Cálculo Numérico

Integração Numérica

UNESP - Universidade Estadual Paulista

São José do Rio Preto, SP.

O objetivo é obter boas aproximações para a integral definida I dada por

$$I = \int_a^b f(x)dx,$$

onde $f(x)$ é uma função contínua em $[a, b]$.

Sabemos que, se conhecemos a função primitiva de $f(x)$, isto é, se conhecemos a função $F(x)$ tal que $F'(x) = f(x)$, então

$$I = F(b) - F(a).$$

No entanto, pode não ser fácil expressar esta função primitiva usando uma expressão funcional simples.

Exemplo 1: Considere $f(x) = 2(x+1)e^{x^2+2x+3}$. Neste caso a função primitiva é $F(x) = e^{x^2+2x+3}$. Então,

$$\int_a^b 2(x+1)e^{x^2+2x+3}dx = \left[e^{x^2+2x+3}\right]_a^b.$$

Exemplo 2: Considere $f(x) = 1/(2x^2+6x+5)$. Neste caso, a função primitiva é $F(x) = \arctan(2x+3)$.

Exemplo 3: Agora considere a função simples, $f(x) = e^{-x^2}$. Não temos uma expressão analítica simples para expressar sua função primitiva.

Existe ainda, casos em que os valores de $f(x)$ são conhecidos apenas em pontos tabeladas num intervalo $[a, b]$.

Assim, para obter valor de $I = \int_a^b f(x)dx$ temos que utilizar métodos de integração numérica.

A ideia básica de integração numérica é a substituição da função $f(x)$ por um polinômio que a aproxime razoalmente no intervalo $[a, b]$ ou em subintervalos de $[a, b]$.

Assim, o problema fica resolvido pela integração de polinômios, o que é fácil de ser obtido.

Usando esta ideia, o objetivo geral é obter expressões da forma

$$I_n = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \ldots + A_n f(x_n) = \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j),$$

tal que I_n produz uma boa aproximação para I.

Aqui, $x_j \in [a, b]$, $j = 0, 1, \ldots, n$.

Como

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j),$$

o erro da integração numérica é dado por

$$E(f; x_0, ..., x_n) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j).$$

As fórmulas

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j) + E(f; x_0, ..., x_n)$$

são conhecidas como fórmulas de quadratura, onde
x_j são chamados de nós ou pontos da fórmula de quadratura,
A_j são chamados de pesos da fórmula de quadratura.

Para construir uma fórmula de quadratura

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j) + E(f; x_0, ..., x_n)$$

precisamos determinar ou escolher

- o valor de $n+1$ (número de pontos da fórmula de quadratura),
- $n+1$ pontos $x_j \in [a, b]$,
- $n+1$ pesos A_j.

Vamos estudar alguns tipos de fórmulas de quadratura.

Fórmulas de quadratura interpolatórias são fórmulas de quadratura construídas através do polinômio interpolador de $f(x)$ no pontos $x_0, x_1, \ldots, x_n$.

Lembramos que, pela forma de Lagrange, podemos escrever o polinômio interpolador como

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

onde

$$L_k(x) = \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)},$$

para $k = 0, 1, \ldots, n$. E,

$$f(x) = P_n(x) + E_n(x),$$

onde $E_n(x)$ é o erro da interpolação.

Para determinar um fórmula de quadratura interpolatória, tomamos

$$f(x) \simeq P_n(x)$$

logo

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx \simeq \int_a^b P_n(x)dx &= \int_a^b \sum_{k=0}^{n} L_k(x) f(x_k) dx \\ &= \sum_{k=0}^{n} \left(\int_a^b L_k(x)dx \right) f(x_k). \end{aligned}$$

Logo,

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

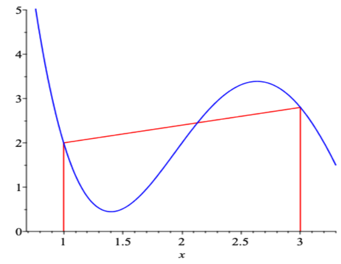
onde

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

Vamos agora estudar fórmulas de quadratura interpolatórias.

1) Regra dos Trapézios ($n = 1$): Neste caso $x_0 = a$ e $x_1 = b$ e o polinômio interpolador tem grau 1.

$$I = \int_a^b f(x)dx \simeq \int_a^b P_1(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} P_1(x)dx = I^T$$



Considere a integral $I = \int_a^b f(x)dx$.

Com escolha de $x_0 = a$ e $x_1 = b$, consideramos a aproximação de I por a integral $I^T = \int_a^b P_1(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} P_1(x)dx$, onde $P_1(x)$ é o polinômio interpolador de $f(x)$ nos pontos x_0 e x_1. Então,

$$\begin{aligned}
I \approx \int_{x_0}^{x_1} P_1(x)dx &= \int_{x_0}^{x_1} \left[\tfrac{x-x_1}{x_0-x_1} f(x_0) + \tfrac{x-x_0}{x_1-x_0} f(x_1)\right] dx \\
&= \tfrac{f(x_0)}{x_0-x_1} \int_{x_0}^{x_1} (x-x_1)dx + \tfrac{f(x_1)}{x_1-x_0} \int_{x_0}^{x_1} (x-x_0)dx \\
&= \tfrac{f(x_0)}{x_0-x_1} \left[\tfrac{1}{2}(x-x_1)^2\right]_{x_0}^{x_1} + \tfrac{f(x_1)}{x_1-x_0} \left[\tfrac{1}{2}(x-x_0)^2\right]_{x_0}^{x_1} \\
&= -\tfrac{f(x_0)}{x_0-x_1} \left[\tfrac{1}{2}(x_0-x_1)^2\right] + \tfrac{f(x_1)}{x_1-x_0} \left[\tfrac{1}{2}(x_1-x_0)^2\right] \\
&= \tfrac{x_1-x_0}{2} f(x_0) + \tfrac{x_1-x_0}{2} f(x_1).
\end{aligned}$$

Assim,

$$I^T = I^T(f; x_0, x_1) = \int_{x_0}^{x_1} P_1(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right],$$

onde $h = x_1 - x_0$.

Exemplo: Encontre uma aproximação para o valor de

$$\int_0^1 e^x dx$$

pela Regra dos Trapézios.

$$\begin{aligned} \int_0^1 e^x dx &\approx \frac{x_1 - x_0}{2}[f(x_0) + f(x_1)] \\ &= \frac{1-0}{2}\left[e^0 + e^1\right] = 1.8591409 \ . \end{aligned}$$

Neste caso podemos comparar com o valor exato, pois sabemos que

$$\int_0^1 e^x dx = e^x|_0^1 = e^1 - e^0 = 1.7182818 \ .$$

Erro = | 1.7182818 - 1.8591409 | = 0.1408591.

Como estimar o erro de maneira geral?

Da interpolação polinomial, supondo que $f''(x)$ é contínua em (x_0, x_1),

$$f(x) = P_1(x) + E_1(x) = P_1(x) + (x - x_0)(x - x_1)\frac{f''(\zeta_x)}{2},$$

onde $\zeta_x \in (x_0, x_1)$.

Assim, integrando ambos os lados no intervalo $[a, b] = [x_0, x_1]$, obtemos

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} P_1(x)dx + \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)\frac{f''(\zeta_x)}{2}dx,$$

ou seja,

$$I = I^T(f; x_0, x_1) + E^T(f; x_0, x_1),$$

onde

$$E^T = E^T(f; x_0, x_1) = \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{2}(x - x_0)(x - x_1)f''(\zeta_x)dx.$$

Como a função

$$g(x) = \frac{1}{2}(x - x_0)(x - x_1)$$

não muda de sinal em (x_0, x_1), na verdade é negativo em (x_0, x_1), obtemos

$$\int_{x_0}^{x_1} g(x)\,\mathfrak{M}\,dx \;\leq\; E^T = \int_{x_0}^{x_1} g(x) f''(\zeta_x) dx \;\leq\; \int_{x_0}^{x_1} g(x)\,\mathfrak{m}\,dx,$$

onde $\mathfrak{M} = \max\limits_{x \in (x_0, x_1)} f''(x)$ e $\mathfrak{m} = \min\limits_{x \in (x_0, x_1)} f''(x)$.

Isto é,

$$\mathfrak{M} \int_{x_0}^{x_1} g(x)\,dx \leq E^T \leq \mathfrak{m} \int_{x_0}^{x_1} g(x)\,dx.$$

Como $f''(x)$ é contínua em (x_0, x_1), existe $c_0 \in (x_0, x_1)$ tal que

$$E^T = f''(c_0) \int_{x_0}^{x_1} g(x)\,dx = f''(c_0) \frac{-(x_1 - x_0)^3}{12} = -\frac{h^3}{12} f''(c_0).$$

Então,

$$I = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right] \; - \; \frac{h^3}{12} f''(c_0).$$

De maneira geral consideramos que o erro

$$|E^T| = \left|\frac{h^3}{12} f''(c_0)\right| \leqslant \left|\frac{h^3}{12}\right| \max_{x \in (x_0, x_1)} |f''(x)|.$$

No exemplo,

$$\int_0^1 e^x dx = \frac{1-0}{2}\left[e^0 + e^1\right] = 1.8591409 \quad e \quad |Erro| = 0.1408591.$$

$$f''(x) = e^x, \quad \max_{x \in (0,1)} |e^x| = e^1 = 2.718281828, \quad h = 1 - 0 = 1,$$

$$|E^T(e^x, 0, 1)| \leqslant 2.718281828/12 = 0.2265234857$$

Observe que o erro

$$|E^T| = \left| \frac{h^3}{12} f''(c_0) \right|,$$

quando aproximamos $I = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$ por $I^T = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)]$, seria pequeno se $h = x_1 - x_0$ é pequeno.

Se o intervalo de integração $[a, b] = [x_0, x_1]$ é grande, a fórmula dos Trapézios nos fornece resultados que pouco têm a ver com o valor exato da integral.

O que podemos fazer neste caso?

Vamos considerar uma subdivisão do intervalo de integração, em intervalos igualmente espaçados

$$h = \frac{b-a}{n}$$

$$\begin{aligned} x_0 &= a \\ x_1 &= a + h \\ x_2 &= a + 2h \\ &\ldots\ldots \\ x_n &= a + nh = b \end{aligned}$$

Considerar uma subdivisão do intervalo de integração e aplicar a regra dos Trapézios repedidamente.

Com $h = (b-a)/n$ e $x_j = a + j * h,\ \ j = 0, 1, \dots, n,$ fazer

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \dots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx,$$
$$= \sum_{j=0}^{n-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx,$$

e aplicar a regra dos Trapézios em cada um dos subintervalos $[x_j, x_{j+1}]$.

Em outra palavra, substituir $\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx$ por

$$I^T(f; x_j, x_{j+1}) + E^T(f; x_j, x_{j+1}) = \frac{h}{2}[f(x_j) + f(x_{j+1})] - \frac{h^3}{12} f(c_j),$$

onde $c_j \in (x_j, x_{j+1})$.

Assim, obtemos

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= \sum_{j=0}^{n-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx, \\
&= \textstyle\sum_{j=0}^{n-1} \left\{ I^T(f; x_j, x_{j+1}) + E^T(f; x_j, x_{j+1}) \right\}, \\
&= \textstyle\sum_{j=0}^{n-1} \left\{ \frac{h}{2}[f(x_j) + f(x_{j+1})] - \frac{h^3}{12} f''(c_j) \right\} \\
&= \textstyle\frac{h}{2} \sum_{j=0}^{n-1} [f(x_j) + f(x_{j+1})] - \frac{h^3}{12} \sum_{j=0}^{n-1} f''(c_j).
\end{aligned}$$

Observe que a Regra dos Trapézios Repetida é

$$I_n^{TR} = \frac{h}{2} \sum_{j=0}^{n-1} [f(x_j) + f(x_{j+1})] = \frac{h}{2} \big[f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n) \big].$$

Além disso, podemos escrever o erro como

$$\frac{h^3}{12} \sum_{j=0}^{n-1} f''(c_j) = \frac{n \times h^3}{12} f''(c),$$

onde $c \in (x_0, x_n) = (a, b)$.

Em conclusão, obtemos

$$\int_a^b f(x)dx = I_n^{TR}(f; a, b) + E_n^{TR}(f; a, b),$$

onde

$$I_n^{TR}(f; a, b) = \frac{h}{2}\big[f(x_0) + 2f(x_1) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\big],$$

com $h = (b - a)/n$ e $x_j = a + j \times h$, $j = 0, 1, \ldots, n$, e

$$E_n^{TR}(f; a, b) = -n\frac{h^3}{12}f''(c) = -\frac{(b-a)}{12}h^2 f''(c),$$

com $c \in (x_0, x_n) = (a, b)$.

Observe que uma estimativa do erro pode ser dada por

$$|E_n^{TR}(f; a, b)| = \Big| - n\frac{h^3}{12}f''(c)\Big| \leq n\frac{h^3}{12}M_2,$$

onde $M_2 = \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$.

Seja $I = \int_0^1 e^x dx$.

a) Calcule uma aproximação para I usando 10 subintervalos e a regra dos Trapézios repetida. Estime o erro cometido, comparar com error exato.

$$f(x) = e^x, \qquad h = \frac{1-0}{10} = 0.1 \ .$$

Logo, $x_0 = 0, x_1 = 0.1,\ x_2 = 0.2,\ x_3 = 0.3, \ldots, x_9 = 0.9,\ x_{10} = 1.$

$$\begin{aligned}\int_0^1 e^x dx \approx I_{10}^{TR}(e^x; 0, 1) &= \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2[f(x_1) + \cdots + f(x_{n-1})] + f(x_n)\right] \\ &= \frac{0.1}{2}\left[e^0 + 2(e^{0.1} + \cdots + e^{0.9}) + e^1\right] \\ &= 1.719713491 \ .\end{aligned}$$

Valor exato

$$\int_0^1 e^x dx = e^x|_0^1 = e^1 - e^0 = 1.7182818, \quad |Erro| = 0.001431691.$$

Exemplo

Seja $I = \int_0^1 e^x dx$.

Estimativa do erro:

$$|E_n^{TR}(f; a, b)| = \left| -n\frac{h^3}{12} f''(c) \right| \leq n\frac{h^3}{12} M_2,$$

$f''(x) = e^x, \quad M_2 = \max_{x \in (0,1)} |e^x| = e^1 = 2.718281828, \quad h = (1-0)/10 = 0.1$

$$|E_{10}^T(e^x, 0, 1)| \leqslant 10\frac{(0.1)^3}{12} e^1 = 0.002265234857$$

Veja que
o $|Erro| = 0.001431691$ é menor do que a estimativa 0.002265234857.

Seja $I = \int_0^1 e^x dx$.

b) Qual o número mínimo de subdivisões de modo que o erro seja inferior a 10^{-3}.

Vamos impor que a estimativa do erro seja menor do que 10^{-3}, isto é,

$$|E_n^{TR}(f; a, b)| \leq n\frac{h^3}{12}M_2 < 10^{-3}$$

Precisamos determinar o valor de n e sabemos que $h = \frac{b-a}{n} = \frac{1-0}{n}$.
Novamente

$$f''(x) = e^x, \quad M_2 = \max_{x\in(0,1)} |e^x| = e^1.$$

Logo,

$$n\frac{(1/n)^3}{12}e < 10^{-3} \quad \Rightarrow \quad \frac{e}{12n^2} < 10^{-3} \quad \Rightarrow \quad n^2 > \frac{2.718281828}{12(10^{-3})}$$

$$n^2 > 226.5234857 \quad \Rightarrow \quad n > \sqrt{226.5234857} = 15.05069718.$$

Então, se $n = 16$, garantimos que o $|E_n^{TR}(f; a, b)| < 10^{-3}$.

Regra 1/3 de Simpson

Novamente, a integral $I = \int_a^b f(x)dx$. E aqui usamos $n = 2$, ou seja, os pontos x_0, x_1 e x_2.

Com $\;h = \dfrac{b-a}{2} = \dfrac{x_2 - x_0}{2}, \quad x_0 = a, \quad x_1 = x_0 + h, \quad x_2 = x_0 + 2h = b\;.$

Consideramos a aproximação de I por a integral
$I^S = \int_a^b P_2(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} P_2(x)dx$, onde $P_2(x)$ é o polinômio interpolador de $f(x)$ nos pontos x_0, x_1 e x_2.

Analogamente ao que foi feito na Regra dos Trapézios:

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_2} P_2(x)dx &= \int_{x_0}^{x_2} \left[L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2)\right] dx \\
&= f(x_0)\int_{x_0}^{x_2} L_0(x)dx + f(x_1)\int_{x_0}^{x_2} L_1(x)dx + f(x_2)\int_{x_0}^{x_2} L_2(x)dx \\
&= f(x_0)\tfrac{h}{3} + f(x_1)\tfrac{4h}{3} + f(x_2)\tfrac{h}{3} \\
&= \tfrac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right].
\end{aligned}$$

Assim, a Regra 1/3 de Simpson é dada por

$$I^S = I^S(f; x_0, x_1, x_2) = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right],$$

onde $h = \frac{x_2 - x_0}{2}$.

Exemplo: Pela Regra 1/3 de Simpson encontre uma aproximação para o valor de $\int_0^1 e^x dx$.

$$h = \frac{x_2 - x_0}{2} = \frac{1-0}{2} = 0.5 \Rightarrow x_0 = 0,\ x_1 = 0.5\ e\ x_2 = 1.$$

$$\begin{aligned} \int_0^1 e^x dx &\approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right] \\ &= \frac{0.5}{3}\left[e^0 + 4e^{0.5} + e^1\right] = 1.614263437\ . \end{aligned}$$

Lembre-se que $\int_0^1 e^x dx = e^x|_0^1 = e^1 - e^0 = 1.7182818$.

|Erro| = | 1.7182818 - 1.614263437 | = 0.104018363.

Temos

$$\int_a^b f(x)dx = I_{2n}^{SR}(f; a, b) + E_{2n}^{SR}(f, a, b),$$

onde

$$\begin{aligned} I_{2n}^{SR}(f; a, b) &= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n})\right], \\ &= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + f(x_{2n}) + 4\sum_{j=1}^{n} f(x_{2j-1}) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_{2j})\right] \end{aligned}$$

com $h = \dfrac{b-a}{2n}$ e $x_j = a + j \times h$, $j = 0, 1, \ldots, 2n$, e

$$E_{2n}^{SR}(f, a, b) = -n\frac{h^5}{90} f^{iv}(c),$$

com $c \in (x_0, x_{2n}) = (a, b)$.

Observação: O número de subintervalos é $= 2n$. (Sempre par.)

Observe que

$$|E_{2n}^{SR}(f,a,b)| = \left| -n\frac{h^5}{90}f^{iv}(c)\right| \leq n\frac{h^5}{90}M_4,$$

onde $M_4 = \max_{x\in[a,b]} |f^{iv}(x)|$ e $h = \dfrac{b-a}{2n}$

Exemplo

Seja $I = \int_0^1 e^x dx$.

a) Calcule uma aproximação para I usando 8 subintervalos e a regra $1/3$ de Simpson repetida. Estime o erro cometido, compara com error exato.

b) Qual o número mínimo de subdivisões de modo que o erro seja inferior a 10^{-4}.

Seja $I = \int_0^1 e^x dx$. a) Calcule uma aproximação para I usando 8 subintervalos e a regra 1/3 de Simpson repetida. Estime o erro cometido, comparar com error exato.

Como são 8 subintervalos, temos que $2n = 8$ e

$$h = \frac{x_8 - x_0}{8} = \frac{1-0}{8} = 0.125$$

$x_0 = 0,\quad x_1 = 0.125,\quad x_2 = 0.25,\quad x_3 = 0.375,\quad x_4 = 0.5,$
$x_5 = 0.625,\ x_6 = 0.75,\ x_7 = 0.875,\ x_8 = 1.$

$$\begin{aligned}\int_0^1 e^x dx &\approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \cdots + 4f(x_7) + f(x_8)\right] \\ &= \frac{0.125}{3}\Big[e^0 + 4(e^{0.125} + e^{0.375} + e^{0.625} + e^{0.875}) + 2(e^{0.25} + e^{0.5} + e^{0.75}) \\ &= +e^1\Big] = 1.718284155\end{aligned}$$

Erro $= |1.7182818 - 1.718284155| = 0.000002355 = 2.355 * 10^{-6}$.

Vamos estimar o erro cometido, usando a fórmula

$$|E_{2n}^{SR}(f, a, b)| = \left| -n\frac{h^5}{90} f^{iv}(c) \right| \leq n\frac{h^5}{90} \max_{x\in[a,b]} |f^{iv}(x)|,$$

Assim,

$$f(x) = e^x, \qquad f^{iv}(x) = e^x, \qquad \max_{x\in(0,1)} |e^x| = e^1.$$

e

$$|E_8^{SR}(e^x, 0, 1)| \leq 8\frac{(0.125)^5 e}{90} = 7.374 * 10^{-6}.$$

Observe que o erro é menor do que a estimativa do erro, como se espera.

Seja $I = \int_0^1 e^x dx$.

b) Qual o número mínimo de subdivisões de modo que o erro seja inferior a 10^{-4}?

Vamos impor que a estimativa do erro seja menor do que 10^{-4}, isto é,

$$|E_{2n}^{SR}(f, a, b)| =\leq n\frac{h^5}{90}M_4 < 10^{-4}$$

Precisamos determinar o valor de $2n$ e sabemos que $h = \frac{b-a}{2n} = \frac{1-0}{2n}$.

Novamente

$$f^{iv}(x) = e^x, \quad M_4 = \max_{x\in(0,1)} |e^x| = e^1.$$

Logo,

$$n\left(\frac{1}{2n}\right)^5 \frac{e}{90} < 10^{-4} \quad \Rightarrow \quad \frac{e}{2880n^4} < 10^{-4} \quad \Rightarrow \quad n^4 > \frac{2.718281828}{2880(10^{-4})}$$

$$n^4 > 9.438478569 \quad \Rightarrow \quad n > (9.438478569)^{1/4} = 1.752772289.$$

Se $n = 2$, com $2n = 4$ subintervalos, garantimos $|E_{2n}^{SR}(f, a, b)| < 10^{-3}$.