Tópico 8 - Integração Numérica

João B. Florindo

Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Universidade Estadual de Campinas - Brasil
jbflorindo@ime.unicamp.br

Outline

Introdução

- Cálculo da primitiva de uma função nem sempre é trivial: Ex.: $\int_a^b e^{-x^2} dx$ (Gaussiana)
- $f(x)$ também pode ser fornecida por uma tabela
- Integração numérica substitui $f(x)$ por um polinômio no intervalo $[a, b]$
- Expressão geral:

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \cdots + A_n f(x_n), \quad x_i \in [a, b], i = 0, 1, \ldots, n$$

Fórmulas de Newton-Cotes

Newton-Cotes faz interpolação polinomial em pontos igualmente espaçados, isto é, $[a, b]$ é particionado em subintervalos $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$ tal que $x_{i+1} - x_i = h = (b-a)/n$.

Fórmulas fechadas de Newton-Cotes:

$$x_0 = a, x_n = b,$$
$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \cdots + A_n f(x_n) =$$
$$= \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

Fórmulas abertas de Newton-Cotes:

$$x_0, x_n \in (a, b),$$
$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \cdots + A_n f(x_n) =$$
$$= \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

A_i depende do grau do polinômio interpolador. Veremos exemplos de fórmulas fechadas a seguir.

Outline

Regra dos trapézios

Usando a forma de Lagrange para o polinômio $p_1(x)$ que interpola $f(x)$ em x_0 e x_1:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_{a=x_0}^{b=x_n} p_1(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \left[\frac{(x-x_1)}{-h} f(x_0) + \frac{(x-x_0)}{h} f(x_1) \right] dx = I_T$$

Esta integral pode ser resolvida por mudança de variável:

$$z = \frac{x - x_0}{h}$$

Derivando dos dois lados:

$$\frac{dz}{dx} = \frac{1}{h} \Rightarrow dx = hdz$$

Temos também as seguintes mudanças:

$$x - x_0 = zh$$

$$x = x_0 + zh$$

$$x - x_1 = x_0 + zh - (x_0 + h) = (z-1)h$$

Regra dos trapézios

Os limites de integração também se alteram:

$$x = x_0 \Rightarrow zh = 0 \Rightarrow z = 0$$

$$x = x_1 \Rightarrow (z-1)h = 0 \Rightarrow z = 1$$

Substituindo em I_T:

$$I_T = \int_0^1 \left[\frac{(z-1)h}{-h} f(x_0) + \frac{zh}{h} f(x_1) \right] hdz = h \int_0^1 \left[(1-z) f(x_0) + z f(x_1) \right] dz$$

$$= hf(x_0) \left(z - \frac{z^2}{2} \right) \bigg|_0^1 + hf(x_1) \left. \frac{z^2}{2} \right|_0^1 = h\frac{1}{2} f(x_0) + h\frac{1}{2} f(x_1)$$

Rearranjando temos

$$I_T = \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)]$$

que é a área do trapézio de altura h e bases $f(x_0)$ e $f(x_1)$.

Regra dos trapézios

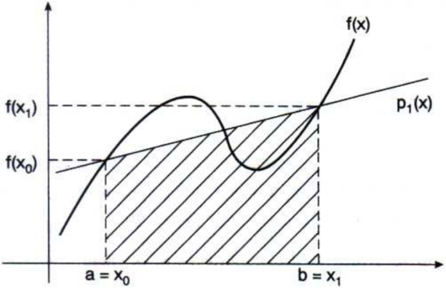

Figura: Fonte: Ruggiero&Lopes

Regra dos trapézios

O erro na aproximação é deduzido do erro da interpolação polinomial:

$$f(x) = p_1(x) + (x - x_0)(x - x_1)\frac{f''(\xi)}{2}, \xi \in (x_0, x_1).$$

Integrando:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = I_T + \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)\frac{f''(\xi)}{2}dx.$$

O erro então é:

$$E_T = \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)\frac{f''(\xi)}{2}dx.$$

Definimos

$$g(x) = (x - x_0)(x - x_1)$$

de modo que

$$E_T = \frac{1}{2}\int_{x_0}^{x_1} g(x)f''(\xi)dx.$$

Regra dos trapézios

Usamos agora o teorema do valor médio generalizado para integrais:

TVM Integrais Generalizado

Se $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ é contínua, g é integrável e não muda de sinal em $[a, b]$, então existe $c \in [a, b]$ tal que

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(c) \int_a^b g(x)dx.$$

Note que nossa $g(x) = (x - x_0)(x - x_1)$ é sempre negativa para $x \in [x_0, x_1]$, permitindo a aplicação do teorema:

$$E_T = \frac{1}{2} \int_{x_0}^{x_1} g(x) f''(\xi) dx =$$

$$= \frac{1}{2} f''(c) \int_{x_0}^{x_1} g(x)dx, c \in [x_0, x_n]$$

Regra dos trapézios

Mas:

$$\int_{x_0}^{x_1} g(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)dx = \int_{x_0}^{x_1} -h^2 dx =$$

$$= \frac{x^3}{3} - (x_0 + x_1)\frac{x^2}{2} + x_0 x_1 x \Big|_{x_0}^{x_1}$$

$$= \frac{2x_1^3 - 3x_0x_1^2 - 3x_1^3 + 6x_0x_1^2 - 2x_0^3 + 3x_0^3 + 3x_1x_0^2 - 6x_0^2x_1}{6}$$

$$= \frac{x_0^3 - x_1^3 + 3x_0x_1^2 - 3x_1x_0^2}{6} = \frac{(x_0 - x_1)^3}{6} = -\frac{h^3}{6}$$

Finalmente, substituindo em E_T:

$$E_T = -\frac{h^3}{12} f''(c), c \in (x_0, x_1)$$

Regra dos trapézios repetida

Erro grande quando o intervalo de integração é grande. Solução é subdividir este intervalo usando espaçamentos iguais e aplicar a regra dos trapézios repetidamente:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \sum_{i=0}^{m-1} \left(\frac{h}{2}[f(x_i) + f(x_{i+1})] - \frac{h^3 f''(c_i)}{12} \right)$$

$$= \sum_{i=0}^{m-1} \frac{h}{2}[f(x_i) + f(x_{i+1})] - \sum_{i=0}^{m-1} h^3 \frac{f''(c_i)}{12}, c_i \in (x_i, x_{i+1})$$

Ao final temos

$$I_{TR} = \frac{h}{2}\{f(x_0) + 2[f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{m-1})] + f(x_m)\}$$

$$E_{TR} = -\frac{mh^3 f''(\xi)}{12}, \xi \in (a, b)$$

Regra dos trapézios repetida

Se um limitante M_2 for conhecido, tal que $M_2 = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$:

$$|E_{TR}| \leq \frac{b-a}{12} h^2 M_2.$$

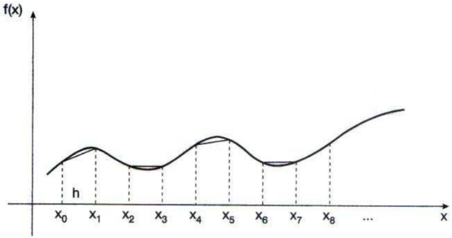

Figura: Fonte: Ruggiero&Lopes

Regra dos trapézios repetida

EXEMPLO: Resolva usando $h = 0.25$

$$\int_1^2 \ln x dx$$

Teremos os seguintes nós de interpolação:

$$x_0 = 1 \quad x_1 = 1.25 \quad x_2 = 1.5 \quad x_3 = 1.75 \quad x_4 = 2$$

e a integral:

$$I_{TR} = \frac{h}{2}\{f(x_0) + 2[f(x_1) + f(x_2) + f(x_3)] + f(x_4)\}$$

$$= \frac{0.25}{2}\{\ln(1) + 2[\ln(1.25) + \ln(1.5) + \ln(1.75)] + \ln(2)\}$$

$$= 0.125 \cdot \{0 + 2[0.2231 + 0.4055 + 0.5596] + 0.6931\} = 0.3837$$

Regra dos trapézios repetida

Para calcular o erro vamos obter o limitante da derivada:

$$M_2 = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)| = \max_{x \in [1,2]} \left| \frac{-1}{x^2} \right| = 1$$

Substituindo:

$$|E_{TR}| \leq \frac{b-a}{12} h^2 M_2 = \frac{2-1}{12} \cdot 0.25^2 \cdot 1 = 0.0052.$$

Erro exato:

$$|E_{TR}| = |0.3863 - 0.3837| = 0.0026.$$

Outline

Regra 1/3 de Simpson

Neste caso, usa-se a forma de Lagrange de grau 2 nos pontos $x_0 = a$, $x_1 = x_0 + h$ e $x_2 = x_0 + 2h = b$:

$$p_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(-h)(-2h)}f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(h)(-h)}f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(2h)(h)}f(x_2).$$

Deste modo,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_2} p_2(x)dx = \frac{f(x_0)}{2h^2}\int_{x_0}^{x_2}(x-x_1)(x-x_2)dx -$$

$$-\frac{f(x_1)}{h^2}\int_{x_0}^{x_2}(x-x_0)(x-x_2)dx + \frac{f(x_2)}{2h^2}\int_{x_0}^{x_2}(x-x_0)(x-x_1)dx = I_S.$$

Regra 1/3 de Simpson

Fazendo a mudança de variáveis:

$$z = \frac{x - x_0}{h}$$

Derivando dos dois lados:

$$\frac{dz}{dx} = \frac{1}{h} \text{ (}h\text{ não depende de }x\text{)} \Rightarrow dx = hdz$$

Temos também as seguintes mudanças:

$$x = x_0 + zh$$

$$x - x_1 = x_0 + zh - (x_0 + h) = (z - 1)h$$

$$x - x_2 = (z - 2)h$$

Regra 1/3 de Simpson

Os limites de integração também se alteram:

$$x = x_0 \Rightarrow zh = 0 \Rightarrow z = 0$$

$$x = x_1 \Rightarrow (z-1)h = 0 \Rightarrow z = 1$$

$$x = x_2 \Rightarrow (z-2)h = 0 \Rightarrow z = 2$$

Com estas mudanças podemos resolver as integrais acima e obter:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] = I_S$$

com erro

$$E_S = -\frac{h^5}{90} f^{(iv)}(c), c \in (x_0, x_2).$$

Regra 1/3 de Simpson Repetida

Como fizemos na regra dos trapézios, dividimos $[a, b] = [x_0, x_m]$ em $m + 1$ pontos igualmente espaçados $x_0, x_1, \ldots, x_m$, com m par e $h = x_{i+1} - x_i$. Temos então:

$$I_{SR} = \frac{h}{3}\{[f(x_0) + f(x_m)] + 4[f(x_1) + f(x_3) + \cdots + f(x_{m-1})] + 2[f(x_2) + f(x_4) + \cdots + f(x_{m-2})]\}$$

e

$$E_{SR} = -\sum_{k=1}^{m/2} \frac{h^5}{90} f^{(iv)}(c_k), c_k \in (x_{2k-2}, x_{2k})$$

e ainda se $M_4 = \max_{x\in[x_0,x_m]} |f^{(iv)}(x)|$,

$$|E_{SR}| \leq \frac{(b-a)h^4}{180} M_4.$$

Regra 1/3 de Simpson Repetida

EXEMPLO: Resolva usando $h = 0.25$

$$\int_1^2 \ln x dx$$

Teremos os seguintes nós de interpolação:

$$x_0 = 1 \quad x_1 = 1.25 \quad x_2 = 1.5 \quad x_3 = 1.75 \quad x_4 = 2$$

e a integral:

$$I_{SR} = \frac{h}{3}\{[f(x_0) + f(x_4)] + 4[f(x_1) + f(x_3)] + 2[f(x_2)]\}$$

$$= \frac{0.25}{3}\{\ln(1) + \ln(2) + 4[\ln(1.25) + \ln(1.75)] + 2[\ln(1.5)]\}$$

$$= 0.0833 \cdot \{0 + 0.6931 + 4[0.2231 + 0.5596] + 2[0.4055]\} = 0.3862$$

Regra 1/3 de Simpson Repetida

Para calcular o erro vamos obter o limitante da derivada:

$$M_4 = \max_{x \in [x_0, x_m]} |f^{(iv)}(x)| = \max_{x \in [1,2]} \left| \frac{-6}{x^4} \right| = 6$$

Substituindo:

$$|E_{SR}| \leq \frac{b-a}{180} h^4 M_4 = \frac{2-1}{180} \cdot 0.25^4 \cdot 6 = 0.0001.$$

Erro exato:

$$|E_{SR}| = |0.3863 - 0.3862| = 0.0001.$$

Outline

Fórmula Geral de Newton-Cotes

Generalizando a integração por meio da interpolação por um polinômio de grau n qualquer, temos usando Lagrange:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_n} p_n(x) = \int_{x_0}^{x_n} [f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + \cdots + f(x_n)L_n(x)]dx =$$

$$= [\int_{x_0}^{x_n} L_0(x)dx]f(x_0) + [\int_{x_0}^{x_n} L_1(x)dx]f(x_1) + \cdots + [\int_{x_0}^{x_n} L_n(x)dx]f(x_n) =$$

$$= A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \cdots + A_n f(x_n)$$

Portanto, em geral:

$$A_k = \int_{x_0}^{x_n} L_k(x)dx.$$

Teorema Geral do Erro

Se $f \in C^{n+1}[a,b]$ o erro E_n das fórmulas de Newton-Cotes é dado por:

$$E_n = \frac{h^{n+2} f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_0^n u(u-1)\dots(u-n)du, \xi \in [a,b] \text{ se } n \text{ for ímpar}$$

$$E_n = \frac{h^{n+3} f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_0^n (u-\frac{n}{2})u(u-1)\dots(u-n)du, \xi \in [a,b] \text{ se } n \text{ for par}$$

Outline

Quadratura Gaussiana

Podemos encontrar fórmulas similares às de Newton-Cotes, isto é:

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

em que $x_0, \ldots, x_n$ são pontos distintos.

Se tais fórmulas forem exatas para polinômios de grau $\leq 2n+1$ a fórmula é chamada de *Quadratura Gaussiana*.

Já sabemos que podemos integrar numericamente usando a forma de Lagrange:

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

onde

$$A_k = \int_a^b L_k(x)dx, k = 0, 1, \ldots, n$$

e estas fórmulas são exatas para polinômios de grau $\leq n$.

Quadratura Gaussiana

Em Newton-Cotes, os pontos são igualmente espaçados. Na Quadratura Gaussiana deixamos estes pontos indeterminados e conseguimos fórmulas similares, mas exatas para polinômios de grau $\leq 2n+1$.

Por exemplo, para $n=1$:

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

a qual deve ser exata para polinômios de grau ≤ 3.

Vamos trabalhar no intervalo $[a, b] = [-1, 1]$ para simplificar.

Dizer que a fórmula é exata para polinômios de grau ≤ 3 equivale a dizer que a integração será exata para:

$$g_0(t) = 1 \quad g_1(t) = t \quad g_2(t) = t^2 \quad g_3(t) = t^3$$

Quadratura Gaussiana

ou seja:

$$2 = \int_{-1}^{1} 1dt = A_0 g_0(t_0) + A_1 g_0(t_1) = A_0 + A_1$$

$$0 = \int_{-1}^{1} tdt = A_0 g_1(t_0) + A_1 g_1(t_1) = A_0 t_0 + A_1 t_1$$

$$\frac{2}{3} = \int_{-1}^{1} t^2 dt = A_0 g_2(t_0) + A_1 g_2(t_1) = A_0 t_0^2 + A_1 t_1^2$$

$$0 = \int_{-1}^{1} t^3 dt = A_0 g_3(t_0) + A_1 g_3(t_1) = A_0 t_0^3 + A_1 t_1^3.$$

Isso gera então o seguinte sistema não-linear:

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 t_0 + A_1 t_1 = 0 \\ A_0 t_0^2 + A_1 t_1^2 = 2/3 \\ A_0 t_0^3 + A_1 t_1^3 = 0. \end{cases}$$

Quadratura Gaussiana

Por fim esta restrição é satisfeita se usarmos:

$$x_0 = -\sqrt{3}/3, \quad x_1 = \sqrt{3}/3, \quad A_0 = A_1 = 1.$$

Para um intervalo $[a, b]$ genérico efetuamos a mudança de variável de $t \in [-1, 1]$ para $x \in [a, b]$ por meio de

$$x = \frac{1}{2}[a + b + t(b - a)] \qquad dx = \frac{b-a}{2}dt.$$

Quadratura Gaussiana

EXEMPLO:

$$\int_1^2 \ln x dx$$

Temos o intervalo $[a, b] = [1, 2]$ e portanto:

$$x = \frac{3}{2} + \frac{1}{2}t \Rightarrow dx = \frac{1}{2}dt$$

$$g(t) = \ln\left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2}t\right)$$

Usando dois pontos:

$$\int_1^2 \ln x dx = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} \ln\left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2}t\right) dt = I$$

Conhecemos também os seguintes parâmetros:

$$t_0 = -\sqrt{3}/3 = -0.5773 \quad t_1 = \sqrt{3}/3 = 0.5773 \quad A_0 = A_1 = 1.$$

Quadratura Gaussiana

Logo:

$$I \approx \frac{1}{2}[A_0 g(t_0)+A_1 g(t_1)] = \frac{1}{2}[\ln\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{2}(-0.5773)\right)+\ln\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{2}(0.5773)\right)]$$

$$\frac{1}{2}[\ln 1.2113 + \ln 1.7886] = 0.3866$$

Integral exata:

$$\int \ln x dx = x \ln x - x$$

e assim com 4 casas decimais:

$$\int_1^2 \ln x dx = 0.3863$$

Erro:

$$|E_G| = |0.3866 - 0.3863| = 0.0003.$$