

# Capítulo 5

## Integração numérica

Neste capítulo iniciamos a aplicação da linguagem Python para implementar algoritmos numéricos que resolvem integrais. Abordaremos os seguintes métodos numéricos: método do retângulo, método do ponto central, método trapezoidal, método de Simpson e o método de Monte Carlos.

### 5.1 Métodos de Integração Numérica

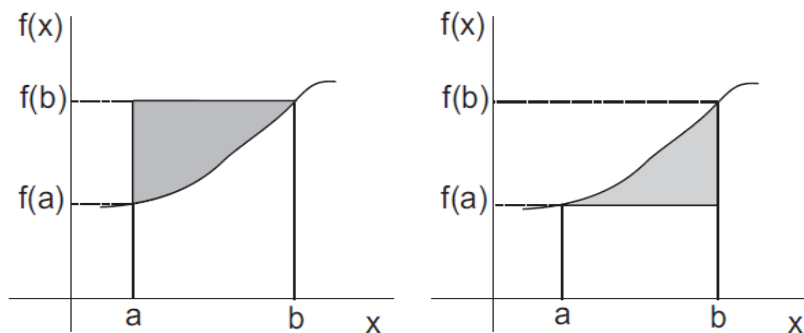
Existem vários métodos de Integração numérica. Estes métodos têm na estrutura de sua definição a ideia básica de interpretação geométrica da integral analítica a qual representa a área sob a curva no intervalo considerado. O método mais simples consiste em dividir o intervalo em espaços iguais, gerando pequenos retângulos. A ideia é então somar a área de todos os retângulos gerados, assim a soma dessas áreas irá se aproximar da área analítica quanto menor for o espaçamento entre os retângulos. Numa função qualquer, a ideia do retângulo pode superestimar o valor da área da função, quando o retângulo passa por cima da função, ou pode subestimar, quando o retângulo passa por baixo da função (ver Figura 5.1). Neste livro vamos abordar os seguintes métodos numéricos, cada um com implementações que visam eliminar o erro por superestimação ou subestimação.

- Método do retângulo

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

- Método do ponto central

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx h \sum_{i=1}^N f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$



**Figura 5.1** – Área do retângulo acima da curva:  $(b-a)f(b)$  superestimando a área (figura à esquerda). Área retângulo abaixo da curva  $(b-a)f(a)$  subestimando a área. A parte hachurada representa o quanto da área é superestimada ou subestimada, respectivamente, com a aproximação retangular.

- Método trapezoidal simples

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{[f(a) + f(b)]}{2}(b-a)$$

- Método trapezoidal composto

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(a) + f(b)] + h \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

- Método de Simpson 1/3

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3} \left[ f(a) + 4 \sum_i^N f\left(x + \frac{h}{2}\right) + f(b) \right]$$

- Método de Simpson 1/3 composto

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3} \left[ f(a) + 4 \sum_{i=1}^{n/2} f(a + (2i-1)h) + 2 \sum_{i=1}^{n/2-1} f(a + 2ih) + f(b) \right]$$

O número de subintervalo ( $n$ ) no intervalo  $[a, b]$  deve ser um número par.

### 5.1.1 O método do Retângulo

Como o nome indica, o método consiste em aproximar a área embaixo da curva, ou seja, a integral no intervalo, pela área do retângulo formado pela largura do intervalo e o valor da função, considerada constante durante todo o intervalo, sendo assim a altura do retângulo. Considere a integral no intervalo  $[a, b]$ , a integral aproximada da função  $f(x)$  neste intervalo é dada por:

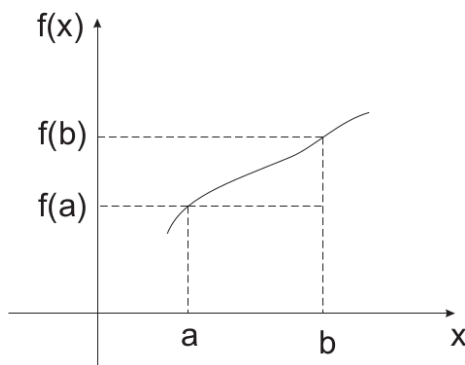
$$I(f) = \int_a^b f(a)dx \approx f(a)(b-a) = hf(a)$$

onde  $h = b-a$  é o espaçamento ou subintervalo discreto que separa os pontos **a** e **b**, ver Figura 5.2. Podemos considerar ainda o valor da função no ponto final **b**, a integral é então calculada por:

$$I(f) = \int_a^b f(b)dx \approx f(b)(b-a) = hf(b)$$

No primeiro caso, utilizando-se o valor da função no primeiro ponto **f(a)** temos que o valor da área sob a curva é subestimado, pois, a área do retângulo formado é menor que o valor da área que queremos. No segundo caso, utilizando-se o valor da função no segundo ponto **f(b)** o valor da área é superestimado, pois, neste caso a área do retângulo é maior que a área abaixo da curva. Você logo teria uma solução razoável, utilizar o valor médio da função entre  $a$  e  $b$ , ou seja,  $f((a+b)/2)$ , esta solução é feita no método do ponto central, dado pela equação:

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx h \sum_{i=1}^N f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$



**Figura 5.2** – Método do retângulo, a aproximação considera a área embaixo da curva dada pela área do retângulo de largura  $(b - a)$  e altura  $f(a)$  ou  $f(b)$ .

### 5.1.2 O método do trapézio

Vamos considerar o cálculo da integral

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

O método considera o uso de  $f(x)$  em valores de  $x$  igualmente espaçados, passo  $h$ . São utilizados  $N$  pontos  $x_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) no intervalo  $[a, b]$ , incluindo os pontos extremos, ou seja, há  $N - 1$  intervalos de largura  $h$ .

$$h = \frac{b - a}{N - 1}$$

$$x_i = a + (i - 1)h, \quad i = 1, \dots, N.$$

Como começamos nossa contagem de 1, o método considera **um número ímpar de pontos  $N$** . Na sequência, vamos utilizar a notação simplificada  $f_i = f(x_i)$ .

A ideia básica é considerar a aproximação da curva em cada intervalo como a área de um trapézio de largura  $h$ . A área de um único trapézio é

$$A = \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)(f_{i+1} + f_i) = \frac{h(f_{i+1} + f_i)}{2}$$

A integral no intervalo é dada pela soma das áreas dos trapézios,

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_1 + A_2 + \dots + A_{N-1}.$$

Para pontos igualmente espaçados, a equação geral da integral será

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2} f_1 + hf_2 + hf_3 + \dots + hf_{N-1} + \frac{h}{2} f_N.$$

Note que como cada ponto no intervalo é contado duas vezes, eles possuem um peso  $h$ , enquanto os pontos extremos são contados uma única vez, eles têm peso  $h/2$ .

O método pode então ser escrito na forma simplificada e sucinta como:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f_1 + f_N) + h \sum_{i=2}^{N-1} f_i.$$

onde  $f_1 = f(a)$  e  $f_N = f(b)$ , ou seja, os valores extremos da função no intervalo.

Lembrando mais uma vez que  $N$  deve ser um valor ímpar. O valor de  $f_i$  é calculado para os pontos  $x_i = a + (i - 1)h$ , onde  $i$  varia de  $i = 2$  a  $i = N-1$ .

Esta integral também pode ser reescrita para integração numérica na seguinte forma alternativa:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) + h \sum_{i=2}^{N-1} f_i.$$

Sendo agora  $a = a + ih$  de tal forma que  $f_i = f(a + ih)$ , e o valor de  $i = 1, 2, \dots, N-1$ . As duas formas são equivalentes, sendo apenas escritas de forma diferente na recorrência.

**Exemplo:** Calcular o valor numérico da integral da função:  $(3/2 \sin^3(x))$ . O valor desta integral pode ser determinado analiticamente tendo um valor igual a 2. Queremos determinar numericamente:

$$\int_0^{\pi} \frac{3}{2} \sin^3(x) dx$$

**Solução:** Vamos utilizar o método do trapézio composto para solucionar este problema. O algoritmo básico é dado a seguir:

1. Definir a função a ser integrada  $f(x)$
2. Entrar com os limites da integração  $a$  e  $b$
3. Entrar com o número ímpar de pontos  $N$
4. Definir a função trapézio (valor inicial, valor final,  $N$ )  
Início da função

Calcular o valor do passo

$$h = \frac{b-a}{N-1}$$

Calcular

$$soma = (f(a) + f(b)) / 2$$

Faça para  $i = 2$  até  $i = N-1$

$$soma = soma + f(a+(i-1)h)$$

Retornar o valor da soma

Fim da função

5. Imprimir o valor retornado da função trapézio.

O algoritmo anterior é implementado no programa `integra_trapezio.py` a seguir.

```
#integra_trapezio.py
'''Metodo do trapezio para integração
Programador: Elinei Santos
Data da ultima revisão:03/09/2017'''
from numpy import *
def funcao(x):
    return (3./2)*pow(sin(x),3.0)
def trapezio(a, b, N):
    h = (b-a)/(N-1) #passo da integração
```

```

soma = (funcao(a)+funcao(b))/2 # valores extremos da funcao
for i in range(2, N-1):
    soma += funcao(a+(i-1)*h)
return h*soma
a = 0.
b = pi
N = 1201 #numero impar de pontos
print(trapezio(a,b,N))

```

Podemos verificar a dependência da aproximação numérica com o argumento do valor do número de subintervalos  $N$ . Reutilizamos o programa anterior e implementamos o programa `trapezioerro.py` que chama a função trapézio em um laço for variando o número de intervalos  $N$ .

```

#trapezio_erro.py
'''Determina o erro no metodo do trapezio para integração
Programador: Elinei Santos
Data da ultima revisão:03/09/2017'''
from numpy import *
def funcao(x):
    return (3./2)*pow(sin(x),3.0)
def trapezio(a, b, N):
    h = (b-a)/(N-1) #passo da integração
    soma = (funcao(a)+funcao(b))/2 # valores extremos da funcao
    for i in range(2, N-1):
        soma += funcao(a+(i-1)*h)
    return h*soma
a = 0.
b = pi
for N in 5, 11, 51, 101, 501, 1001: #Numeros impar de pontos
    aprox = trapezio(a, b, N)
    print('N = %3d, valor_aprox = %18.15f, erro = %9.2E `%\n'
          (N, aprox, 2-aprox))

```

O programa `trapezio_erro.py` gera o seguinte resultado:

```
N = 5, valor_aprox = 1.594617520548519, erro = 4.05E-01
N = 11, valor_aprox = 1.986343825027498, erro = 1.37E-02
N = 51, valor_aprox = 1.999977057928317, erro = 2.29E-05
N = 101, valor_aprox = 1.999998563942519, erro = 1.44E-06
N = 501, valor_aprox = 1.99999997701192, erro = 2.30E-09
N = 1001, valor_aprox = 1.99999999856323, erro = 1.44E-10
```

podemos notar que a aproximação melhora e o erro diminui à medida que o valor de  $N$  aumenta.

Exemplo: Uma partícula de massa  $m = 0,5\text{kg}$  iniciando seu movimento com uma velocidade inicial de  $2\text{m/s}$  e submetida a uma força dada por:

$$F(t) = F_0 e^{-\gamma t} \cos(\omega t + \theta)$$

em que  $F_0 = 1.0\text{ N}$  é a amplitude da força,  $\theta = \pi/6$  é o ângulo de fase,  $\omega = 1,2\text{rad/s}$  é a frequência angular e  $\gamma = 0,2$  é um fator de amortecimento. A velocidade da partícula em um intervalo de tempo pode ser determinada a partir da integral:

$$v = v_0 + \frac{F_0}{m} \int_0^t e^{-\gamma t} \cos(\omega t + \theta) dt$$

Utilizando o método do trapézio para resolver integrais numericamente determine 20 valores da velocidade entre os tempos  $t = 0$  e  $t = 20\text{ s}$ . Faça um gráfico  $t \times v$ .

Solução: uma vez implementado o método numérico, só temos que utilizá-lo para calcular a integral. Vamos dividir o tempo de  $20\text{s}$  em 40 valores começando de  $t = 0$  e acrescentando  $0,5\text{s}$  cada vez que realizarmos a integração. Ou seja, criamos um processo de recorrência onde cada nova velocidade depende do cálculo numérico da velocidade anterior:

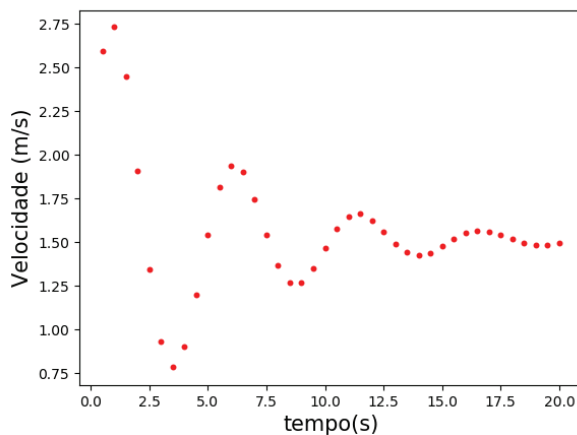
$$v_{i+1} = v_i + \frac{F_0}{m} \int_{t_i}^{t_{i+1}} e^{-\gamma t} \cos(\omega t + \theta) dt$$



o intervalo de integração será feito em  $t_{i+1}-t_i=0,5\text{s}$  com  $N = 11$  passos. Utilizamos poucos passos, pois o intervalo de tempo é pequeno para cada integração. O programa *velocidade\_trapezio.py* implementa esta ideia. No gráfico mostrado na Figura 5.3 mostramos o comportamento da velocidade calculada numericamente em cada tempo.

```
#velocidade_trapezio.py
'''Metodo do trapezio para integração
Programador: Elinei Santos
Data da ultima revisão:03/09/2017'''
from numpy import *
import matplotlib.pyplot as plt
def funcao(t):
    return ((1./0.5)*exp(-0.2*t)*cos(1.2*t+pi/6))
def trapezio(a, b, N):
    h = (b-a)/(N-1) #passo da integração
    soma = (funcao(a)+funcao(b))/2 # valores extremos da funcao
    for i in range(2, N-1):
        soma += funcao(a+(i-1)*h)
    return h*soma
a = 0.
b = pi
N = 11 #numero impar de pontos
van = 2.0
tan = 0.
for i in arange(40):
    t = tan +0.5
    v = van + trapezio(tan,t,N)
    print(v)
    van = v
    tan = t
    print(t)
plt.scatter(t,v, color='r',s=10)
```

```
plt.xlabel('tempo(s)', fontsize=15)
plt.ylabel('Velocidade (m/s)', fontsize=15)
plt.show()
```



**Figura 5.3** – Velocidade em função do tempo para uma partícula com força dependente do tempo. Cálculo da integral pelo método do trapézio.

### 5.1.3 Cálculo do período do pêndulo simples para grandes amplitudes

Quando linearizamos a equação do pêndulo simples, o que implica que sua análise só vale para pequenas oscilações, mostramos que o mesmo tem movimento periódico com períodos dado por:

$$T_0 = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}},$$

onde  $l$  é o comprimento do pêndulo e  $g$  a aceleração da gravidade.

Queremos, no entanto, determinar o período do pêndulo simples considerando grandes oscilações. Neste caso, não podemos linearizar a equação de movimento e lançamos mão do método da conservação da energia mecânica (Energia cinética  $K$  mais a energia potencial  $V$ ), dada por:

$$E = K + V = \frac{1}{2} I \dot{\theta}^2 - mgl \cos \theta = \frac{1}{2} ml^2 \dot{\theta}^2 - mgl \cos \theta,$$

onde  $m$  é a massa do pêndulo. Vamos considerar que iniciamos o movimento do pêndulo a partir de um ângulo inicial máximo  $\theta_m$ . Sendo a energia mecânica conservada, temos então

$$\frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}^2 - mgl\cos\theta = -mgl\cos\theta_m,$$

onde  $\theta_m$  é o ângulo máximo. Explicitando o valor da velocidade angular  $w$ , temos

$$\omega^2 = \frac{2g}{l}(\cos\theta - \cos\theta_m),$$

Sendo  $\omega = d\theta/dt$ , temos

$$\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2 = \frac{2g}{l}(\cos\theta - \cos\theta_m).$$

Isolando o diferencial do tempo,

$$dt = \frac{d\theta}{\sqrt{\frac{2g}{l}(\cos\theta - \cos\theta_m)}}.$$

Para determinar o período do movimento, devemos integrar a equação em  $dt$ . Por simetria, podemos integrar de 0 a  $\theta_m$  e multiplicar por quatro, pois, num período completo o pêndulo oscila de  $\theta = \theta_m$  a  $\theta = -\theta_m$  e retorna a  $\theta = \theta_m$ .

### Período do pêndulo simples

$$T = 4\sqrt{\frac{1}{2g}} \int_0^{\theta_m} \frac{d\theta}{\sqrt{\cos\theta - \cos\theta_m}}.$$

Utilizamos a identidade trigonométrica:  $\cos 2q = 1 - 2\sin^2 q$ , podemos reescrever a equação, obtendo

$$T = 2\sqrt{\frac{1}{g}} \int_0^{\theta_m} \frac{d\theta}{\sqrt{\sin^2(\theta_m/2) - \sin^2(\theta/2)}}.$$

Fazendo a mudança de variável:

$$\text{senz} = \frac{\sin(\theta/2)}{\sin(\theta_m/2)}, \quad x = \sin(\theta_m/2); \quad \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = x \text{senz}$$

Temos então:

$$\cos z dz = \frac{\cos(\theta/2)}{2\sin(\theta_m/2)} d\theta = \frac{\sqrt{1-x^2 \text{senz}^2}}{2x} d\theta.$$

Inserindo essas variáveis na equação do período, obtemos:

$$T = 2\sqrt{\frac{l}{g}} \int_0^{\theta_m} \frac{d\theta}{\sqrt{\sin^2(\theta_m/2) - \sin^2(\theta/2)}} = 2\sqrt{\frac{l}{g}} \int_0^{\theta_m} \frac{2x \cos z dz}{\sqrt{1-x^2 \text{senz}^2}} \frac{1}{\sqrt{x^2 - x^2 \text{senz}^2}}$$

Simplificando, temos:

$$T = 4\sqrt{\frac{l}{g}} \int_0^{\theta_m} \frac{dz}{\sqrt{1-x^2 \text{senz}^2}}.$$

Para uma oscilação do pêndulo fazendo  $180^\circ$  ( $\theta_m = \pi/2$ ) podemos reescrever o período em função da integral elíptica de primeira espécie, dada por:

$$K(x) = \int_0^{\pi/2} \frac{dz}{\sqrt{1-x^2 \text{senz}^2}} \quad (5.1)$$

o período do pêndulo pode ser escrito como

$$T = 4\sqrt{\frac{l}{g}} K(x) \quad \text{ou} \quad T = \frac{2T_0}{\pi} K(x)$$

Temos que integrar numericamente a Integral 5.1, onde  $x = \sin(\theta_m/2)$ . O programa `período_trapezio.py` determina o período para um ângulo máximo de  $90^\circ$  graus utilizando o método do trapézio.

```
#período_trapezio.py
'''Calculo do periodo do pendulo com integracao numerica
da integral eliptica peo método do trapézio
Programador: Elinei Santos
```

```

Data da ultima revisão:03/09/2017'''
from numpy import *
a = 0.
b = pi/2.
l = 1.0
g = 9.8
N = 1701 #numero impar de pontos
def eliptica(z,te =b/2.):
    x = sin(te)
    return 1./sqrt(1-(x*sin(z))**2)
def trapezio(a, b, N):
    h = (b-a)/(N-1) #passo da integração
    soma = (eliptica(a)+eliptica(b))/2 # valores extremos da funcao
    for i in range(2, N-1):
        soma += eliptica(a+(i-1)*h)
    return h*soma
periodo =4.* sqrt(l/g)*trapezio(a,b,N)
print('O periodo do pendulo e = %.4f s\n' %periodo)

```

Para um pêndulo de comprimento  $L = 1,0$  m, temos que o programa fornece:

O periodo do pendulo e = 2.3674 s

### Método de Simpson composto

Vamos implementar o método de Simpson, também denominado método de Simpson 1/3 composto. Consideramos os subintervalos igualmente espaçados e o número de subintervalos dentro do domínio de integração  $[a, b]$  deve ser um número par. O método é reescrito a seguir:

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3} \left[ f(a) + 4 \sum_{i=1}^{n/2} f(a + (2i-1)h) + 2 \sum_{i=1}^{n/2-1} f(a + 2ih) + f(b) \right]$$

Este método é implementado em Python no programa `integra_Simpson.py` a seguir.

**Exemplo:** A fórmula de Debye para a determinação do calor específico de um sólido é dada por:

$$C_V = 9Nk_B \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx,$$

onde  $N$  é o número de átomos,  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $\theta_D$  é a temperatura de Debye. Faça um programa em Python que imprima uma tabela com 20 valores de temperatura  $T$  começando em  $T=0^0$  aumentando de vinte em vinte graus e os valores de  $C_V/3Nk_B$  para o cobre ( $\theta_D = 309$  K). Em seguida, faça um gráfico de  $C_V/3Nk_B$  por  $T/\theta_D$  para estes 20 valores calculados. Utilize o método de Simpson para o cálculo numérico da integral. O programa `integra_Simpson.py` a seguir implementa o método de Simpson para resolver este problema. Na Figura 5.4 mostramos o resultado gerado pelo programa.

Nota: Vale destacar nos dois programas a seguir nos comandos `for`, por exemplo: `for i in range(1, int(n/2)+1)`, nós fazemos a conversão explícita para inteiro da divisão de  $n/2$ , esta é uma diferença crucial entre Python 3 e Python 2, pois na versão atual Python 3 a divisão de dois inteiros resulta sempre num número de ponto flutuante. Assim, se não fizéssemos esta conversão explícita o Python acusaria erro, uma vez que o comando `range` exige um intervalo de números inteiros, não números em ponto flutuante que resultaria de  $n/2$ .

```
#integra_Simpson.py
'''Programa que determina o calor especifico de um solido
pela formula de Debye. O calculo da integral é feito pelo
método de Simpson composto
Programador: Elinei Santos
Ultima revisão: 06/09/2017'''
from numpy import *
import matplotlib.pyplot as plt
def g(x):
```

```

        return x**4*exp(x)/(exp(x)-1.)**2
def integra_Simpson(f, a, b, n= 300):
    h = (b-a)/float(n)
    soma1 = 0
    for i in range(1, int(n/2)+1):
        soma1 += f(a + (2*i-1)*h)
    soma2 = 0
    for i in range(1, int(n/2)):
        soma2 += f(a + 2*i*h)
    somageral = (b-a)/(3.*n)*(f(a)+f(b)+4.*soma1+2.*soma2)
    return somageral
a =0.001 #valor nao nulo para nao gerar indeterminacao
b =309
Td =309.
T=1
for k in range(1,21):
    b =309./T
    Cv = 3.*((T/309.)**3)*integra_Simpson(g,a,b)
    print('T = %.2f K Cv/3Nk = %.3f ' %(T/Td,Cv))
    plt.scatter(T/Td,Cv, color='black')
    T +=20.

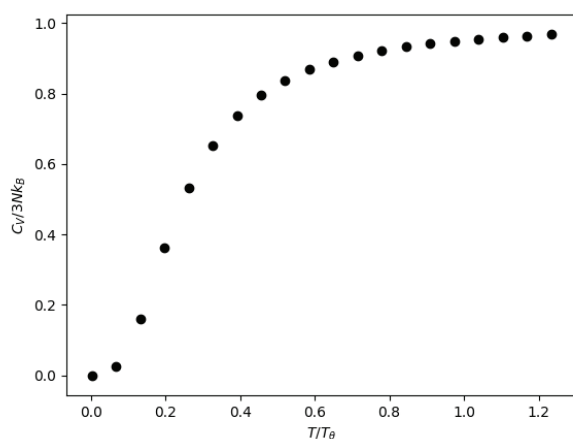
plt.xlabel(r'$T/T_{\theta}$')
plt.ylabel(r'$C_V/3Nk_B$')
plt.show()
A Tabela e o gráfico (Figura 5.4) são mostrados na sequência.
T = 0.00 K Cv/3Nk = 0.000
T = 0.07 K Cv/3Nk = 0.024
T = 0.13 K Cv/3Nk = 0.160
T = 0.20 K Cv/3Nk = 0.361
T = 0.26 K Cv/3Nk = 0.531
T = 0.33 K Cv/3Nk = 0.653
T = 0.39 K Cv/3Nk = 0.737
T = 0.46 K Cv/3Nk = 0.796
T = 0.52 K Cv/3Nk = 0.838

```

```

T = 0.59 K Cv/3Nk = 0.868
T = 0.65 K Cv/3Nk = 0.891
T = 0.72 K Cv/3Nk = 0.909
T = 0.78 K Cv/3Nk = 0.922
T = 0.84 K Cv/3Nk = 0.933
T = 0.91 K Cv/3Nk = 0.942
T = 0.97 K Cv/3Nk = 0.949
T = 1.04 K Cv/3Nk = 0.955
T = 1.10 K Cv/3Nk = 0.960
T = 1.17 K Cv/3Nk = 0.964
T = 1.23 K Cv/3Nk = 0.968

```



**Figura 5.4** – Calor específico do cobre em função da temperatura ( $T/T_0$ ). Integral calculada pelo método de Simpson composto.

Exemplo: A espiral de Euler, espiral de Cornu ou clotoide é encontrada na teoria de difração de Fresnel e é gerada a partir da curva paramétrica formada a partir do cálculo das seguintes integrais:

$$S(w) = \int_0^w \sin\left(\frac{\pi x^2}{2}\right) dx$$

$$C(w) = \int_0^w \cos\left(\frac{\pi x^2}{2}\right) dx$$



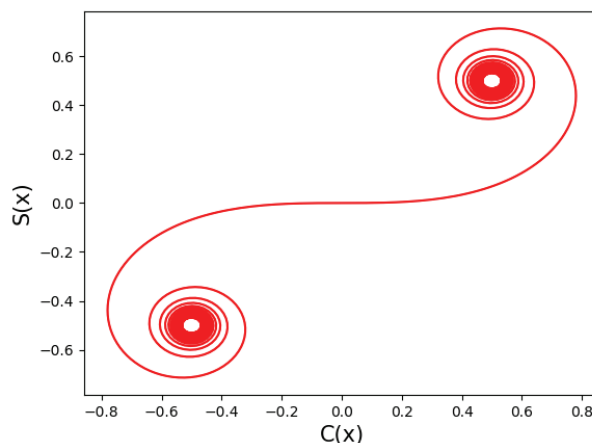
Vamos utilizar o método de Simpson para calcular estas integrais e gerar a espiral de  $C(w)$  versus  $S(w)$  no intervalo de  $-10 < w < 10$ . O programa `integra_fresnel.py` calcula estas integrais e gera o gráfico da espiral mostrado na Figura 5.5

```
#integra_fresnel.py
'''Programa que determina a espiral de Euler ou de Cornu
O calculo da integral é feito pelo
método de Simpson composto
Programador: Elinei Santos
Ultima revisão: 06/09/2017'''
from numpy import *
import matplotlib.pyplot as plt
def c(x):
    return cos(0.5*pi*x**2)
def s(x):
    return sin(0.5*pi*x**2)
def integra_Simpson(f, a, b, n= 400): #n - numero para de pontos
    h = (b-a)/float(n)
    soma1 = 0
    for i in range(1, int(n/2)+1):
        soma1 += f(a + (2*i-1)*h)
    soma2 = 0
    for i in range(1, int(n/2)):
        soma2 += f(a + 2*i*h)
    somageral = (b-a)/(3.*n)*(f(a)+f(b)+4.*soma1+2.*soma2)
    return somageral
a =0.0 #valor inicial da integral
b =-10.
N = 1000
dx = fabs(2*b)/N
cx = []
sy = []
for k in range(1,N):
    C =integra_Simpson(c,a,b)#usa o valor default n=400 do metodo
```

```

S = integra_Simpson(s,a,b)
cx.append(C)
sy.append(S)
#plt.scatter(S,C,color='black',s=2) #para pontos individuais
calculados
b += dx
plt.plot(cx,sy,'r')
plt.xlabel('C(x)', fontsize=15)
plt.ylabel('S(x)', fontsize=15)
plt.show()

```



**Figura 5.5** – Clotoide ou espiral de Euler. Cálculo das integrais pelo método de Simpson.

## 5.2 Integral utilizando o método de Monte Carlo

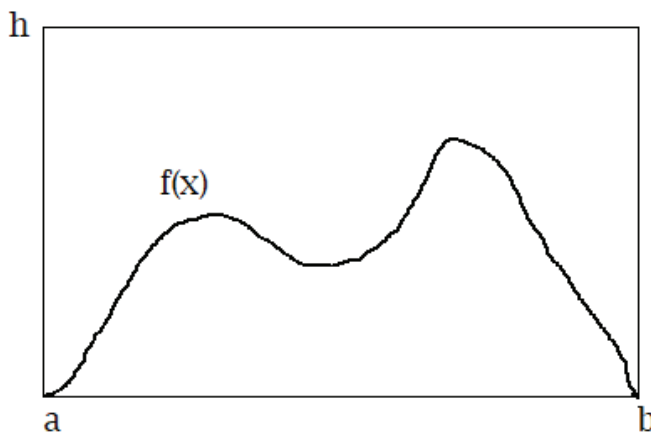
### 5.2.1 Método de Monte Carlo para uma dimensão

Considere uma região retangular de altura  $h$  e largura  $(b-a)$ , conforme a Figura 5.6 a seguir. Esta região é separada por uma função contínua  $f(x)$ . Vamos supor que geremos  $N$  pares de números aleatórios  $(x_i, y_i)$ , onde os valores de  $x_i$  devem estar no intervalo  $[a, b]$  ou seja:  $a \leq x_i \leq b$  e  $y_i$  deve estar no intervalo  $[0, h]$  ( $0 \leq y_i \leq h$ ). A fração  $n$  dos pontos  $(x_i, y_i)$  que satisfazem a relação:  $y_i \leq f(x_i)$  é uma estimativa da área abaixo de curva  $f(x)$  (ou seja a integral de  $f(x)$ ) em relação a região da área retangular. Em outras palavras,

a área estimada abaixo de  $f(x)$  é dada por:

$$E_n = \frac{n}{N} A,$$

Onde  $N$  é o número de pontos aleatórios total,  $n$  é o número de pontos que estão debaixo da curva  $f(x)$  e  $A$  é a área da região retangular ( $h(b-a)$ ). Um outro exemplo: imagine que isto fosse uma figura de tiro ao alvo que você atirasse  $N$  balas e contasse quantas balas  $n$  atingem a figura abaixo da curva  $f(x)$ . A área abaixo da curva é aproximadamente a fração de balas ( $n/N$ ) que atingem a figura abaixo de  $f(x)$  multiplicada pela área da figura  $A$ . Esta é a ideia central do método de Monte Carlo.



**Figura 5.6** – Integral de  $f(x)$  é igual a área embaixo da curva  $f(x)$ .

Formalmente o método de Monte Carlo para integração numérica é baseado no Teorema do valor médio do cálculo elementar:

$$I = \int_a^b f(x)dx = (b-a)\langle f \rangle$$

O teorema diz que a integral de uma função contínua  $f(x)$  entre o intervalo  $[a, b]$  (igual a área abaixo da curva) é igual ao intervalo  $(b-a)$  multiplicado pelo valor médio da função neste intervalo. O método de Monte Carlo escolhe a sequência de  $x_i$  de  $N$  números uniformemente aleatórios ao invés de intervalos regulares. Assim, nós determinamos a média amostral no intervalo para esses pontos:

$$\langle f \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

Obtemos assim a regra para a integração numérica do método:

$$I = \int_a^b f(x)dx = (b-a) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = (b-a) \langle f \rangle.$$

Onde  $x_i$  são números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo:  $a \leq x_i \leq b$  e  $N$  é o número total de tentativas. Vale lembrar que para funções em uma dimensão os métodos anteriores são mais precisos e mais rápidos. No método de Monte Carlo para uma dimensão o erro diminui com  $N^{-1/2}$ , não é melhor que os métodos anteriores. No entanto para dimensões maiores, o método de Monte Carlo é muito mais preciso que os outros métodos.

Exemplo: Utilizando o método de integração de Monte Carlo elaborar um programa em Python que calcule a integral:

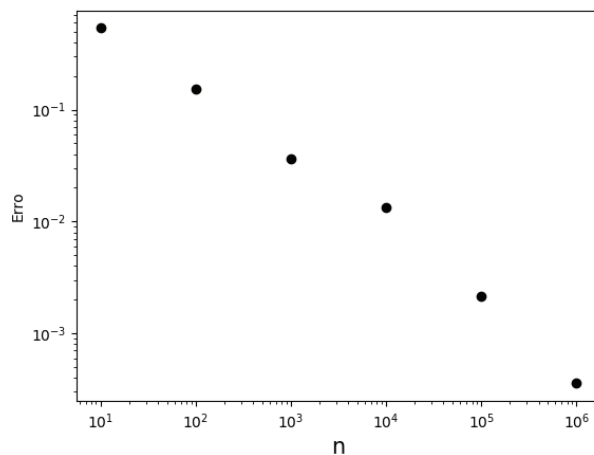
$$I = 4 \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx.$$

Esta integral tem o valor exato igual ao valor de  $\pi$ . Calcule o valor absoluto da diferença entre o valor da integral e o valor de  $\pi$ , ou seja, o erro. Faça o cálculo para 6 valores de  $n$ , começando com  $n = 10$  e indo até  $10^6$ . Em seguida faça um gráfico  $\log x \log$  do erro em função do valor de  $n$ .

Solução: Uma possível implementação deste programa é listado a seguir no programa: *integ\_montecarlo1D.py*. Na sequência, mostramos na Figura 5.7 o gráfico do erro em função do valor de  $n$ , é possível notar que a dependência do erro cai com  $n^{-1/2}$ .

```
#integ_montecarlo1D.py
'''Metodo de Monte Carlo para o calculo de integrais
em uma dimensao
Prog: Elinei Santos
Data da ultima revisao: 11/09/2017'''
import random
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from math import sqrt, pi, fabs
```

```
def g(x):
    return sqrt(1.-x**2)
def MCarlo(f, a, b, n):
    soma = 0.
    for i in xrange(n):
        xi = random.uniform(a,b)
        soma += f(xi)
    Integ = (float(b-a)/n)*soma
    return Integ
nc = np.zeros(1000)
E = np.zeros(1000)
n=1
for i in range(6):
    n *= 10
    I = 4.*MCarlo(g,0.,1., n)
    nc[i] = n
    E[i] = fabs(I - pi)
    print('n = %d Integ=%5f' % (n,I))
plt.loglog(nc,E,'ko')
plt.xlabel('n', fontsize=15)
plt.ylabel('Erro')
plt.show()
```



**Figura 5.7** – Erro versus  $n$  da integral numérica calculada com o método de monte carlo. O erro cai com  $n^{-1/2}$ .

O valor da integral de acordo com o número de tentativas é mostrado a seguir, onde podemos verificar que o valor numérico da integral se aproxima do valor de pi.

```
n = 10 Integ=2.60535
n = 100 Integ=3.29473
n = 1000 Integ=3.10542
n = 10000 Integ=3.12811
n = 100000 Integ=3.13947
n = 1000000 Integ=3.14195
```

### 5.2.2 Método de Monte Carlo para duas dimensões

Podemos generalizar o método muito facilmente para duas ou mais dimensões, basta coletarmos pontos aleatórios no espaço adequado. No caso bidimensional, por exemplo, temos:

$$\int_a^b \int_c^d f(x, y) dy \approx (b-a)(d-c) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i, y_i) = (b-a)(d-c) \langle f \rangle.$$

Onde  $(x_i, y_i)$  são números aleatórios dentro da área de integração.

### 5.2.3 Exercícios

1. Estime a integral pelo método do retângulo, trapézio, Simpson e Monte Carlo.

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx$$

2. Implemente o método de Monte Carlos para duas variáveis. Determine analiticamente e numericamente o valor da integral:

$$\int_{-1}^1 \int_0^2 (x^2 - 2y^2 + xy^3) dx dy$$

3. Utilizando o método de Simpson composto determine o valor da integral:

$$I = \int_0^{30} 200 \left( \frac{y}{5+y} \right) e^{-2y/30} dy$$

4. Determine as seguintes integrais numericamente:

$$I = \int_0^{\pi} 2\operatorname{sen}^2 dx \quad \text{e} \quad G = \int_0^{\pi} x\operatorname{sen}^2 dx$$

5. Usando os métodos: a) do trapézio e b) usando o método de Simpson.