64 *bits*

n	Erro de truncamento Exato = $ T_n^* - I_e $
1614	$1.7 * 10^{-7}$
4194304	$1.1 * 10^{-13}$

Fonte: Elaboração própria

No caso de cálculos com precisão de 16 dígitos, o n limite ótimo é muito maior, pois os arredondamentos acumulam erros em torno do 15º dígito significativo, nesse exemplo.

Para contornar esse problema de acúmulo de arredondamentos, podemos efetuar algumas aproximações com diferentes valores de n e analisar a tendência de evolução dos resultados do método dos trapézios via extrapolação dos T_n obtidos para o **limite de Romberg**, que consiste em:

- efetuar k aproximações T_i por trapézios, iniciando com espaçamento h e reduzindo obrigatoriamente o h pela metade em cada nova aproximação;
- denotar as k aproximações iniciais T_i por $T_{(i,1)}$, para $i = 1, \dots, k$; e
- gerar a matriz de aproximações por extrapolação via:

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

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

Desses valores extrapolados, resulta o:

Teorema de Romberg: para uma $y = f(x)$ continuamente diferenciável,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} T_{(i,k)} = \int_a^b f(x) dx.$$

Exemplo 8.3: efetue $\int_0^1 e^x dx$ por trapézios e Romberg, com $k = 5$ aproximações,

iniciando com $h = 0.25$ ($n = 4$ subintervalos) e precisão de 16 dígitos.

Solução:

Aplicando a eq. (1), inicialmente com $n = 4$ ($h = 0.25$), para gerar a primeira coluna de resultados $T_{(i,1)}$; e a eq. (3), para gerar os elementos das demais colunas, temos:

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

Como os últimos resultados extrapolados são iguais, então:

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

No **Caderno de Algoritmos**, você encontra o arquivo **Cap8exem8.3TnRomberg.m** com o algoritmo de Romberg.

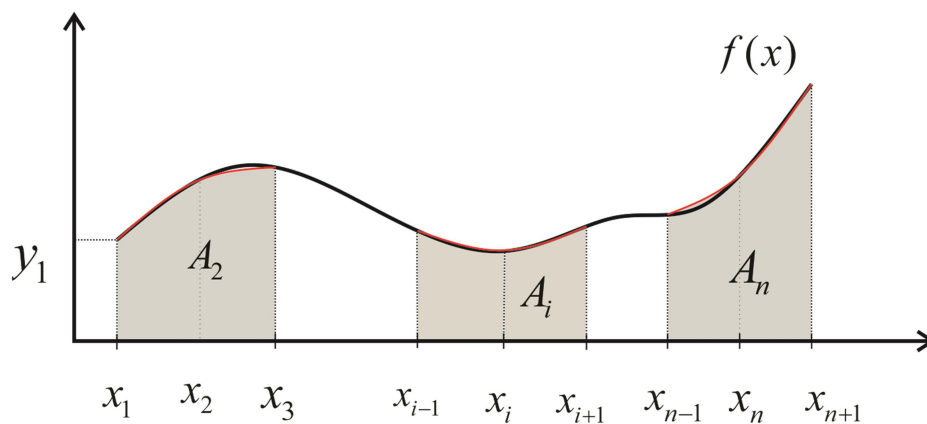
A seguir, apresentaremos um método que, em geral, fornece resultados mais exatos do que o método dos trapézios para uma mesma quantidade de avaliações da

integranda.

8.1.2 Método de Simpson

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

Gráfico 8.3 – Integral de $f(x)$ aproximada em $[a, b]$ por Simpson, com áreas A_i , $i = 2, 4, \dots, n$, obtidas a cada dois sub-intervalos $[x_{i-1}, x_i]$ e $[x_i, x_{i+1}]$



Fonte: Elaboração própria

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

- a) Dividimos $[a, b]$ em n (**inteiro par**) partes iguais de comprimento

$h = \frac{b-a}{n}$ e geramos os $n+1$ pontos sucessivos (x_i, y_i) , em que

$y_i = f(x_i)$.

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

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

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

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

- c) Para efetuar a integral $A_i = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} P_2(x) dx$, aplicamos o TFC e integramos o interpolador polinomial por meio da técnica da mudança de variáveis via $x = t * h + x_{i-1}$.

$$\text{Então, } dx = h * dt, \quad \frac{(x - x_{i-1})}{h} = t \text{ e}$$

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

Logo,

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

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

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

Substituindo $P_2(t)$ em A_i , temos,

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

Assim,

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

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

E substituindo os valores das diferenças finitas ascendentes, temos:

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

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

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

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

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

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

Essa é a fórmula de Simpson para cálculo aproximado da integral

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

Exemplo 8.4: efetue por Simpson $I = \int_0^3 f(x) dx$, em que $f(x)$ é uma função discreta,

conforme a tabela a seguir:

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

Solução:

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

Aplicando a eq. (4), temos:

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

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

Algumas considerações sobre o **método de Simpson**:

- Simpson, via de regra, fornece resultados mais precisos do que trapézios para um mesmo n . Também exige uma estimativa de um n ótimo, pelo mesmo motivo do trapézios, ou seja, para um n elevado, o acúmulo dos erros de arredondamento pode ser maior do que o ganho obtido com a diminuição dos erros de truncamento, quando os resultados são obtidos em precisão finita.
- Para determinar um n ótimo, podemos tomar a expressão do erro de truncamento total do Simpson, que é dada por:

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

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

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

- c) Podemos melhorar os resultados por meio de tentativas sucessivas (com $h_{novo} = h_{velho} / 2$) e analisar o comportamento dos resultados.
- d) Não existe uma extrapolação específica para o método de Simpson, como a de Romberg para o método dos trapézios.

Exemplo 8.5: determine o n mínimo para não cometer erro superior à $\varepsilon = 10^{-6}$ ao efetuar por Simpson a $I = \int_1^6 (1+x)^{-1} dx$.

Solução:

Como

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

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

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

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

Aplicando na eq. (5) \Rightarrow

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

$$n = \frac{5}{h} = 60.07028... \Rightarrow n = 60$$

Devido ao erro de arredondamento do passo h , para $n = 60$, recomendamos usar $n = 64 = 2^6$.

DESTAQUE Conforme resultado do **Exemplo 8.2**, para essa mesma integral, o método dos trapézios demanda um $n = 1614$, com redução de 96% no número de cálculos de valores da função integranda (chamadas), quando usamos o método de Simpson. FIM DO DESTAQUE

Os métodos de Newton-Cotes, apesar de serem conceitualmente simples, podem exigir alto volume de operações aritméticas em determinadas integrais, mesmo se utilizarmos aceleradores como Romberg. Além disso, por necessitarem

dos valores de $f(a)$ e $f(b)$, não são aplicáveis em integrais impróprias com descontinuidades nos extremos do intervalo de integração, ou com extremos infinitos do tipo:

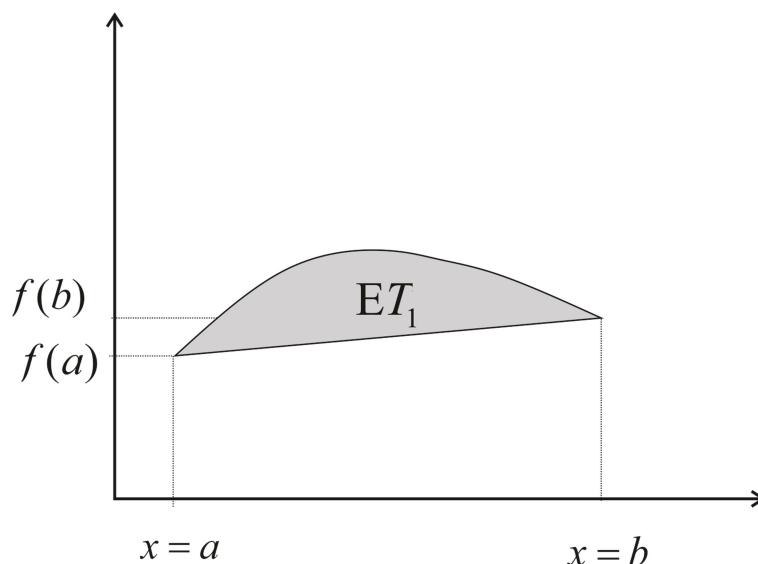
$$\int_a^{\infty} \quad \int_{-\infty}^b \quad \int_{-\infty}^{\infty}$$

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

8.2 Integração Numérica Gaussiana ou Quadratura Gaussiana

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

Gráfico 8.4 – Erro ET_1 da aproximação por Trapézios com $m = 2$ pontos

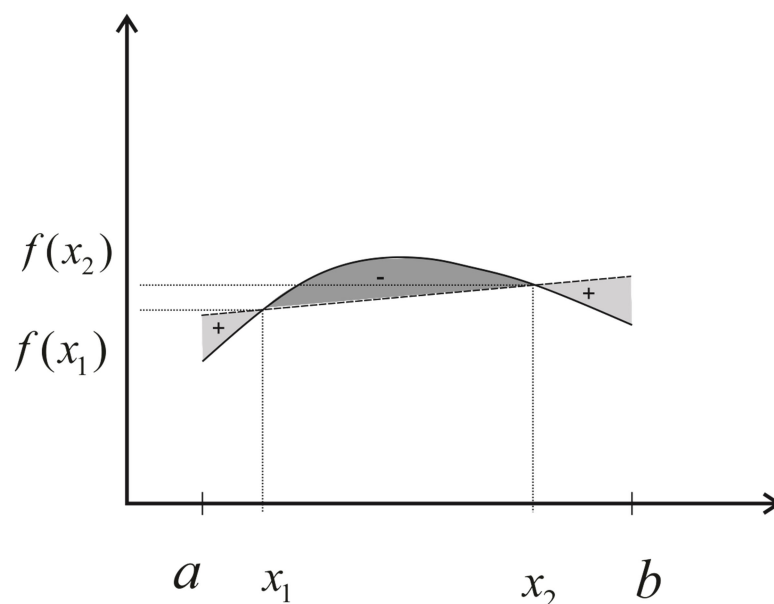


Fonte: Elaboração própria

O desafio fundamental é: se mantidos apenas os cálculos de valores da $y = f(x)$ em $m = 2$ pontos, seria possível diminuir o erro de truncamento gerado pelo método dos trapézios da Gráfico 8.4? A resposta de Gauss para essa questão é

positiva, desde que a determinação dos dois valores funcionais que definirão a reta aproximadora sejam fixados não nos extremos do intervalo $[a, b]$, mas em pontos internos adequadamente escolhidos (x_1 e x_2), como os da Gráfico 8.5.

Gráfico 8.5 – Representação do Erro EG_2 da aproximação por Gauss-Legendre com $m = 2$ pontos



Fonte: Elaboração própria

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

Na quadratura Gaussiana, os métodos de integração de $I = \int_b^a f(x) dx$ são desenvolvidos de modo que os valores da integranda $y = f(x)$ são obtidos não em quaisquer pontos desejados do domínio $[a, b]$, como pode ser feito nos métodos newtonianos, mas em pontos previamente estabelecidos. Esses pontos independem da integranda, porém dependem da quantidade de chamadas na integranda e da otimização do erro de truncamento para essa quantidade de chamadas.

Como os pontos de cálculo da integranda são pré-fixados, temos de

padronizar o domínio $[a, b]$ em um intervalo fixo e conhecido, então vamos padronizar o domínio de integração $[a, b]$ fixando-o em $[-1, +1]$ por meio da conhecida mudança de variáveis:

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

Logo,

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

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

A seguir, vamos desenvolver dois métodos típicos da quadratura gaussiana.

8.2.1 Método de Gauss-Legendre

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

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

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

modo que G_m seja exata.

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

resultam as seguintes equações:

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

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

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

A solução desse sistema pelo método de Newton, apresentado no Capítulo 4, fornece (em *double*):

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

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

Generalizando a integração numérica de Gauss-Legendre para o intervalo $[a, b]$, aplicamos a eq. (6) na eq. (5) a fim de obter a aproximação de I :

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

Então, redefinimos a G_m da eq. (6), para o intervalo $[a, b]$, como:

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

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

Solução:

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

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

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

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

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

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

$$I \cong G_m = 1.71789637800750$$

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

Na Tabela 8.3 estão listados os valores de $t_{(m,k)}$ e $C_{(m,k)}$, para $m=1$ até 10, obtidos resolvendo o sistema não linear (7), em precisão *double*.

Tabela 8.3 – Valores de $t_{(m,k)}$ e $C_{(m,k)}$ para integração de Gauss-Legendre

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

1	$t_1 = 0$	$C_1 = 2$
2	$t_2 = -t_1 = \sqrt{3}^{-1}$	$C_1 = C_2 = 1$
3	$t_2 = 0$ $t_3 = -t_1 = \sqrt{3/5}$	$C_2 = \frac{8}{9}$ $C_3 = C_1 = \frac{5}{9}$
4	$t_3 = -t_2 = 0.3399810435848562648$ $t_4 = -t_1 = 0.8611363115940525752$	$C_3 = C_2 = 0.65214515486254614263$ $C_4 = C_1 = 0.34785484513745385737$
5	$t_3 = 0$ $t_4 = -t_2 = 0.53846931010568309104$ $t_5 = -t_1 = 0.90617984593866399280$	$C_3 = 128/225$ $C_4 = -C_2 = 0.47862867049936646804$ $C_5 = -C_1 = 0.23692688505618908751$
6	$t_4 = -t_3 = 0.23861918608319690863$ $t_5 = -t_2 = 0.66120938646626451366$ $t_6 = -t_1 = 0.93246951420315202781$	$C_4 = -C_3 = 0.46791393457269104739$ $C_5 = -C_2 = 0.36076157304813860757$ $C_6 = -C_1 = 0.17132449237917034504$
7	$t_4 = 0$ $t_5 = -t_3 = 0.40584515137739716691$ $t_6 = -t_2 = 0.74153118559939443986$ $t_7 = -t_1 = 0.94910791234275852453$	$C_4 = 512/1225$ $C_5 = -C_3 = 0.38183005050511894495$ $C_6 = -C_2 = 0.27970539148927666790$ $C_7 = -C_1 = 0.129484966168869693271$
8	$t_7 = -t_4 = 0.183434642495650$ $t_6 = -t_3 = 0.525532409916329$ $t_7 = -t_2 = 0.796666477413627$ $t_8 = -t_1 = 0.960289856497536$	$C_5 = -C_4 = 0.362683783378369$ $C_6 = -C_3 = 0.313706645877885$ $C_7 = -C_2 = 0.222381034453374$ $C_8 = -C_1 = 0.101228536290377$
9	$t_5 = 0$ $t_6 = -t_4 = 0.324253423403809$ $t_7 = -t_3 = 0.613371432700591$ $t_8 = -t_2 = 0.836031107326639$ $t_9 = -t_1 = 0.968160239507622$	$C_5 = 0.330239355001305$ $C_6 = -C_4 = 0.312347077039964$ $C_7 = -C_3 = 0.260610696402964$ $C_8 = -C_2 = 0.180648160694839$ $C_9 = -C_1 = 0.0812743883615805$
10	$t_6 = -t_5 = 0.148874338981631$ $t_7 = -t_4 = 0.433395394129247$ $t_8 = -t_3 = 0.679409568299024$ $t_9 = -t_2 = 0.865063366688989$ $t_{10} = -t_1 = 0.973906528517168$	$C_6 = -C_5 = 0.295524224714756$ $C_7 = -C_4 = 0.269266719309977$ $C_8 = -C_3 = 0.219086362516008$ $C_9 = -C_2 = 0.149451349150562$ $C_{10} = -C_1 = 0.0666713443086937$

Fonte: Elaboração própria

Para fins didáticos, apresentamos a Tabela 8.4, com precisão de calculadoras científicas.

Tabela 8.4 – Valores de $t_{(m,k)}$ e $C_{(m,k)}$ para integração de Gauss-Legendre, com precisão de calculadoras e $m = 1$ até 5

m	$t_{(m,k)}$	$C_{(m,k)}$
1	$t_1 = 0$	$C_1 = 2$
2	$t_1 = -\sqrt{3}^{-1}$ $t_2 = \sqrt{3}^{-1}$	$C_1 = 1$ $C_2 = 1$
3	$t_1 = -\sqrt{3/5}$ $t_2 = 0$ $t_3 = \sqrt{3/5}$	$C_1 = \frac{5}{9}$ $C_2 = \frac{8}{9}$ $C_3 = \frac{5}{9}$
4	$t_1 = -0.861136312$ $t_2 = -0.339981044$ $t_3 = +0.339981044$ $t_4 = +0.861136312$	$C_1 = 0.347854845$ $C_2 = 0.652145155$ $C_3 = 0.652145155$ $C_4 = 0.347854845$
5	$t_1 = -0.906179846$ $t_2 = -0.538469310$ $t_3 = 0$ $t_4 = +0.538469310$ $t_5 = +0.906179846$	$C_1 = 0.236926885$ $C_2 = 0.478628670$ $C_3 = 0.568888889$ $C_4 = 0.478628670$ $C_5 = 0.236926885$

Fonte: Elaboração própria

DESTAQUE Os valores dos m “nós” $t_{(m,k)}$ são as raízes dos polinômios ortogonais de Legendre de grau m (CARNAHAN; LUTHER; WILKES, 1990), distribuídas simetricamente no intervalo normalizado $[-1, +1]$. Assim, se forem obtidos os valores de $t_{(m,k)}$, via determinação das raízes dos polinômios ortogonais de Legendre de grau m (POLINÔMIOS..., 2017), o sistema (7), de $2m$ equações, se tornará linear e permitirá a obtenção dos m valores dos “pesos” $C_{(m,k)}$ usando as suas primeiras m equações lineares. FIM DO DESTAQUE

Os polinômios de Legendre podem ser obtidos genericamente para qualquer grau n por meio de relações de recorrência, partindo dos dois primeiros polinômios $P_0(x) = 1$ e $P_1(x) = 0 + 1x$, conforme as relações:

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

Para utilização numérica, obtemos diretamente os coeficientes por meio das seguintes recorrências, para cada grau n :

a) grau $n = 1 \rightarrow a_{(n,1)} = 0; a_{(n,2)} = 1; (P_1(x) = 0 + 1x)$

b) grau $n = 2 \rightarrow a_{(n,1)} = -1/2; a_{(n,2)} = 0; a_{(n,3)} = 3/2; P_2(x) = (-1 + 0x + 3x^2)/2$

c) graus $n = 3, 4, \dots, m$

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

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

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

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

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

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

Por último, podemos provar, utilizando o teorema do valor médio para integrais, que o limite do erro de truncamento EG_m da integração numérica de Gauss-Legendre, utilizando a integranda original $f(x)$, é dado por

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

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

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

Solução:

Derivando a integranda, resulta que:

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

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

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

e generalizando para derivada de ordem k , temos

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

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

Para $m = 6$:

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

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

Para $m = 10$:

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

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

Para $m = 16$:

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

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

Portanto, são necessários $m = 16$ pontos no método de Gauss-Legendre para que essa integral seja da ordem de $O(10^{-6})$, enquanto nos métodos de Simpson e trapézios necessitamos de $n = 60$ e $n = 1614$ subdivisões do intervalo $[a, b]$, o que equivale a usar 61 e 1615 pontos, respectivamente.

Exemplo 8.8: determine $I = \int_1^6 \frac{1}{1+x} dx$ pelo método de Gauss-Legendre com $m = 3$

pontos, calcule o erro exato, determine e plote o polinômio de grau $n = m - 1 = 2$, que passa sobre os 3 pontos (x_k, y_k) definidos pelo método, e compare a integração desse polinômio P_{m-1} com o resultado da integração pelo método de Gauss-Legendre.

Solução:

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

m	$t_{(m,k)}$	$C_{(m,k)}$
3	$t_1 = -\sqrt{3/5}$	$C_1 = \frac{5}{9}$
	$t_2 = 0$	$C_2 = \frac{8}{9}$
	$t_3 = \sqrt{3/5}$	$C_3 = \frac{5}{9}$

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

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

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

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

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

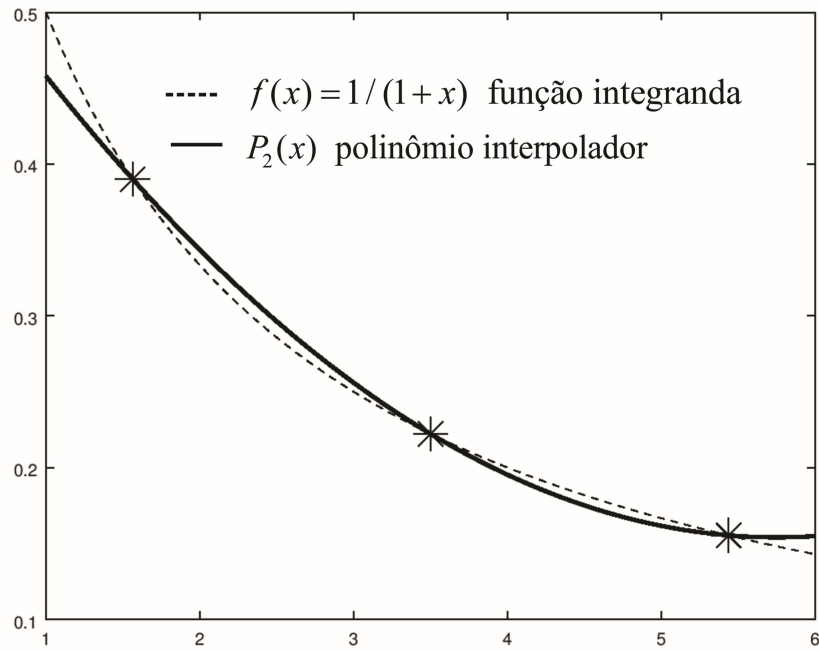
$$G_3 = \frac{(6-1)}{2} [0.50056116736271645]$$

$$I \cong G_3 = 1.25140291840679$$

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

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

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



Fonte: Elaboração própria

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

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

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

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

$$I_{P_2} = \int_1^6 (0.5993265993265994 - 0.1548821548821548x + 0.0134680134680135x^2) dx$$

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

Observe que a integração efetuada pelo Método de Gauss-Legendre G_3 (eq. 8) tem 'exatamente' o mesmo resultado da integração I_{P_2} do polinômio $P_2 = P_{n=m-1}(x)$, que passa sobre os m pontos internos utilizados pelo método de Gauss-Legendre.

Considerações sobre o **Exemplo 8.8**:

- Observando a expressão do erro de Gauss-Legendre, comparado com o erro do método de Simpson para o mesmo número de chamadas da função, notamos que Gauss é mais preciso.

- b) Pelas suas características, Gauss-Legendre é numericamente mais estável do que os métodos de Newton, uma vez que a quantidade de parâmetros $t_{(m,k)}$ e $C_{(m,k)}$ é menor e não vai acumular arredondamentos.
- c) Gauss-Legendre não é aplicável se a integranda $y=f(x)$ for uma tabela de pontos discretos.
- d) Gauss-Legendre fornece resultados pobres se $y=f(x)$ possuir descontinuidades em $[a,b]$, como ocorre no **Exemplo 8.9**.
- e) Gauss-Legendre é de natureza aberta, isto é, a integranda não é avaliada nos extremos a e b . Em decorrência disso, esse método pode ser aplicado em integrais impróprias, em que a $I = \int_a^b f(x)dx$ possui descontinuidades em a e/ou b , ou a e/ou b podem ser infinito(s), conforme podemos verificar nos **Exemplos 8.9 e 8.10**.
- f) No(s) caso(s) de extremo(s) com valor(es) infinito(s), teremos:

- i. Se apenas um extremo for ∞ , $I = \int_a^\infty f(x) dx$, aplicaremos a

transformação de variáveis:

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

$$\text{em} \quad \int_a^\infty f(x) dx = - \int_{1/a}^0 \frac{f(u)}{u^2} du = \int_0^{1/a} \frac{f(u)}{u^2} du, \text{ que é uma integral imprópria}$$

com descontinuidade no extremo $1/\infty = 0$. O método de Gauss-Legendre pode ser aplicado como no exemplo anterior.

- ii. Se um extremo for ∞ e o outro for nulo, também poderemos aplicar o método subdividindo o intervalo de integração original em duas partes, por exemplo:

$$\int_0^\infty f(x) dx = \int_0^1 f(x) dx + \int_1^\infty f(x) dx$$

- iii. Se os dois extremos forem ∞ , também poderemos subdividir em 2 partes, recaindo as duas integrais nos casos anteriores:

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

Exemplo 8.9: do cálculo, sabemos que a igualdade $I = \int_1^3 \frac{dx}{2-x} = \int_1^2 \frac{dx}{2-x} + \int_2^3 \frac{dx}{2-x}$ é sempre válida. Efetue essas integrais numericamente por Gauss-Legendre até $m = 7$ e verifique que essa igualdade teórica não é mais verdadeira, devido ao ponto de singularidade em $x = 2$ no intervalo $[1, 3]$.

Solução:

Aplicando a eq.(8), resulta:

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

Usando o algoritmo apresentado no Octave, observe que a integral $\int_1^3 \frac{dx}{2-x}$, aproximada por Gauss-Legendre, gera valores inconsistentes, conforme o m utilizado por conter um ponto de singularidade dentro do intervalo (com m ímpar gera valor infinito para o ponto medio $x = 2$).

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

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

a soma dessas duas partes geram o resultado exato, que é nulo. E podemos verificar analiticamente que o valor exato dessa integral é zero pois, em

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

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

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

Solução:

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

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

Na próxima seção, apresentaremos um método gaussiano de integração, cujo propósito específico é a determinação otimizada dos coeficientes das séries aproximadoras de funções, usando polinômios de Tchebyshev, conforme vimos no Capítulo 6.

8.2.2 Método Gauss-Tchebyshev

A maneira de determinar os parâmetros do método de Gauss-Legendre pode ser utilizada para gerar outros métodos de integração com propósitos específicos.

Por exemplo, para uma integral particular do tipo $I = \int_{-1}^{+1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx$, cuja $f(x)$ é uma função simples e bem comportada, nenhum dos métodos de Newton-Cotes poderá ser utilizado devido às descontinuidades em -1 e 1 . Já o método de Gauss-Legendre poderá não ser eficiente (veja o **Exemplo 8.11**). Por consequência, vamos propor uma integração numérica na forma

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

Em que, na parte direita da eq. (10) foi usada apenas a parcela bem comportada $f(x)$ da integranda $f(x)/\sqrt{1-x^2}$. Podemos demonstrar que, impondo a condição de que a GT_m seja exata para integrar polinômios de grau até $2m-1$, resulte os seguintes valores para os “pesos” a_j e os “nós” x_j que são as **raízes do polinômio de Tchebyshev de grau m** LINK Lembramos que as raízes do polinômio de Tchebyshev de grau m já foram abordadas no Capítulo 6, quando utilizamos essa forma de integração, denominada de método de Gauss-Tchebyshev, para

determinar os coeficientes da série Tchebyshev. FIM DO LINK (VANDERGRAFT, 1983):

$$a_j = \pi / m$$

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

Então

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

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

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

Agora, vamos apresentar um exemplo de integração pelo método de Gauss-Tchebyshev.

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

e compare-o com os resultados de Gauss-Legendre. Efetue tentativas com m crescente até que o resultado atinja a precisão utilizada.

Solução:

Aplicando as eq. (11) e (6) para obter respectivamente os valores de GT_m e G_m , com $m = 2, 3, \dots, 10$, resulta:

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

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

Por Gauss-Legendre, integramos a função completa, com o fator peso, $f(x) = \frac{x \operatorname{sen}(x)}{\sqrt{1-x^2}}$, mas os resultados ficam longe da convergência para a solução.

Mesmo com $m = 10$, verificamos a ineficiência do método para essa integral com descontinuidades em ambas extremidades. Então, a integração por Gauss-Tchebyshev é a mais adequada, por já considerar esse fator peso com descontinuidades nos extremos.

Em tempo, se a $f(x)$ que compõe a integranda possuir singularidades no domínio de integração, teremos de usar valores para o m muito elevados também para a integração por Gauss-Tchebyshev.

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

8.3 Conclusões

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

- a) o método dos Trapézios será o mais adequado para funções integrandas com gráfico tipo escada;
- b) o método de Simpson é indicado para funções integrandas discretas (definidas por tabela de pontos);
- c) o método de Gauss-Legendre é mais eficiente, em geral, para funções integrandas com expressão conhecida; e
- d) a integração numérica de Gauss-Tchebyshev tem aplicações específicas e deve ser utilizada quando a função integranda já inclui o fator peso

$W(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$ na sua expressão original, como na determinação de

coeficientes da série aproximadora de Tchebyshev utilizada no Capítulo 6; e

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

Por fim, também podemos utilizar essa composição de integrais nos métodos newtonianos.

Confira se você teve um bom entendimento do que abordamos neste Capítulo realizando as atividades propostas no **Cardeno de Exercícios e Respostas**. Essa ação será muito importante para a fixação do conteúdo e para a continuidade dos seus estudos.