CAPÍTULO 5

Integração Numérica

Introdução

Por que Integração Numérica ? Isto é: por que não restringir o cálculo de integrais ao uso das técnicas de integração estudadas no Cálculo Diferencial e Integral ? A resposta para essa questão tem por base dois fatos:

1. Geralmente em problemas envolvendo o cálculo de integrais não se conhece a expressão analítica da função integrando, somente os valores dessa função, o que inviabiliza o uso das técnicas integração do Cálculo, mas que são os dados necessários para a integração numérica;

2. Mesmo quando se conhece a expressão analítica da função integrando, o cálculo da função primitiva pode ser trabalhoso e nem sempre simples. Por exemplo, a integral

$$\int e^{-x^2}\,dx$$

resulta em uma função que não pode ser expressa em termos de combinações finitas de outras funções algébricas, logarítmicas ou exponenciais.

A idéia básica da integração numérica reside na aproximação da função integrando por um polinômio. As fórmulas de integração são somatórios cujas parcelas são valores da função $f(x)$ calculados em pontos e multiplicados por pesos convenientemente escolhidos. Assim, vamos procurar desenvolver fórmulas de integração do tipo:

$$\int_a^b f(x)\,dx \cong \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i), \tag{5.1}$$

onde $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$ são chamados *pontos de integração* e w_i são os pesos da fórmula de integração.

5.1 Fórmula de Newton-Cotes

Neste caso, os pontos de integração são igualmente espaçados em (a, b), tal que $h = \dfrac{b-a}{n}$, onde n é um número inteiro. Os pontos de integração (para este caso) são:

$$x_j = a + jh \quad j = 0 : n.$$

Considere agora o polinômio de Lagrange de grau n que interpola os $(n+1)$ pontos $(x_i, f(x_i))$, $i = 0 : n$

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x).$$

Integrando esta última expressão no intervalo (a, b), temos:

$$\int_a^b f(x)\, l(x)\, dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b l_i(x)\, dx.$$

Assim, de (5.1), o cálculo de w_i é obtido pela integração de $l_i(x)$, isto é:

$$w_i = \int_a^b l_i(x)\, dx = \int_a^b \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}\, dx. \tag{5.2}$$

Através da equação (5.2) podemos obter fórmulas do tipo *Newton-Cotes* para polinômios de qualquer grau.

5.1.1 Fórmula dos Trapézios: $n = 1$

A fórmula dos trapézios corresponde à interpolação da função a ser integrada por um polinômio de grau $n = 1$. Como a interpolação linear pede 2 pontos, tomaremos os extremos do intervalo de integração, isto é, $a = x_0$ e $b = x_1$.

A expressão (5.2) nos permite encontrar os pesos da regra dos trapézios:

$$\begin{aligned}
w_0 &= \int_{x_0}^{x_1} \frac{(x-x_1)}{(x_0-x_1)}\, dx &= \frac{1}{-h}\int_{x_0}^{x_1}(x-x_1)\, dx &= -\left.\frac{(x-x_1)^2}{2h}\right|_{x=x_0}^{x=x_1} &= \frac{h}{2} \\
w_1 &= \int_{x_0}^{x_1} \frac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)}\, dx &= \frac{1}{h}\int_{x_0}^{x_1}(x-x_0)\, dx &= \left.\frac{(x-x_0)^2}{2h}\right|_{x=x_0}^{x=x_1} &= \frac{h}{2}
\end{aligned}$$

Com isso, podemos estabelecer a *fórmula dos trapézios* para a integração no intervalo (x_0, x_1):

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\, dx = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right]. \tag{5.3}$$

5.1.2 Fórmula de Simpson: $n = 2$

Para estabelecer a *fórmula de Simpson*, interpolamos $f(x)$ usando um polinômio de grau 2 que coincide com essa função nos pontos x_0, x_1 e x_2. Assim, tomamos $n = 2$, $x_0 = a$, $x_1 = \dfrac{(a+b)}{2}$ e $x_2 = b$ em (5.2). Integrando os polinômios de grau 2, estabelecemos os pesos da *fórmula de Simpson*:

$$w_0 = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\, dx = \frac{h}{3}$$

$$w_1 = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\, dx = \frac{4h}{3}$$

$$w_2 = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\, dx = \frac{h}{3}$$

O cálculo das integrais acima podem ser simplificados lembrando que:

$$x_1 - x_0 = h, \quad x_2 - x_1 = h, \quad x_2 - x_0 = 2h$$

e usando a substituição de variáveis $t = x - x_1$ e portanto $t + h = x - x_1 + h = x - x_0$, $t - h = x - x_1 - h = x - x_2$. Por exemplo, fazendo estas substituições no cálculo do peso w_0 temos:

$$w_0 = \int_{x_0}^{x_1} \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}\, dx = \int_{-h}^{h} \frac{t(t - h)}{2h^2}\, dt = \frac{h}{3}$$

Dessa maneira, usando polinômios interpoladores de grau 2, estabelecemos a fórmula de Simpson:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\, dx = \left(\frac{h}{3}\right)[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]. \tag{5.4}$$

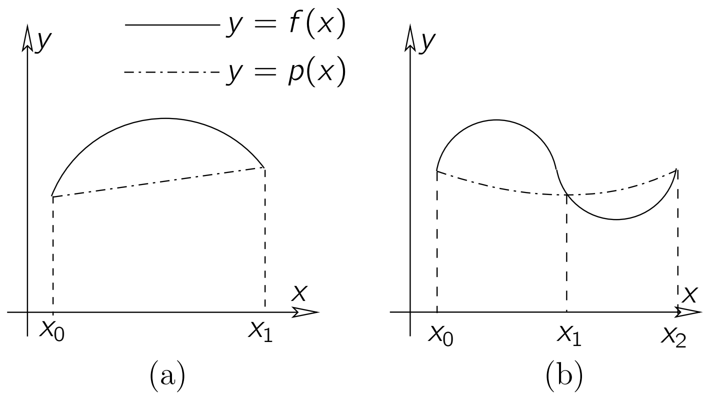

Figura 5.1: Aproximação de integral por trapézio e Simpson.

A Figura 5.1(a) mostra a área sob a curva aproximada pela área do trapézio e a Figura 5.1(b), a área sob a parábola que passa pelos pontos $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$ e $(x_2, f(x_2))$.

5.1.3 Fórmulas de Newton-Cotes para $n = 3$ e $n = 4$

- $n = 3$

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)\, l(x)\, dx = \left(\frac{3h}{8}\right)[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] \tag{5.5}$$

- $n = 4$

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)\, l(x)\, dx = \left(\frac{2h}{45}\right)[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)] \tag{5.6}$$

Exemplo 30. *Sabemos que*

$$\ln 2 = \int_1^2 \frac{1}{x}\, dx \cong 0.69314718.$$

Use as fórmulas de Newton-Cotes apresentadas (fórmulas (5.3), (5.4), (5.5) e (5.6)) para obter aproximações para $\ln 2$. *Calcule o erro absoluto de cada aproximação.*

5.2 Fórmulas Repetidas

Divida o intervalo de integração $[a, b]$ em n subintervalos de igual comprimento $h = \dfrac{(b-a)}{n}$. Sejam $x_0 = a$, $x_i = x_{i-1} + h$ e $x_n = b$. Podemos aplicar a regra dos trapézios para cada um dos subintervalos. Assim, lembrando que $x_i - x_{i-1} = h$, e as propriedades de integrais, temos:

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx + \int_{x_2}^{x_3} f(x)\,dx \ldots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\,dx \\
&\cong \left(\frac{h}{2}\right)\left[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\right].
\end{aligned}
\tag{5.7}
$$

Se optarmos por aplicar a fórmula de Simpson repetida, devemos repartir o intervalo num número par de subintervalos, uma vez que cada parábola requer três pontos de interpolação. Assim, se n é um número par:

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)\,dx + \ldots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)\,dx \\
&= \left(\frac{h}{3}\right)\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \ldots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right] \\
&= \frac{h}{3}\left\{f(x_0) + 4\left[f(x_1) + f(x_3) + \ldots f(x_{n-1})\right] + \right. \\
&\qquad \left. 2\left[f(x_2) + f(x_4) + \ldots + f(x_{n-2})\right] + f(x_n)\right\}
\end{aligned}
\tag{5.8}
$$

Exemplo 31. *Ainda calculando aproximações para* $\ln 2$*, aplique as fórmulas (5.7) e (5.8) no intervalo* $[1, 2]$ *e* $h = 0.25$*. Calcule o erro absoluto para cada aproximação.*

5.3 Erro nas Fórmulas de Newton-Cotes

Teorema 11. *(**Ímpar**) Se os pontos* $x_j = x_0 + jh$*,* $j = 0 : n$*, dividem* $[a, b]$ *(*$x_0 = a$ *e* $x_n = b$*) em um número **ímpar** de intervalos iguais e* $f(x)$ *tem derivada de ordem* $(n+1)$ *contínua em* $[a, b]$ *então a expressão do erro para as fórmulas de Newton-Cotes do tipo fechado, com n ímpar, é dada por:*

$$
R(f) = \frac{h^{n+2} f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_0^n u(u-1)\cdots(u-n)\,du
$$

para algum ponto $\xi \in [a, b]$.

Teorema 12. *(**Par**) Se os pontos* $x_j = x_0 + jh$*,* $j = 0 : n$*, dividem* $[a, b]$ *(*$x_0 = a$ *e* $x_n = b$*) em um número **par** de intervalos iguais e* $f(x)$ *tem derivada de ordem* $(n+2)$ *contínua em* $[a, b]$*, então a expressão do erro para as fórmuas de Newton-Cotes do tipo fechado, com n par, é dada por:*

$$
R(f) = \frac{h^{n+3} f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_0^n \left(u - \frac{n}{2}\right) u\,(u-1)\cdots(u-n)\,du
$$

para algum ponto $\xi \in [a, b]$.

5.3.1 Erro na Fórmula do Trapézio

Considere o intervalo $[x_0, x_1]$, ou seja, $n = 1$. Usando o Teorema 11, temos:

$$\begin{aligned} R(f) &= \frac{h^3 f''(\xi)}{2!}\int_0^1 [u(u-1)]\,du &&= \frac{h^3 f''(\xi)}{2!}\int_0^1 (u^2-u)\,du \\ &= \frac{h^3 f''(\xi)}{2!}\left[\frac{u^3}{3}-\frac{u^2}{2}\right]_0^1 &&= \frac{h^3 f''(\xi)}{2!}\left(-\frac{1}{6}\right) \\ &= -\frac{h^3 f''(\xi)}{12} \end{aligned}$$

Assim,

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx = \frac{2}{h}\left[f(x_0)+f(x_n)\right] - \frac{h^3}{12}f''(\xi),\ x_0 < \xi < x_1$$

O erro na fórmula do trapézio repetido é obtido adicionando-se N erros na fórmula $R(f)$ acima, onde $N = \dfrac{b-a}{h}$. Logo,

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx &= \left(\frac{h}{2}\right)\left[f(x_0)+2f(x_1)+2f(x_2)+\cdots+2f(x_{n-1})+f(x_n)\right] - \frac{Nh^3}{12}f''(\xi), \\ &= \left(\frac{h}{2}\right)\left[f(x_0)+2f(x_1)+2f(x_2)+\cdots+2f(x_{n-1})+f(x_n)\right] - \frac{(b-a)h^2}{12}f''(\xi),\ x_0 < \xi < x_n \end{aligned}$$

Note que o termo do erro **não** será, na prática, subtraído do resultado aproximado; assim nunca conseguiremos o resultado exato, pois o ponto ξ que fornece a igualdade é único, mas não há como determiná-lo. A aplicação da fórmula do termo do resto é útil quando queremos o resultado com precisão pré-fixada.

Exemplo 32. *Determinar o número de intervalos em que podemos dividir $[0, 1.2]$ para obter*

$$\int_0^{1.2} e^x \cos x\,dx$$

pela regra do trapézio com três casas decimais.

Solução: $R(f) = -\dfrac{Nh^3}{12}\max_{0\le t\le 1.2}|f''(t)|,\ x_0 < \xi < x_n$.

Calculando:

$$\begin{aligned} f'(t) &= e^t\cos t - e^t \operatorname{sen} t = e^t(\cos t - \operatorname{sen} t) \\ f''(t) &= e^t(\cos t - \operatorname{sen} t) + e^t(-\operatorname{sen} t - \cos t) = -2\,e^t \operatorname{sen} t \\ \therefore\ & \max_{0\le t\le 1.2}|f''(t)| = |f''(1.2)| = 2(3.320)(0.932) = 6.188 \end{aligned}$$

Na regra do trapézio: $h = \dfrac{b-a}{N} = \dfrac{1.2-0}{N} = \dfrac{1.2}{N}$.

Impondo $erro \le 0.5\times 10^{-3}$, *temos:*

$$R(f) \le \frac{1.2h^2}{12}(6.188) \le 0.0005 \Longrightarrow h^2 \le 0.0000808 \Longrightarrow h \le 0.02842$$

Observe que, devemos escolher o menor h que seja menor ou igual a 0.02842, mas que divida exatamente o intervalo $[0, 1.2]$. Assim, tomamos $h = 0.025$:

$$N = \frac{1.2}{0.025} \Longrightarrow N = 48$$

5.3.2 Erro na Fórmula de Simpson

Para obtermos o erro na fórmula de Simpson, sobre o intervalo $[x_0, x_2]$ fazemos $n = 2$ no Teorema 12. Assim:

$$\begin{aligned}
R(f) &= \frac{h^{2+3}f^{(2+2)}(\xi)}{(2+2)!}\int_0^2 \left(u - \frac{2}{2}\right) u(u-1)(u-2)\,du \\
&= \frac{h^5 f^{(IV)}(\xi)}{4!}\int_0^2 \left(u^4 - 4u^3 + 5u^2 - 2u\right)\,du \\
&= \frac{h^5 f^{(IV)}(\xi)}{4!}\left[\frac{u^5}{5} - u^4 + \frac{5u^3}{5} - u^2\right]_0^2 \\
&= \frac{h^5 f^{(IV)}(\xi)}{4!}\left(-\frac{4}{15}\right) = \frac{-h^5 f^{(IV)}(\xi)}{90}
\end{aligned}$$

Então, podemos escrever:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right] - \frac{h^5}{90}f^{(IV)}(\xi), \ x_o < \xi < x_2.$$

O erro na fórmula de Simpson Repetido é obtido adicionando-se N erros da fórmula acima, onde $N = \dfrac{b-a}{2h}$. Assim:

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx &= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots 2f(x_{2N-2}) + 4f(x_{2N-1}) + f(x_{2N})\right] - \frac{Nh^5}{90}f^{(IV)}(\xi), \\
\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx &= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots 2f(x_{2N-2}) + 4f(x_{2N-1}) + f(x_{2N})\right] - \frac{(b-a)h^4}{180}f^{(IV)}(\xi),
\end{aligned}$$

para $x_0 < \xi < x_n$.

Note que:

- Comparando as expressões de erro, vemos que a fórmula de Simpson repetido é da ordem de h^4 (em símbolos, $O(h^4)$), enquanto que a regra do trapézio repetido é $O(h^2)$. Assim, a regra de Simpson possui uma ordem de convergência maior, resultando em erros de aproximação menores para um mesmo h.
- Para obter o resultado da integral com uma determinada precisão, podemos utilizar a fórmula do erro impondo, em módulo, seja inferior a 0.5×10^{-k}, onde k é o número de casas decimais corretas que desejamos no resultado, e assim obter o número de intervalos necessários, ou ir aumentando o número de pontos e comparando dois resultados consecutivos até obter a precisão desejada. Na prática, é mais comum usarmos esta segunda possibilidade.

Exemplo 33. *Usando a Regra de Simpson Repetido, obter a integral do Exemplo 32, com duas casas decimais corretas.*

Solução: *Inicialmente, calculamos a integral usando 3 (três) pontos:*

$$I_3 = \int_0^{1.2} e^x \cos x\, dx = \frac{1}{3}h\left[f(0) + 4f(0.6) + f(1.2)\right] = \frac{0.6}{3}\left[1 + 4(1.503) + 1.202\right] = 1.6428$$

Agora calculamos a integral com 5 (cinco) pontos:

$$I_5 = \int_0^{1.2} e^x \cos x\, dx = \frac{0.3}{3}\left[f(0) + 4f(0.3) + 2f(0.6) + 4f(0.9) + f(1.2)\right] = 1.6464$$

Calculando o erro relativo:

$$ER = \frac{|I_5 - I_e|}{|I_5|} = \frac{|1.6464 - 1.6428|}{|1.6464|} = 0.0022 < 10^{-2}$$

Portanto, o valor da integral com duas casas decimal de precisão é 1.6464.

O Exemplo 33 ilustra o procedimento computacional a ser implementado. Logo, devemos tomar $h \to 0$, ou seja, devemos fazer $h = 0.1, 0.01, \ldots$ e ir comparando os resultados obtidos através do erro relativo, isto é, se

$$ER = \frac{|I_r - I_s|}{|I_r|} < \epsilon$$

onde I_r e I_s são dois resultados consectivos, e ϵ uma precisão pré-fixada, então paramos o processo.