MS211 - Cálculo Numérico

Aula 24 – Integração Numérica.

Marcos Eduardo Valle
Matemática Aplicada
IMECC - Unicamp

Na aula de hoje iniciamos os estudos sobre **quadratura numérica**, que consiste em obter um número real que aproxime o valor da integral definida

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

Na aula de hoje iniciamos os estudos sobre **quadratura numérica**, que consiste em obter um número real que aproxime o valor da integral definida

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

Assumiremos que f é contínua e, geralmente, assumiremos também que f é suave.

Na aula de hoje iniciamos os estudos sobre **quadratura numérica**, que consiste em obter um número real que aproxime o valor da integral definida

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

Assumiremos que f é contínua e, geralmente, assumiremos também que f é suave.

A quadratura numérica é usada quando conhecemos f apenas em alguns pontos ou quando é inviável calcular $I(f)$ analiticamente.

Fórmulas de Quadratura

Sabemos do curso de Cálculo I que a integral definida (de Riemann) de uma função contínua f em $[a, b]$ é

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} f(x_k)\Delta x,$$

em que $\Delta x = \frac{b-a}{n}$ e x_k são pontos amostrais do intervalo $[a, b]$.

Fórmulas de Quadratura

Sabemos do curso de Cálculo I que a integral definida (de Riemann) de uma função contínua f em $[a, b]$ é

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} f(x_k)\Delta x,$$

em que $\Delta x = \frac{b-a}{n}$ e x_k são pontos amostrais do intervalo $[a, b]$.

Na quadratura numérica, aproximamos $I(f)$ por uma soma finita, na qual f é amostrada em alguns pontos, chamada **fórmula de quadratura**.

Formalmente, numa fórmula de quadratura de $n+1$ pontos temos

$$I(f) = \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k) + R_{n+1},$$

em que

- $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a, b]$ são os nós de integração,
- $w_0, w_1, \ldots, w_n$ são os pesos,
- R_{n+1} é o resto.

Formalmente, numa fórmula de quadratura de $n+1$ pontos temos

$$I(f) = \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k) + R_{n+1},$$

em que

- $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a, b]$ são os nós de integração,
- $w_0, w_1, \ldots, w_n$ são os pesos,
- R_{n+1} é o resto.

Dessa forma, numa quadratura numérica definimos

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k).$$

Formalmente, numa fórmula de quadratura de $n+1$ pontos temos

$$I(f) = \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k) + R_{n+1},$$

em que

- $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a, b]$ são os nós de integração,
- $w_0, w_1, \dots, w_n$ são os pesos,
- R_{n+1} é o resto.

Dessa forma, numa quadratura numérica definimos

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k).$$

Nosso objetivo será escolher os pontos x_k's nos quais f é amostrada e também determinar os pesos w_k's para a quadratura numérica.

Fórmulas de Newton-Cotes

As fórmulas de Newton-Cotes são obtidas usando interpolação polinomial ou interpolação polinomial por partes em pontos $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$ igualmente espaçados do intervalo $[a, b]$.

Fórmulas de Newton-Cotes

As fórmulas de Newton-Cotes são obtidas usando interpolação polinomial ou interpolação polinomial por partes em pontos $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$ igualmente espaçados do intervalo $[a, b]$.

Temos uma fórmula fechada de Newton-Cotes se $x_0 = a$ e $x_n = b$. Caso contrário, temos uma fórmula aberta de Newton-Cotes.

Fórmulas de Newton-Cotes

As fórmulas de Newton-Cotes são obtidas usando interpolação polinomial ou interpolação polinomial por partes em pontos $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$ igualmente espaçados do intervalo $[a, b]$.

Temos uma fórmula fechada de Newton-Cotes se $x_0 = a$ e $x_n = b$. Caso contrário, temos uma fórmula aberta de Newton-Cotes.

Em outras palavras, na fórmula aberta de Newton-Cotes, temos $x_0, x_1, \ldots, x_n \in (a, b)$.

Fórmulas Fechadas de Newton-Cotes

Seja p_n o polinômio de grau n que interpola f nos pontos

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad \forall k = 0, 1, \ldots, n,$$

igualmente espaçados no intervalo $[a, b]$.

Fórmulas Fechadas de Newton-Cotes

Seja p_n o polinômio de grau n que interpola f nos pontos

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad \forall k = 0, 1, \ldots, n,$$

igualmente espaçados no intervalo $[a, b]$.

Usando a forma de Lagrange temos

$$p_n(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + \ldots + f(x_n)L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)L_k(x),$$

em que

$$L_k(x) = \prod_{i \neq k} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}.$$

Consequentemente,

$$
\begin{aligned}
I(f) &= \int_a^b f(x)dx \\
&\approx \int_a^b p_n(x)dx = \int_a^b \left(\sum_{k=0}^{n} f(x_k)L_k(x) \right) dx \\
&= \sum_{k=0}^{n} \left(\int_a^b L_k(x)dx \right) f(x_k) \\
&= \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k),
\end{aligned}
$$

em que os pesos $w_0, w_1, \ldots, w_n$ são dados por

$$
w_k = \int_a^b L_k(x)dx, \quad \forall k = 0, 1, \ldots, n.
$$

Consequentemente,

$$
\begin{aligned}
I(f) &= \int_a^b f(x)dx \\
&\approx \int_a^b p_n(x)dx = \int_a^b \left(\sum_{k=0}^{n} f(x_k)L_k(x) \right) dx \\
&= \sum_{k=0}^{n} \left(\int_a^b L_k(x)dx \right) f(x_k) \\
&= \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k),
\end{aligned}
$$

em que os pesos $w_0, w_1, \ldots, w_n$ são dados por

$$
w_k = \int_a^b L_k(x)dx, \quad \forall k = 0, 1, \ldots, n.
$$

Note que os pesos não dependem da função f!

Regra dos Trapézios

A regra dos trapézios é obtida considerando $n = 1$.

Regra dos Trapézios

A regra dos trapézios é obtida considerando $n = 1$.

Nesse caso, $x_0 = a$ e $x_1 = b$. As bases de Lagrange são

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x_1 - x}{h} \quad \text{e} \quad L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x - x_0}{h},$$

em que $h = x_1 - x_0$. Logo,

$$w_0 = \int_a^b L_0(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \left(\frac{x_1 - x}{h} \right) dx = \frac{h}{2},$$

$$w_1 = \int_a^b L_1(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \left(\frac{x - x_0}{h} \right) dx = \frac{h}{2}.$$

Regra dos Trapézios

A regra dos trapézios é obtida considerando $n = 1$.

Nesse caso, $x_0 = a$ e $x_1 = b$. As bases de Lagrange são

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x_1 - x}{h} \quad \text{e} \quad L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x - x_0}{h},$$

em que $h = x_1 - x_0$. Logo,

$$w_0 = \int_a^b L_0(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \left(\frac{x_1 - x}{h}\right) dx = \frac{h}{2},$$

$$w_1 = \int_a^b L_1(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \left(\frac{x - x_0}{h}\right) dx = \frac{h}{2}.$$

Portanto, na fórmula dos trapézios temos

$$I(f) \approx T_1(f) = \frac{h}{2}\Big(f(x_0) + f(x_1)\Big).$$

Erro da Regra dos Trapézios

Da interpolação polinomial, sabemos que

$$f(x) = p_1(x) + \frac{1}{2}(x - x_0)(x - x_1)f''(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_1),$$

em que p_1 é o polinômio de grau 1 que interpola f em x_0 e x_1.

Erro da Regra dos Trapézios

Da interpolação polinomial, sabemos que

$$f(x) = p_1(x) + \frac{1}{2}(x - x_0)(x - x_1)f''(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_1),$$

em que p_1 é o polinômio de grau 1 que interpola f em x_0 e x_1.

Integrando ambos os lados da equação, obtemos

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} p_1(x)dx + \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{2}(x - x_0)(x - x_1)f''(\xi)dx \\ &= T_1(f) + R_T, \end{aligned}$$

em que ξ depende de x e

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

Pelo teorema do valor médio para integrais, temos

$$R_T = \frac{f''(\eta)}{2} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)dx, \quad \eta \in (x_0, x_1).$$

Pelo teorema do valor médio para integrais, temos

$$R_T = \frac{f''(\eta)}{2} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)dx, \quad \eta \in (x_0, x_1).$$

Tomando $z = x - x_0$ e $h = x_1 - x_0$, concluímos que

$$\int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)dx = \int_0^h z(z - h)dz = \frac{-h^3}{6}.$$

Pelo teorema do valor médio para integrais, temos

$$R_T = \frac{f''(\eta)}{2} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1) dx, \quad \eta \in (x_0, x_1).$$

Tomando $z = x - x_0$ e $h = x_1 - x_0$, concluímos que

$$\int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1) dx = \int_0^h z(z - h) dz = \frac{-h^3}{6}.$$

Portanto,

$$I(f) = T_1(f) - \frac{h^3}{12} f''(\eta), \quad \eta \in (x_0, x_1).$$

Regra dos Trapézios Repetida

Note que R_T pode ser grande quando a integral é calculada em um intervalo grande. Para contornar esse problema, podemos fazer uma subdivisão do intervalo $[a, b]$ com pontos

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad \forall k = 0, 1, \ldots, n,$$

igualmente espaçados e aplicar a regra dos trapézios em cada um dos subintervalos $[x_{k-1}, x_k]$, para $k = 1, \ldots, n$.

Regra dos Trapézios Repetida

Note que R_T pode ser grande quando a integral é calculada em um intervalo grande. Para contornar esse problema, podemos fazer uma subdivisão do intervalo $[a, b]$ com pontos

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad \forall k = 0, 1, \ldots, n,$$

igualmente espaçados e aplicar a regra dos trapézios em cada um dos subintervalos $[x_{k-1}, x_k]$, para $k = 1, \ldots, n$.

Equivalentemente, podemos aproximar f por um polinômio linear por partes Π_1 que interpola f em $x_0, x_1, \ldots, x_n$.

Regra dos Trapézios Repetida

Note que R_T pode ser grande quando a integral é calculada em um intervalo grande. Para contornar esse problema, podemos fazer uma subdivisão do intervalo $[a, b]$ com pontos

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad \forall k = 0, 1, \ldots, n,$$

igualmente espaçados e aplicar a regra dos trapézios em cada um dos subintervalos $[x_{k-1}, x_k]$, para $k = 1, \ldots, n$.

Equivalentemente, podemos aproximar f por um polinômio linear por partes Π_1 que interpola f em $x_0, x_1, \ldots, x_n$.

Nesse caso,

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \Pi_1(x)dx = T_n(f).$$

Formalmente, temos a aproximação

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \Pi_1(x)dx = \sum_{k=1}^{n} \int_{x_{k-1}}^{x_k} \Pi_1(x)dx = T_n(f).$$

Considerando a expressão para o resto, obtemos

$$\begin{aligned} I(f) &= \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{h}{2}\Big(f(x_{k-1}) + f(x_k)\Big) - \frac{h^3}{12} f''(\eta_k) \right) \\ &= \frac{h}{2} \sum_{k=1}^{n} \Big(f(x_{k-1}) + f(x_k)\Big) - \frac{h^3}{12} \sum_{k=1}^{n} f''(\eta_k) \\ &= T_n(f) + R_T. \end{aligned}$$

Formalmente, temos a aproximação

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \Pi_1(x)dx = \sum_{k=1}^{n} \int_{x_{k-1}}^{x_k} \Pi_1(x)dx = T_n(f).$$

Considerando a expressão para o resto, obtemos

$$\begin{aligned} I(f) &= \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{h}{2}\Big(f(x_{k-1}) + f(x_k)\Big) - \frac{h^3}{12} f''(\eta_k) \right) \\ &= \frac{h}{2} \sum_{k=1}^{n} \Big(f(x_{k-1}) + f(x_k)\Big) - \frac{h^3}{12} \sum_{k=1}^{n} f''(\eta_k) \\ &= T_n(f) + R_T. \end{aligned}$$

Concluindo a regra dos trapézios repetida define

$$I(f) \approx T_n(f) = \frac{h}{2}\Big(f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\Big).$$

Erro da Regra dos Trapézios Repetida

Supondo que f'' é contínua em $[a, b]$, uma generalização do teorema do valor intermediário garante que existe $\xi \in (a, b)$ tal que

$$R_T = -\frac{h^3}{12}\sum_{k=1}^{n} f''(\eta_k) = -nf''(\xi)\frac{h^3}{12}.$$

Erro da Regra dos Trapézios Repetida

Supondo que f'' é contínua em $[a, b]$, uma generalização do teorema do valor intermediário garante que existe $\xi \in (a, b)$ tal que

$$R_T = -\frac{h^3}{12}\sum_{k=1}^{n} f''(\eta_k) = -nf''(\xi)\frac{h^3}{12}.$$

Portanto, o erro da regra dos trapézios repetida aplicada para estimar a integral $\int_a^b f(x)dx$ para uma função com derivada segunda contínua em $[a, b]$ satisfaz

$$|I(f) - T_n(f)| \leq \frac{b-a}{12}h^2 M_2,$$

em que

$$M_2 = \max_{a \leq \xi \leq b} |f''(\xi)|.$$

Resumo da Regra dos Trapézios Repetida

A regra dos trapézios repetida define

$$I(f) \approx T_n(f) = \frac{h}{2}\Big(f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\Big).$$

Resumo da Regra dos Trapézios Repetida

A regra dos trapézios repetida define

$$I(f) \approx T_n(f) = \frac{h}{2}\Big(f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\Big).$$

O erro da regra dos trapézios repetida para uma função com derivada segunda contínua em $[a, b]$ satisfaz

$$|I(f) - T_n(f)| \leq \frac{b-a}{12} h^2 M_2,$$

em que

$$M_2 = \max_{a \leq \xi \leq b} |f''(\xi)|.$$

Exemplo 1

Considere a integral definida $I(f) = \int_0^1 e^x dx$.

(a) Estime $I(f)$ usando a regra dos trapézios repetida com 10 subintervalos. Determine o erro cometido e compare com a estimativa apresentada anteriormente.

(b) Qual o número n de subintervalos que devemos usar para que o erro $|I(f) - T_n(f)| < 10^{-3}$?

Resposta: (a) Os pontos $x_k = 0.1k$, para $k = 0, 1, \ldots, 10$, dividem o intervalo $[0, 1]$ em 10 subintervalos. Dessa forma,

$$T_{10}(f) = \frac{0.1}{2}(e^0 + 2e^{0.1} + 2e^{0.2} + \ldots + 2e^{0.8} + 2e^{0.9} + e) = 1.7197,$$

enquanto

$$I(f) = \int_0^1 e^x dx = e^1 - 1 = 1.7183.$$

Portanto, o erro da estimativa é

$$|I(f) - T_{10}(f)| = 0.0014317.$$

Por outro lado, sabemos que

$$M_2 = \max_{a \leq \xi \leq b} |f''(\xi)| = \max_{a \leq \xi \leq b} e^{\xi} = e^1.$$

Logo,

$$|I(f) - T_n(f)| \leq \frac{b-a}{12} h^2 M_2 = \frac{(0.1)^2 e}{12} = 0.0022652.$$

De fato, temos $|I(f) - T_{10}(f)| = 0.0014317 < 0.0022652$.

(b) Teremos $|I(f) - T_n(f)| < 10^{-3}$ se

$$\frac{b-a}{12}h^2 M_2 = \frac{e}{12}h^2 < 10^{-3} \quad \Longrightarrow \quad h < \sqrt{\frac{12 \times 10^{-3}}{e}}.$$

Portanto,

$$h = \frac{b-a}{n} \quad \Longrightarrow \quad n = \frac{b-a}{h} = \frac{1}{h} > \sqrt{\frac{e}{12 \times 10^{-3}}} = 15.051,$$

ou seja, o número de subintervalos deve ser maior que 15 ($n \geq 16$).

Regra 1/3 de Simpson

A regra 1/3 de Simpson é obtida considerando $n = 2$. Nesse caso,

$$x_0 = a, \quad x_1 = (a+b)/2 \quad \text{e} \quad x_2 = b.$$

Regra 1/3 de Simpson

A regra 1/3 de Simpson é obtida considerando $n = 2$. Nesse caso,

$$x_0 = a, \quad x_1 = (a+b)/2 \quad \text{e} \quad x_2 = b.$$

As integrais das bases de Lagrange são

$$w_0 = \int_a^b L_0(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}dx = \frac{h}{3},$$

$$w_1 = \int_a^b L_1(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}dx = \frac{4h}{3},$$

$$w_2 = \int_a^b L_2(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}dx = \frac{h}{3},$$

que podem ser calculadas considerando $z = x - x_0$.

Portanto, na fórmula 1/3 de Simpson temos

$$I(f) \approx S_2(f) = \frac{h}{3}\Big(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\Big).$$

Portanto, na fórmula 1/3 de Simpson temos

$$I(f) \approx S_2(f) = \frac{h}{3}\Big(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\Big).$$

Supondo que a derivada $f^{(iv)}$ é contínua em $[a, b]$, pode-se mostrar que o resto na fórmula 1/3 de Simpson satisfaz

$$R_S = I(f) - S_2(f) = -\frac{h^5}{90} f^{iv}(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

Portanto, na fórmula 1/3 de Simpson temos

$$I(f) \approx S_2(f) = \frac{h}{3}\Big(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\Big).$$

Supondo que a derivada $f^{(iv)}$ é contínua em $[a, b]$, pode-se mostrar que o resto na fórmula 1/3 de Simpson satisfaz

$$R_S = I(f) - S_2(f) = -\frac{h^5}{90} f^{iv}(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

Note que o erro da fórmula 1/3 de Simpson depende de h^5!

Regra dos 1/3 de Simpson Repetida

Tal como na regra dos trapézios, o resto R_S da regra 1/3 de Simpson pode ser grande quando a integral é calculada em um intervalo grande.

Regra dos 1/3 de Simpson Repetida

Tal como na regra dos trapézios, o resto R_S da regra 1/3 de Simpson pode ser grande quando a integral é calculada em um intervalo grande.

Para contornar esse problema, subdividimos o intervalo $[a, b]$ com pontos

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad \forall k = 0, 1, \ldots, n,$$

igualmente espaçados com n par e aplicar a regra 1/3 de Simpson em cada um dos subintervalos $[x_{2k-2}, x_{2k}]$, para $k = 1, \ldots, n/2$.

Regra dos 1/3 de Simpson Repetida

Tal como na regra dos trapézios, o resto R_S da regra 1/3 de Simpson pode ser grande quando a integral é calculada em um intervalo grande.

Para contornar esse problema, subdividimos o intervalo $[a, b]$ com pontos

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad \forall k = 0, 1, \ldots, n,$$

igualmente espaçados com n par e aplicar a regra 1/3 de Simpson em cada um dos subintervalos $[x_{2k-2}, x_{2k}]$, para $k = 1, \ldots, n/2$.

Equivalentemente, podemos aproximar f por um polinômio quadrático por partes Π_2 que interpola f em $x_0, x_1, \ldots, x_n$.

Assim, na regra 1/3 de Simpson repetida temos

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \Pi_2(x)dx = \sum_{k=1}^{n/2} \int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} \Pi_2(x)dx = S_n(f).$$

Considerando a expressão para o resto, obtemos

$$\begin{aligned} I(f) &= \sum_{k=1}^{n/2} \left(\frac{h}{3} \Big(f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k}) \Big) - \frac{h^5}{90} f^{(iv)}(\eta_k) \right) \\ &= \frac{h}{3} \sum_{k=1}^{n/2} \Big(f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k}) \Big) - \frac{h^5}{90} \sum_{k=1}^{n/2} f^{(iv)}(\eta_k) \\ &= S_n(f) + R_S. \end{aligned}$$

Assim, na regra 1/3 de Simpson repetida temos

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \Pi_2(x)dx = \sum_{k=1}^{n/2} \int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} \Pi_2(x)dx = S_n(f).$$

Considerando a expressão para o resto, obtemos

$$\begin{aligned} I(f) &= \sum_{k=1}^{n/2} \left(\frac{h}{3}\Big(f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k}) \Big) - \frac{h^5}{90} f^{(iv)}(\eta_k) \right) \\ &= \frac{h}{3} \sum_{k=1}^{n/2} \Big(f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k}) \Big) - \frac{h^5}{90} \sum_{k=1}^{n/2} f^{(iv)}(\eta_k) \\ &= S_n(f) + R_S. \end{aligned}$$

Concluindo, a regra 1/3 de Simpson repetida fornece

$$S_n(f) = \frac{h}{3}\Big(f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+\ldots+2f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n) \Big).$$

Erro da Regra 1/3 de Simpson Repetida

Supondo que $f^{(iv)}$ é contínua em $[a, b]$, uma generalização do teorema do valor intermediário garante que existe $\xi \in (a, b)$ tal que

$$R_S = -\frac{h^5}{90}\sum_{k=1}^{n/2} f^{(iv)}(\eta_k) = -\frac{n}{2}f^{(iv)}(\xi)\frac{h^5}{90} = -nf^{(iv)}(\xi)\frac{h^5}{180}.$$

Erro da Regra 1/3 de Simpson Repetida

Supondo que $f^{(iv)}$ é contínua em $[a, b]$, uma generalização do teorema do valor intermediário garante que existe $\xi \in (a, b)$ tal que

$$R_S = -\frac{h^5}{90}\sum_{k=1}^{n/2} f^{(iv)}(\eta_k) = -\frac{n}{2}f^{(iv)}(\xi)\frac{h^5}{90} = -nf^{(iv)}(\xi)\frac{h^5}{180}.$$

Portanto, o erro da regra 1/3 de Simpson repetida para estimar a integral $\int_a^b f(x)dx$ de uma função com derivada $f^{(iv)}$ contínua em $[a, b]$ satisfaz

$$|I(f) - S_n(f)| \leq \frac{b-a}{180}h^4 M_4,$$

em que

$$M_4 = \max_{a\leq\xi\leq b} |f^{(iv)}(\xi)|.$$

Resumo da Regra 1/3 de Simpson Repetida

A regra 1/3 de Simpson repetida fornece

$$S_n(f) = \frac{h}{3}\Big(f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+\ldots+2f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n)\Big).$$

Resumo da Regra 1/3 de Simpson Repetida

A regra 1/3 de Simpson repetida fornece

$$S_n(f) = \frac{h}{3}\Big(f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+\ldots+2f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n)\Big).$$

O erro da regra 1/3 de Simpson repetida para uma função com derivada $f^{(iv)}$ contínua em $[a,b]$ satisfaz

$$|I(f) - S_n(f)| \leq \frac{b-a}{180} h^4 M_4,$$

em que

$$M_4 = \max_{a \leq \xi \leq b} |f^{(iv)}(\xi)|.$$

Exemplo 2

Considere a integral definida $I(f) = \int_0^1 e^x dx$.

(a) Estime $I(f)$ usando a regra 1/3 de Simpson repetida com $n = 10$ subintervalos. Determine o erro cometido e compare com a estimativa apresentada anteriormente.

(b) Qual o número n de subintervalos que devemos usar para que o erro $|I(f) - S_n(f)| < 10^{-3}$?

Resposta: (a) Os pontos $x_k = 0.1k$, para $k = 0, 1, \ldots, 10$, dividem o intervalo $[0, 1]$ em 10 subintervalos. Dessa forma,

$$S_{10}(f) = \frac{0.1}{3}(e^0 + 4e^{0.1} + 2e^{0.2} + \ldots + 2e^{0.8} + 4e^{0.9} + e) = 1.7183,$$

enquanto

$$I(f) = \int_0^1 e^x dx = e^1 - 1 = 1.7183.$$

Usando uma precisão maior, concluímos que o erro da estimativa é

$$|I(f) - S_{10}(f)| = 9.5347 \times 10^{-7}.$$

Por outro lado, sabemos que

$$M_4 = \max_{a \leq \xi \leq b} |f^{(iv)}(\xi)| = \max_{a \leq \xi \leq b} e^{\xi} = e^1.$$

Logo,

$$|I(f) - S_{10}(f)| \leq \frac{b-a}{180} h^4 M_4 = \frac{(0.1)^4 e}{180} = 1.5102 \times 10^{-6}.$$

De fato, temos $|I(f) - T_{10}(f)| = 9.5347 \times 10^{-7} < 1.5102 \times 10^{-6}$.

(b) Teremos $|I(f) - S_n(f)| < 10^{-3}$ se

$$\frac{b-a}{180}h^4 M_4 = \frac{e}{180}h^4 < 10^{-3} \quad \Longrightarrow \quad h < \sqrt[4]{\frac{180 \times 10^{-3}}{e}}.$$

Portanto,

$$h = \frac{b-a}{n} \quad \Longrightarrow \quad n > \frac{b-a}{h} = \sqrt[4]{\frac{e}{180 \times 10^{-3}}} = 1.9713.$$

Como n deve ser par, devemos ter $n \geq 2$.

Teorema Geral do Erro

Teorema 3

Sejam f uma função com derivada $f^{(n+2)}$ *contínua em* $[a, b]$ *e* p_n *o polinômio que interpola f em pontos igualmente espaçados* $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ *do intervalo* $[a, b]$*. Nesse caso, o resto* $R_n = I(f) - \int_a^b p_n(x)dx$ *da fórmula de Newton-Cotes fechada satisfaz*

- *Se n é ímpar:*

$$R_n = \frac{h^{n+2} f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_0^n z(z-1)\ldots(z-n)dz, \quad \xi \in [a, b].$$

- *Se n é par:*

$$R_n = \frac{h^{n+3} f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_0^n \left(z - \frac{n}{2}\right) z(z-1)\ldots(z-n)dz, \quad \xi \in [a, b].$$

Considerações Finais

Na aula de hoje apresentamos fórmulas para estimar numericamente uma integral definida $\int_a^b f(x)dx$. Especificamente, apresentamos as fórmulas de Newton-Cotes, em que

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_n(x)dx \quad \text{ou} \quad \int_a^b f(x)dx = \int_a^b \Pi_m(x)dx.$$

Em particular, vimos

- A regra dos trapézios repetida é obtida aproximando f por Π_1 em $x_0, x_1, \ldots, x_n$.
- A regra 1/3 de Simpsion repetida é obtida aproximando f por Π_2 em $x_0, x_1, \ldots, x_n$ com n par.

Muito grato pela atenção!