Integração Numérica

Andréa Maria Pedrosa Valli

Laboratório de Computação de Alto Desempenho (LCAD)
Departamento de Informática
Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, Vitória, ES, Brasil

Integração Numérica

1. Fórmulas de Newton-Cotes
   - Regra dos Trapézios
   - Regra 1/3 de Simpson
2. Fórmulas de Gauss-Legendre

Fórmulas de Newton-Cotes:

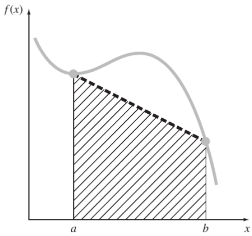
$$f(x) = p_m(x) + E_m(x)$$

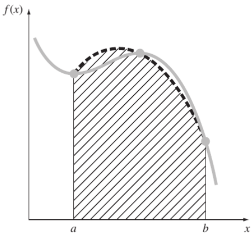
onde $p_m(x)$ = polinômio interpolador de grau m
$E_m(x)$ = erro na interpolação

$$\Rightarrow \int_a^b f(x)dx = \int_a^b p_m(x)dx + \int_a^b E_m(x)dx$$

Fórmulas:

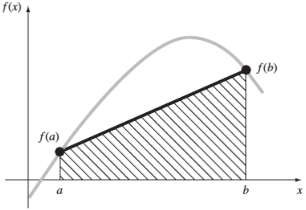
1. A regra dos Trapézios $(m = 1)$
2. A regra 1/3 de Simpson $(m = 2)$



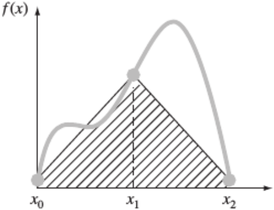


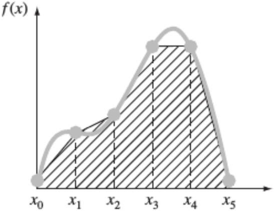
A regra dos Trapézios usando um subintervalo em $[a, b]$:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_1(x)dx = \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a)$$



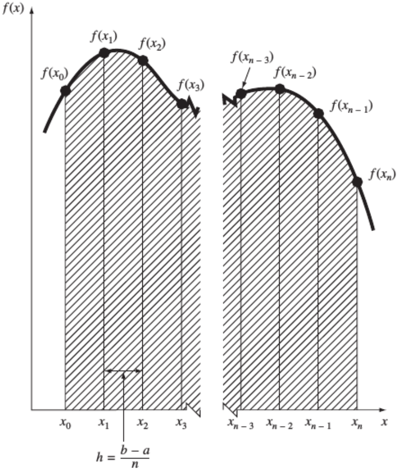
A regra dos Trapézios usando mais de um subintervalo em $[a, b]$:





A regra dos Trapézios usando n subintervalos em $[a, b]$:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (\,p_1(x) + E_1(x)\,)\,dx$$



$$
\begin{aligned}
\int_{x_i}^{x_{i+1}} p_1(x)\,dx &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(f(x_i)\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + f(x_{i+1})\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} \right) dx \\
&= \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2}(x_{i+1} - x_i)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\int_{x_i}^{x_{i+1}} E_1(x)\,dx &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{f''(\xi_x)}{2!}(x - x_i)(x - x_{i+1})\,dx \\
&= \frac{f''(\xi_x)}{2}\left[\frac{-(x_{i+1} - x_i)^3}{6}\right] \\
&= -\frac{f''(\xi_x)}{12}(x_{i+1} - x_i)^3, \quad \xi_x \in (x_i, x_{i+1})
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx &= \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2}(x_{i+1} - x_i) \\
&- \frac{f''(\xi_x)}{12}(x_{i+1} - x_i)^3, \quad \xi_x \in (x_i, x_{i+1})
\end{aligned}
$$

Vamos assumir que $x_{i+1} - x_i = h,\ i = 0, 1, \cdots, n-1$. Então,

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\, dx \\
&\approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2}(x_{i+1} - x_i) = \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1}(f(x_i) + f(x_{i+1})) \\
&= \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1) + f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{n-1}) + f(x_n)] \\
&= \frac{h}{2}[\, f(x_0) + 2\,(\, f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{n-1})\,)\, + f(x_n)\,]
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \cdots + A_n f(x_n)$$

onde

$$A_0 = A_n = \frac{h}{2}, \quad A_1 = A_2 = \cdots = A_{n-1} = h$$

$$
\begin{aligned}
\int_a^b E_1(x)dx &= \sum_{i=0}^{n-1} -\frac{f''(\xi_x)}{12}(x_{i+1}-x_i)^3 \\
&= -\frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_x), \quad \xi_x \in (x_i, x_{i+1}) \\
&= -\frac{h^2}{12}(b-a)\left(\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_x)\right) \\
\text{(TVI)} &= -\frac{h^2}{12}(b-a)\, f''(\xi), \quad \xi \in (a,b)
\end{aligned}
$$

Teorema do Valor Intermediário (TVI): $f''(x)$ é uma função contínua em $[a, b]$ e $min \leq c \leq max \Rightarrow \exists$ pelo menos um $\xi \in [a, b]$ tal que $f''(\xi) = c$.

A regra dos Trapézios:

$$\Rightarrow \int_a^b f(x)dx = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \cdots + A_n f(x_n) - \frac{h^2}{12}(b-a)\, f''(\xi)$$

onde

$$A_0 = A_n = \frac{h}{2}, \quad A_1 = A_2 = \cdots = A_{n-1} = h$$

Limitante para o erro na regra dos Trapézios:

$$|E_T| \leq \frac{h^2}{12}(b-a)\,M_2, \quad \text{onde} \quad M_2 = \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

Observação: a regra dos Trapézios integra sem erros polinômios de grau menor ou igual a 1. Ex: $f(x) = x$ em $[0,1]$

$$\int_0^1 x\,dx = \frac{x^2}{2}\Big|_0^1 = \frac{1}{2}$$

Basta usar apenas um subintervalo em $[0,1]$, $x_0 = 0$, $x_1 = 1 \Rightarrow h = 1$:

$$\int_0^1 x\,dx = \frac{1}{2}f(0) + \frac{1}{2}f(1) = \frac{1}{2}$$

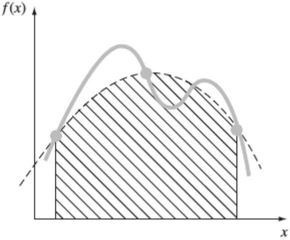
Exemplo: calcule uma aproximação para integral abaixo usando 4 e 8 subintervalos, calcule o erro exato e estime o erro cometido.

$$\int_1^2 e^x\,dx = e^2 - e^1 = 4.670774$$

A regra 1/3 de Simpson usando dois subintervalo em $[a, b]$:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b (\, p_2(x) + E_2(x)\,)dx$$

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \int_{x_0}^{x_2} (\, f(x_0)\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1)\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + \\ &\qquad f(x_2)\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\,)\, dx \\ &= \frac{h}{3}(\, f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\,)\end{aligned}$$



$$\int_{x_0}^{x_2} E_2(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_2} \frac{f'''(\xi_x)}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\,dx = 0$$

Considere o próximo termo na série de Taylor para calcular o erro:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad & \int_{x_0}^{x_2} \frac{f^{(4)}(\xi_x)}{4!}(x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2)\,dx \\ = \quad & -\frac{f^{(4)}(\xi_x)}{90}h^5, \quad \xi_x \in (x_0, x_2) \end{aligned}$$

Somando os erros e assumindo um número par de divisões (n par) em $[a, b]$, temos:

$$\begin{aligned} \Rightarrow E_S \quad &= \quad \sum_{k=1}^{n/2} -\frac{f^{(4)}(\xi_x)}{90}h^5, \quad \xi_x \in (x_{2k-2}, x_{2k}) \\ &= \quad -\frac{h^4}{90}\frac{b-a}{2}\left(\frac{1}{n/2}\sum_{k=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_x)\right) \\ (TVI) \quad &= \quad -\frac{h^4}{180}(b-a)\,f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a, b) \end{aligned}$$

Vamos assumir que $x_{i+1} - x_i = h$, $i = 0, 1, \cdots, n-1$. Então,

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

A regra 1/3 de Simpson

$$\Rightarrow \int_a^b f(x)dx = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \cdots + A_n f(x_n) - \frac{h^4}{180}(b-a)\, f^{(4)}(\xi)$$

onde

$$\begin{aligned} A_0 &= A_n = h/3 \\ A_1 &= A_3 = \cdots = A_{n-1} = 4h/3 \\ A_2 &= A_4 = \cdots = A_{n-2} = 2h/3 \end{aligned}$$

Limitante para o erro na regra 1/3 de Simpson:

$$|E_S| \leq \frac{h^4}{180}(b-a)\, M_4, \quad \text{onde} \quad M_4 = \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|$$

Observação: a regra 1/3 de Simpson integra sem erros polinômios de grau menor ou igual a 3. Ex: $f(x) = x^3$ em $[0,1]$

$$\begin{aligned} \int_0^1 x^3\, dx &= \frac{x^4}{4}\Big|_0^1 = \frac{1}{4} \\ &= \frac{1/2}{3}(f(0) + 4f(0.5) + f(1)), \quad (h = 1/2) \\ &= \frac{1}{6}(4(\frac{1}{2})^3 + 1) = \frac{1}{6}(\frac{1}{2} + 1) = \frac{1}{4} \end{aligned}$$

Exemplo: calcule uma aproximação para integral abaixo usando 4 e 8 subintervalos, calcule o erro exato e estime o erro cometido.

$$\int_1^2 e^x\, dx = e^2 - e^1 = 4.670774$$

Idéia do método de Quadratura Gaussiana: Vamos considerar inicialmente integrais definidas no intervalo padrão $t \in [-1, 1]$: determinar $t_0, t_1, \cdots, t_n, A_0, A_1, \cdots, A_n$ de forma que a integral seja exata para polinômios de grau $\leq 2n + 1$.

$$\int_{-1}^{1} g(t)dt \approx A_0 g(t_0) + A_1 g(t_1) + \cdots + A_n g(t_n)$$

Exemplo: $n = 1$, ou seja, 2 pontos (4 incógnitas). Fórmula exata para polinômios de grau menores ou iguais a $2n + 1 = 3$:

$$\int_{-1}^{1} g(t)dt \approx A_0 g(t_0) + A_1 g(t_1)$$

$$\begin{aligned}
2 &= \int_{-1}^{1} 1dt = A_0 + A_1 \\
0 &= \int_{-1}^{1} tdt = A_0 t_0 + A_1 t_1 \\
\frac{2}{3} &= \int_{-1}^{1} t^2 dt = A_0 (t_0)^2 + A_1 (t_1)^2 \\
0 &= \int_{-1}^{1} t^3 dt = A_0 (t_0)^3 + A_1 (t_1)^3
\end{aligned}$$

Sistema de equações não-linear com 4 equações e 4 incógnitas. Resolvendo:

$$t_0 = \pm\sqrt{3}/3 \qquad \text{(pontos da quadratura)}$$

$$A_0 = A_1 = 1 \qquad \text{(pesos da quadratura)}$$

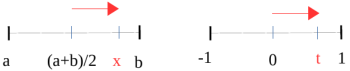
Exemplo: calcular uma aproximação para a integral abaixo usando quadratura Guaussiana com 2 pontos.

$$\int_{-1}^{1} e^x \, dx = e^1 - e^{-1} = 2.350402$$

Tabela de pontos e pesos da quadratura Gaussiana

Pontos	Fatores de Peso	Argumentos da Função	Erro de Truncamento
2	$c_0 = 1{,}0000000$	$x_0 = -0{,}577350269$	$\cong f^{(4)}(\xi)$
	$c_1 = 1{,}0000000$	$x_1 = 0{,}577350269$	
3	$c_0 = 0{,}5555556$	$x_0 = -0{,}774596669$	$\cong f^{(6)}(\xi)$
	$c_1 = 0{,}8888889$	$x_1 = 0{,}0$	
	$c_2 = 0{,}5555556$	$x_2 = 0{,}774596669$	
4	$c_0 = 0{,}3478548$	$x_0 = -0{,}861136312$	$\cong f^{(8)}(\xi)$
	$c_1 = 0{,}6521452$	$x_1 = -0{,}339981044$	
	$c_2 = 0{,}6521452$	$x_2 = 0{,}339981044$	
	$c_3 = 0{,}3478548$	$x_3 = 0{,}861136312$	
5	$c_0 = 0{,}2369269$	$x_0 = -0{,}906179846$	$\cong f^{(10)}(\xi)$
	$c_1 = 0{,}4786287$	$x_1 = -0{,}538469310$	
	$c_2 = 0{,}5688889$	$x_2 = 0{,}0$	
	$c_3 = 0{,}4786287$	$x_3 = 0{,}538469310$	
	$c_4 = 0{,}2369269$	$x_4 = 0{,}906179846$	
6	$c_0 = 0{,}1713245$	$x_0 = -0{,}932469514$	$\cong f^{(12)}(\xi)$
	$c_1 = 0{,}3607616$	$x_1 = -0{,}661209386$	
	$c_2 = 0{,}4679139$	$x_2 = -0{,}238619186$	
	$c_3 = 0{,}4679139$	$x_3 = 0{,}238619186$	
	$c_4 = 0{,}3607616$	$x_4 = 0{,}661209386$	
	$c_5 = 0{,}1713245$	$x_5 = 0{,}932469514$	

Mudança de variável de $x \in [a, b]$ e $t \in [-1, 1]$:



$$\frac{x - \frac{a+b}{2}}{t - 0} = \frac{b-a}{2} \quad \Rightarrow \quad x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} t \quad \Rightarrow \quad dx = \frac{b-a}{2} dt$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int_a^b f(x)dx &= \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} g(t)dt, \quad g(t) = f\Big(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} t\Big) \\ &\approx \frac{b-a}{2} \big(A_0 g(t_0) + A_1 g(t_1) + \cdots + A_n g(t_n) \big) \end{aligned}$$

Exemplo: calcular uma aproximação para a integral abaixo usando quadratura Gaussiana com dois pontos.

$$\int_1^2 e^x \, dx = e^2 - e^1 = 4.670774$$

Bibliografia Básica

[1] Algoritmos Numéricos, Frederico F. Campos, Filho - 2ª Ed., Rio de Janeiro, LTC, 2007.

[2] Métodos Numéricos para Engenharia, Steven C. Chapa e Raymond P. Canale, Ed. McGraw-Hill, 5ª Ed., 2008.

[3] Cálculo Numérico - Aspectos Teóricos e Computacionais, Márcia A. G. Ruggiero e Vera Lúcia da Rocha Lopes, Ed. Pearson Education, 2ª Ed., 1996.