Matemática Computacional

Aula 6 - Quadratura numérica

Ricardo Moura

Regra do quadrado

Queremos calcular o integral definido

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

A ideia base é

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b g(x)dx$$

em que g é uma função que "aproxima" f no intervalo dado e cuja primitiva seja fácil de calcular.

Regra do quadrado

- Regra do quadrado à esquerda e à direita

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

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

- Regra do ponto médio

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

- Regra do trapézio

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

- Regra de Simpson

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6}\left(f(a)+f(b)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right)$$

Newton-Cotes fechada

Se queremos calcular

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b g(x)dx$$

podemos tomar $g(x) = p_n(x)$ o polinómio interpolador de grau n de f.
Sugere-se dessa forma assumir

$$h = x_{i+1} - x_i = \frac{b-a}{n}$$

para termos os $n+1$ nós de interpolação

$$x_0 = a; x_1 = a + h; x_2 = a + 2h; \ldots ; x_n = a + nh = b.$$

Newton-Cotes fechada

Dessa forma, na forma de Lagrange teríamos

$$p_n(x) = L_0(x)f_0 + L_1(x)f_1 + \cdots + L_n(x)f_n = \sum_{i=0}^{n} L_i(x)f_i$$

e, portanto,

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f_i$$

onde $A_i = \int_{i=0}^{n} L_i(x)dx$.
Note-se que se fôssemos pela forma de Newton (diferenças divididas ou finitas), chegaríamos à mesma conclusão.

Newton-Cotes fechada

- Para $n = 1$ a quadratura de Newton-Cotes resume-se à regra do trapézio;
- Para $n = 2$ a quadratura de Newton-Cotes resume-se à regra de Simpson;
- Para $n = 3$ a quadratura de Newton-Cotes é conhecida pela regra dos $3/8$

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$$

Nota: Nem sempre o valor de n maior dá uma aproximação melhor. Nota: Regra do ponto médio é uma Newton-Cotes aberta pois não usa os extremos.

Newton-Cotes fechada

Example

Seja $I = \int_1^4 \sqrt{x}dx$. Utilizar a regra do trapézio e de Simpson para calcular o seu valor numérico.
Já sabemos que na verdade:

$$I = \frac{14}{3} \approx 4.666667.$$

Cálculo aproximado pela regra do trapézio

$$I \approx \frac{4-1}{2}\left(f(1) + f(4)\right) = 4.5$$

Cálculo aproximado pela regra de Simpson

$$I \approx \frac{4-1}{6}\left(f(1) + f(4) + 4f(2.5)\right) \approx 4.662278$$

Erro de integração

Já se sabe que

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(x+1)!}(x - x_0)(x - x_1)...(x - x_n)$$

podendo-se tirar daí o facto de o erro ser dado por

$$E_{tr} = \int_{x_0}^{x_n} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(x+1)!}(x - x_0)(x - x_1)...(x - x_n)dx$$

que no sentido lato, se trata de um erro de truncatura.

- Trapézios: $E_{tr} = -\frac{h^3}{12}f''(c), c \in [x_0, x_1]$;
- Simpson: $E_{tr} = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(c), c \in [x_0, x_2]$.

Se quisermos majorar o erro basta ter $|E_{tr}| \leq \frac{Mh^3}{12}$ onde $M = max|f''(x)|_{x \in X}$

Erro de integração

Example

Tomando o exemplo anterior: Para a regra dos trapézios:

$$f''(x) = -\frac{1}{4x^{1.5}}$$

logo

$$|E_{tr}| \leq \frac{3^3}{12}\frac{1}{4 \times 1^{1.5}} = 0.57$$

.

Para a regra de Simpson:

$$f^{(4)}(x) = -\frac{15}{16x^{3.5}}$$

logo

$$|E_{tr}| \leq \frac{1.5^5}{90}\frac{15}{16 \times 1^{3.5}} = 0.080$$

Erro de arredondamento

$$E_{arr} \leq \sum_{i=0}^{n} |A_i(x)| \Delta f_i$$

onde Δf_i é o majorante do erro de cada aproximação f_i. Se todos os $\Delta f_i = \Delta f$, então

$$E_{arr} \leq \Delta f \sum_{i=0}^{n} |A_i(x)|.$$

Para o caso em que todos os coeficientes A_i são positivos, o que se verifica sempre até $n = 7$, temos que

$$E_{arr} \leq \Delta f \sum_{i=0}^{n} \int_{x_0}^{x_n} L_i(x) dx = \Delta f \int_{x_0}^{x_n} \sum_{i=0}^{n} L_i(x) dx = (x_n - x_0) \Delta f.$$

Nota: Ao contrário da derivação numérica, a integração numérica é estável relativamente ao erro de arredondamento.

Erro de arredondamento

Example

Calcular $I = \int_1^{1.5} e^{-x^2} dx$ pela regra dos trapézios, calcular o majorante do erro de truncatura e o erro de arredondamento, onde os valores da função integranda estão arredondados à ordem 10^{-6}.

Solução: $I = 0.118320$

$f''(x) = (-2 + 4x^2)e^{-x^2}$ positiva e decrescente, logo,
$M = f''(1.5) = 2.58$(arred. por excesso)
$|E_{tr}| \leq 0.0269$(arred. por excesso) e

$E_{arr} \leq 0.25 \times 10^{-6}$

Erro de arredondamento

Example

Calcular $I = \int_1^{1.5} e^{-x^2} dx$ pela regra de Simpson e majorante do erro total de aproximação.

Solução: $I = 0.10931 \pm 0.0033$

$f^{(4)}(x) = (12 - 48x^2 + 16x^4)e^{-x^2}$
$M = 29.5$

Regras compostas

Para calcular $I = \int_{x_0}^{x_{20}} f(x)dx$, podíamos usar a regra de Newton-Cotes fechada através do uso da interpolação de um polinómio de grau 20. No entanto, note-se que

- polinómios de grau elevado podem podem dar origem a erros de truncatura elevados
- A partir de $n = 8$, os coeficientes da regra de Newton-Cotes podem ser positivos e negativos, provocando aumento nos erros de arredondamento
- para calcular o erro haverá a necessidade de uso de derivadas de ordem elevada.

Regras compostas

Daí a ideia é dividir o intervalo em sub-intervalos da forma:

$$[x_0, x_1], ..., [x_{n-1}, x_n]$$

ou

$$[x_0, x_2], ..., [x_{n-2}, x_n]$$

etc.

e aplicar as regras mais simples. Logo, por exemplo, para a regra do trapézio teremos

$$I = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{h}{2}(f_1 + f_2) + ... + \frac{h}{2}(f_{n-1} + f_n) =$$

$$= \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + ... + 2f_{n-1} + f_n)$$

Regras compostas

$$E_{tr} = -\frac{h^3 n}{12}\frac{f''(c_1) + ... + f''(c_n)}{n}$$

Se a função integranda for de C^2, algo bem habitual, então, f'' é contínua e daí, pelo teorema de Bolzano,

$$E_{tr} = -\frac{h^3 n}{12} f''(c), c \in]a, b[$$

e como o que nos interessa é majorar o erro teremos então:

$$E_{tr} \leq \frac{h^3 n}{12} M = \frac{(b-a)^3}{12n^2} M, c \in]a, b[$$

onde $M = max|f''(x)|_{x \in X}$ e $X = [a, b]$.

Regras compostas

Quanto ao erro de arredondamento teremos

$$E_{arr} \leq \frac{h}{2}(\Delta f_0 + 2\Delta f_1 + \ldots + 2\Delta f_{n-1} + \Delta f_n) = (b-a)\Delta f$$

caso tenhamos $\Delta f_i = \Delta f$.

Pode-se observar que a regra dos trapézios é bastante grosseira quando usada na versão simples, no entanto, usando na versão composta, o seu algoritmo é de aplicação simples e a convergência é garantida quando n aumenta.

Regras compostas

Example

Seja $I = \int_{-6}^{6} \frac{1}{1+x^2} dx$. Analiticamente $I = 2 \times arctg(x)|_0^6 \approx 2.811295$.

Dividindo o intervalo $[0,6]$ em 6 intervalos $n = 6$ e usando a regra de Newton-Cotes simples teríamos

$$I \approx 2 \times \frac{1}{140} \times (41f_0 + 216f_1 + 27f_2 + 272f_3 + 27f_4 + 216f_5 + 41f_6) \approx 2.751486$$

Usando a regra dos trapézios composta

$$I \approx 2 \times \frac{1}{2} \times (f_0 + 2f_1 + ... + 2f_5 + 2f_6) \approx 2.821597.$$

Regras compostas

Admitindo que a função integranda é de classe C^4 em $[a, b]$. Para n par teremos, usando a regra de Simpson composta:

$$I \approx \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + ... + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n)$$

$$|E_{tr}| \leq \frac{M(b-a)^5}{180n^4}$$

com $M = max|f^{(4)}(x)|_{x \in X}$

$$E_{arr} \leq (b-a)\Delta f$$

Regras compostas

Example

Calcular $ln2 = \int_1^2 \frac{1}{x}dx$, usando a regra de Simpson composta de modo a que o erro de truncatura não exceda 0.0005.

Solução:

$$f^{(4)}(x) = \frac{24}{x^5} \implies M = 24$$

$$|E_{tr}| \leq \frac{24 \times (2-1)^5}{180n^4} \implies n \geq 4.05$$

Toma-se $n = 6$ e $x_0 = 1; x_1 = 7/6; ...; x_5 = 11/6; x_6 = 2$, tendo que

$$ln2 = \frac{1}{18}\left(1 + 4 \times \frac{6}{7} + 2 \times \frac{6}{8} + ... + 4 \times \frac{6}{11} + \frac{1}{2}\right) \approx 0.693170$$

Grau da quadratura

Definition

Uma regra de quadratura/integração numérica diz-se de grau n se integrar exatamente os polinómios $1, x, x^2, ..., x^n$ e não x^{n+1}.

A regra dos trapézios integra exatamente os polinómios 1 e x.
A regra de Simpson integra exatamente $1, ..., x^3$ e não x^4.

Regra	Grau da derivada em E_{tr}	Grau da fórmula
Trapézios (2 nós)	2	1
Simpson (3 nós)	4	3
Três oitavos (4 nós)	4	3
Milne (5 nós)	6	5
(6 nós)	6	5

Se o número de nós n for par o grau é $n-1$, se ímpar então o grau é n.