

CCI-22



Matemática Computacional

Carlos Alberto Alonso Sanches

CCI-22

7) Integração Numérica

Fórmulas de Newton-Cotes, Quadratura Adaptativa

CCI-22

- Definição
- Fórmulas de Newton-Cotes
 - Regra dos trapézios
 - Regra de Simpson
 - Fórmula geral
 - Estimativas de erros
- Método da Quadratura Adaptativa

CCI-22

- Definição
- Fórmulas de Newton-Cotes
 - Regra dos trapézios
 - Regra de Simpson
 - Fórmula geral
 - Estimativas de erros
- Método da Quadratura Adaptativa

Definição

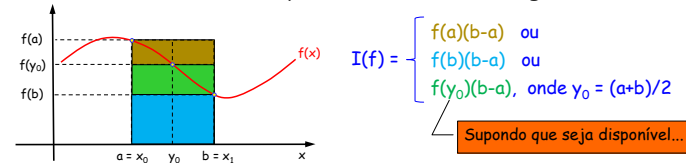
- Em determinadas situações, pode ser muito difícil - e até impossível! - integrar analiticamente uma função $f(x)$ no intervalo $[a,b]$:

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

- Isso ocorre, por exemplo, quando o valor de $f(x)$ é conhecido em apenas alguns pontos desse intervalo: como não se dispõe da sua expressão analítica, não é possível integrá-la
- Há métodos numéricos que fornecem uma solução aproximada para esse problema
- A ideia básica é substituir $f(x)$ por um polinômio que a aproxime razoavelmente. Desse modo, o problema é resolvido através da integração desse polinômio

Regra do retângulo

- Considerando apenas os pontos $x_0=a$ e $x_1=b$ de $[a,b]$, uma primeira aproximação dessa integral, que chamaremos de $I(f)$, pode ser obtida do seguinte modo:



- Generalizando para $n+1$ pontos em $[a,b]$, onde $h=(b-a)/n$:

$$I(f) = \begin{cases} h[f(x_0) + f(x_1) + \dots + f(x_{n-1})] = h\sum f(x_i), 0 \leq i < n & \text{ou} \\ h[f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_n)] = h\sum f(x_i), 0 < i \leq n & \text{ou} \\ h[f(y_0) + f(y_1) + \dots + f(y_{n-1})] = h\sum f(y_i), y_i = (x_{i+1} - x_i)/2, 0 \leq i < n \end{cases}$$

- É equivalente a aproximar f com um polinômio de grau 0

CCI-22

- Definição
- Fórmulas de Newton-Cotes
 - Regra dos trapézios
 - Regra de Simpson
 - Fórmula geral
 - Estimativas de erros
- Método da Quadratura Adaptativa

Fórmulas de Newton-Cotes

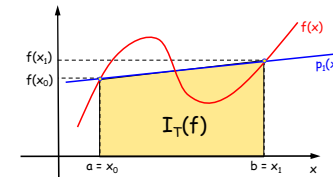
- Nas *Fórmulas de Newton-Cotes*, $f(x)$ é interpolada por um polinômio em $n+1$ pontos de $[a=x_0, b=x_n]$, igualmente espaçados
- Há outros métodos para o caso em que os pontos não são equidistantes entre si, mas não os estudaremos neste curso
- Cada subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$ tem tamanho h : desse modo, $x_{i+1} - x_i = h = (b-a)/n$, $0 \leq i < n$
- Principais fórmulas de Newton-Cotes:
 - Regra dos trapézios
 - Regra de Simpson

CCI-22

- Definição
- Fórmulas de Newton-Cotes
 - Regra dos trapézios
 - Regra de Simpson
 - Fórmula geral
 - Estimativas de erros
- Método da Quadratura Adaptativa

Regra simples dos trapézios

- Consiste em aproximar f com um polinômio $p_1(x)$ de grau 1 no intervalo $[a,b]$, onde $x_0=a$ e $x_1=b$:



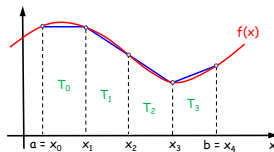
- Usando a fórmula de Lagrange para $p_1(x)$:

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

- Assim, $I_T(f) = h[f(x_0)+f(x_1)]/2$, que é a área do trapézio de altura $h = x_1-x_0$ e bases $f(x_0)$ e $f(x_1)$

Regra composta dos trapézios

- Consiste em dividir $[a,b]$ em n subintervalos de tamanho h , e em cada um deles aproximar f por uma reta (ou seja, por um polinômio de grau 1)
- Exemplo para $n=4$:



$$I_T(f) = T(h) = \sum_{0 \leq i < n} T_i(h)$$

$$T(h) = \sum_{0 \leq i < n} h[f(x_i)+f(x_{i+1})]/2$$

$$T(h) = h \left[\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + \dots + f(x_{n-1}) + \frac{f(x_n)}{2} \right]$$

Exemplo

- Calcular a integral de $f(x) = (6x-5)^{1/2}$ no intervalo $[1;9]$ através das regras simples e composta dos trapézios

- Regra simples dos trapézios:

- Sabemos que $x_0=1$, $x_1=9$, $f(x_0)=1$, $f(x_1)=7$, $h=8$

$$I_T(f) = h[f(x_0)+f(x_1)]/2 = 32$$

- Regra composta dos trapézios:

- Vamos considerar $n=8$ e $h=1$

- Tabela de valores:

x	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f(x)	1,00	2,65	3,61	4,36	5,00	5,57	6,08	6,56	7,00

$$T(1) = 1(0,5 + 2,65 + 3,61 + 4,36 + 5 + 5,57 + 6,08 + 6,56 + 3,5)$$

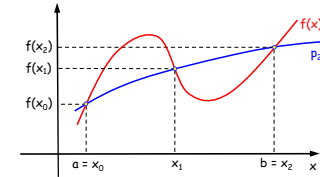
$$T(1) = 37,8$$

CCI-22

- Definição
- Fórmulas de Newton-Cotes
 - Regra dos trapézios
 - Regra de Simpson
 - Fórmula geral
 - Estimativas de erros
- Método da Quadratura Adaptativa

Regra simples de Simpson

- Consiste em aproximar f com um polinômio $p_2(x)$ de grau 2 em um intervalo $[a,b]$ com 3 pontos:



- Usando a fórmula de Lagrange para $p_2(x)$:

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

- Portanto:

$$I_5(f) = \int_{x_0}^{x_2} p_2(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} \left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2} f(x_0) - \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{h^2} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2h^2} f(x_2) \right] dx$$

Regra simples de Simpson

$$I_5(f) = \int_{x_0}^{x_2} p_2(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} \left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2} f(x_0) - \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{h^2} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2h^2} f(x_2) \right] dx$$

- Trocas de variáveis:

- $x - x_0 = z \cdot h \Rightarrow x = x_0 + z \cdot h$
- $dx = h \cdot dz$
- $x_1 = x_0 + h$
- $x - x_1 = x_0 + z \cdot h - (x_0 + h) = (z-1)h$
- Analogamente, $x - x_2 = (z-2)h$
- $x = x_0 \Rightarrow z = 0$; $x = x_1 \Rightarrow z = 1$; $x = x_2 \Rightarrow z = 2$

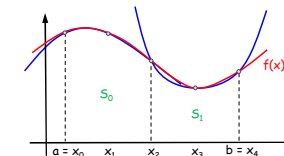
- Substituindo na integral acima:

$$I_5(f) = \frac{f(x_0)h}{2} \int_0^2 (z-1)(z-2) dz - f(x_1)h \int_0^2 z(z-2) dz + \frac{f(x_2)h}{2} \int_0^2 z(z-1) dz$$

$$I_5(f) = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$$

Regra composta de Simpson

- Consiste em generalizar a regra de Simpson para um intervalo com $n+1$ pontos (n deve ser par), espaçados entre si por uma distância h
- Em cada subintervalo, a função será aproximada através de um polinômio de grau 2
- Exemplo com 5 pontos (ou seja, $n=4$):



$$I_5(f) = S(h) = \sum S_i(h), \quad 0 \leq i < n/2$$

$$S(h) = \sum h [f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2})] / 3, \quad 0 \leq i < n/2 + 1$$

$$S(h) = \frac{h}{3} [f(x_0) + f(x_n) + 4(f(x_1) + f(x_3) + \dots + f(x_{n-1})) + 2(f(x_2) + f(x_4) + \dots + f(x_{n-2}))]$$

Exemplo

- Através das regras simples e composta de Simpson, calcular $\int_6^{10} \log x dx$
- Regra simples de Simpson: $I_s(f) = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$
 - $h = (10-6)/2 = 2$
 - $I_s(f) = 2(\log 6 + 4 \cdot \log 8 + \log 10)/3$
 - $I_s(f) = 3,5936742$
- Na regra composta de Simpson, vamos considerar $n=8$:
 - $h = (10-6)/8 = 0,5$
 - $I_s(f) = 0,5[\log 6 + \log 10 + 4 \cdot (\log 6,5 + \log 7,5 + \log 8,5 + \log 9,5) + 2(\log 7 + \log 8 + \log 9)]/3$
 - $I_s(f) = 3,5939136$

CCI-22

- Definição
- Fórmulas de Newton-Cotes
 - Regra dos trapézios
 - Regra de Simpson
 - Fórmula geral
 - Estimativas de erros
- Método da Quadratura Adaptativa

Fórmula geral de Newton-Cotes

- É possível encontrar a fórmula geral da integração de um polinômio interpolador $p_m(x)$ de grau m que aproxima a função $f(x)$
- Para isso, é preciso determinar $m+1$ pontos no intervalo $[a,b]$, espaçados entre si pela distância h
- Usando a fórmula de Lagrange:

$$\int_{x_0}^{x_m} f(x) dx \approx I(f) = \int_{x_0}^{x_m} p_m(x) dx = \int_{x_0}^{x_m} [f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + \dots + f(x_m)L_m(x)] dx$$

$$I(f) = f(x_0) \int_{x_0}^{x_m} L_0(x) dx + f(x_1) \int_{x_0}^{x_m} L_1(x) dx + \dots + f(x_m) \int_{x_0}^{x_m} L_m(x) dx$$

$$I(f) = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \dots + A_m f(x_m) \quad \text{Expressão da fórmula geral}$$

Alguns casos particulares

- Dados $m+1$ pontos da função $f(x)$ espaçados com distância h no intervalo $[a,b]$, onde $x_0=a$ e $x_m=b$, e supondo que $f(x)$ seja interpolada pelo polinômio $p_m(x)$ de grau m , indicamos abaixo algumas fórmulas de Newton-Cotes:

$$m = 1 \quad I(f) = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] \quad \text{Trapézio}$$

$$m = 2 \quad I(f) = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] \quad \text{Simpson 1/3}$$

$$m = 3 \quad I(f) = \frac{3h}{8}[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] \quad \text{Simpson 3/8}$$

$$m = 4 \quad I(f) = \frac{2h}{45}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$$

$$m = 5 \quad I(f) = \frac{5h}{288}[19f(x_0) + 75f(x_1) + 50f(x_2) + 50f(x_3) + 75f(x_4) + 19f(x_5)]$$

CCI-22

- Definição
- Fórmulas de Newton-Cotes
 - Regra dos trapézios
 - Regra de Simpson
 - Fórmula geral
 - Estimativas de erros
- Método da Quadratura Adaptativa

Estimativas de erros

- Já vimos que o erro da interpolação de $f(x)$ com um polinômio de grau m em $m+1$ pontos no intervalo $[x_0, x_m]$ é $E_m(x) = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_m)f^{(m+1)}(\xi)/(m+1)!$, $\forall x \in [x_0, x_m]$, onde $\xi \in (x_0, x_m)$
- Portanto:

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

$$\int_{x_0}^{x_m} f(x) dx = I(f) + \int_{x_0}^{x_m} E_m(x) dx$$

$$\int_{x_0}^{x_m} f(x) dx = I(f) + \int_{x_0}^{x_m} (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_m) \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!} dx$$

Erro na regra dos trapézios

- Na regra simples dos trapézios, o polinômio interpolador tem grau 1:

$$E_{Ts} = \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1) \frac{f''(\xi)}{2} dx \quad \text{onde } \xi \text{ é função de } x$$

$$E_{Ts} = \frac{1}{2} \int_{x_0}^{x_1} g(x) f''(\xi) dx \quad \text{onde } g(x) = (x - x_0)(x - x_1)$$

- Sabemos que $g(x) < 0, \forall x \in (x_0, x_1)$
- Se $f''(x)$ for contínua em $[x_0, x_1]$, existem $p \in \mathbf{R}$ e $P \in \mathbf{R}$ tais que $p \leq f''(x) \leq P$
- Portanto, $p.g(x) \geq g(x).f''(\xi) \geq P.g(x)$, pois $g(x) \leq 0$
- Logo:

$$P \underbrace{\int_{x_0}^{x_1} g(x) dx}_{< 0} \leq \int_{x_0}^{x_1} g(x) f''(\xi) dx \leq p \underbrace{\int_{x_0}^{x_1} g(x) dx}_{< 0} \quad \Leftrightarrow \quad p \leq \frac{\int_{x_0}^{x_1} g(x) f''(\xi) dx}{\int_{x_0}^{x_1} g(x) dx} \leq P$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{= A}$$

Erro na regra dos trapézios

- Da hipótese de $f''(x)$ ser contínua em $[x_0, x_1]$, e como $p \leq A \leq P$, então existe $c \in (x_0, x_1)$ tal que $f''(c) = A$, ou seja:

$$\int_{x_0}^{x_1} g(x) f''(\xi) dx = f''(c) \int_{x_0}^{x_1} g(x) dx$$

- Portanto:

$$E_{Ts} = \frac{1}{2} \int_{x_0}^{x_1} g(x) f''(\xi) dx = \frac{1}{2} f''(c) \int_{x_0}^{x_1} g(x) dx = -\frac{h^3}{12} f''(c) \quad \text{onde } c \in (x_0, x_1)$$

- No caso da regra composta dos trapézios:

$$E_{TC} = -\sum_{i=0}^{m-1} h^3 \frac{f''(c_i)}{12} \quad \text{onde } c_i \in (x_i, x_{i+1}), 0 \leq i < m$$

- Como supomos que $f''(x)$ é contínua em $[x_0, x_m]$, existe $k \in (x_0, x_m)$ tal que:

$$\sum_{i=0}^{m-1} f''(c_i) = m f''(k) \quad \Rightarrow \quad E_{TC} = -\frac{m h^3 f''(k)}{12}$$

Erro na regra de Simpson

- Na regra simples de Simpson, o polinômio interpolador tem grau 2
- Como os pontos são equidistantes entre si, vamos utilizar a forma de Newton-Gregory, mas estendendo-a até o terceiro grau:
 - $p_2(x) = f(x_0) + s\Delta f(x_0) + s(s-1)\Delta^2 f(x_0)/2 + s(s-1)(s-2)\Delta^3 f(x_0)/6$

Portanto:

$$I = \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} [p_2(x) + s(s-1)(s-2)(s-3)h^4 \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}] dx \quad \text{onde } x - x_i = (s-i)h$$

- $dx = h \cdot ds$, e os extremos da integral vão de 0 a 2:

$$I = h \int_0^2 [f(x_0) + \Delta f(x_0)s + \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2}s(s-1) + \frac{\Delta^3 f(x_0)}{6}s(s-1)(s-2) + \frac{f^{(4)}(\xi)}{24}s(s-1)(s-2)(s-3)] ds$$

- Através dos mesmos artifícios anteriores, podemos considerar $f^{(4)}(\xi)$ como constante no intervalo de integração:

$$I = h \left[sf(x_0) + \frac{s^2}{2} \Delta f(x_0) + \left(\frac{s^3}{6} - \frac{s^2}{4} \right) \Delta^2 f(x_0) + \left(\frac{s^4}{24} - \frac{s^3}{6} + \frac{s^2}{6} \right) \Delta^3 f(x_0) + \left(\frac{s^5}{120} - \frac{s^4}{16} + \frac{11s^3}{72} - \frac{s^2}{8} \right) f^{(4)}(\xi) h^4 \right]_0^2$$

Erro na regra de Simpson

- Calculando nos extremos:

$$I = h \left[2f(x_0) + 2\Delta f(x_0) + \frac{\Delta^2 f(x_0)}{3} + 0 \cdot \Delta^3 f(x_0) - \frac{1}{90} f^{(4)}(\xi) h^4 \right]$$

$$I = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{1}{90} f^{(4)}(\xi) h^5 \quad \Rightarrow \quad E_{ss} = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$$

- Esse resultado é muito interessante: mesmo usando um polinômio de grau 2, a regra simples de Simpson tem precisão até a terceira ordem
- No caso da regra composta de Simpson, é possível fazer uma estimativa do erro total somando-se os erros em cada um dos $m/2$ subintervalos e fazendo uma média da derivada

Portanto:

$$E_{sc} = -\frac{mh^5 f^{(4)}(\xi)}{180}$$

Resumo

Trapézio (simples): $E_{Ts} = -\frac{h^3}{12} f''(\xi) \quad \xi \in (x_0, x_1)$

Trapézio (composta): $E_{Tc} = -m \frac{h^3}{12} f''(\xi) = -(b-a) \frac{h^2}{12} f''(\xi) \quad \xi \in (x_0, x_m)$

Simpson 1/3 (simples): $E_{ss} = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi) \quad \xi \in (x_0, x_2)$

Simpson 1/3 (composta): $E_{sc} = -m \frac{h^5}{180} f^{(4)}(\xi) = -(b-a) \frac{h^4}{180} f^{(4)}(\xi) \quad \xi \in (x_0, x_m)$

Teorema geral do erro

- Se a função $f(x)$, contínua e com derivadas até ordem $m+2$ também contínuas no intervalo $[a, b]$, for interpolada por um polinômio de grau m , então o erro E_m na sua integração numérica será:

$$E_m = \frac{h^{m+2} f^{(m+2)}(\xi)}{(m+1)!} \int_0^m (u-1) \cdots (u-m) du \quad \text{para } m \text{ ímpar}$$

$$E_m = \frac{h^{m+3} f^{(m+2)}(\xi)}{(m+2)!} \int_0^m \left(u - \frac{m}{2}\right) (u-1) \cdots (u-m) du \quad \text{para } m \text{ par}$$

$$\xi \in [a, b]$$

- De modo geral, o erro tende a diminuir à medida que h diminui e m aumenta

Exemplo

- Cálculo da integração numérica de $\int_0^1 e^x dx$
- Sabe-se que o resultado exato é $e-1 \approx 1,7182818$

h	Trapézio	Simpson 1/3	Newton-Cotes com m=4
0,25	1,7272219	1,7183188	1,7408548
0,125	1,7205186	1,7192841	1,7182818
0,0625	1,7188411	1,7182820	1,7182818
0,03125	1,7184216	1,7182818	1,7182818

- Quanto mais baixa a ordem da fórmula utilizada, menor deverá ser o h para se atingir a precisão desejada

Outro exemplo

- Cálculo da integração numérica de $\int_0^{\pi/2} \cos x dx$
- Sabe-se que o resultado exato é $\sin \pi/2 - \sin 0 = 1$
- Valores obtidos usando apenas Newton-Cotes com m=4:

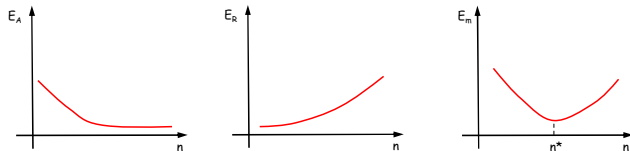
n	h	Resultado
4	0,3926990	0,9999908210
8	0,1963495	0,9999986890
16	0,0981748	0,9999987480
32	0,0490874	0,9999980830
64	0,0245437	0,9999973350

Intervalo com n+1 pontos

Resultado mais próximo

Composição do erro

- Na verdade, o erro E_m é composto por duas parcelas:
 - E_A (aproximação): depende do método utilizado
 - E_R (representação): proveniente dos cálculos no computador
- Experimentalmente, temos os seguintes resultados (valor do erro em função da quantidade de pontos no intervalo):



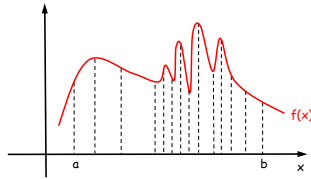
- Portanto, após um certo n^* , não é possível aumentar a exatidão do resultado...

CCI-22

- Definição
- Fórmulas de Newton-Cotes
 - Regra dos trapézios
 - Regra de Simpson
 - Fórmula geral
 - Estimativas de erros
- Método da Quadratura Adaptativa

Método da Quadratura Adaptativa

- Considere uma função $f(x)$ que não seja bem comportada:



- Para melhorar o resultado da integração numérica de $f(x)$ no intervalo $[a, b]$, convém que haja mais subdivisões nos trechos com curvas mais abruptas
- Supondo que $f(x)$ seja conhecida em mais valores de um subintervalo, o objetivo é estabelecer um método capaz de reconhecer a vantagem ou não de subdividi-lo

Critério para subdivisão

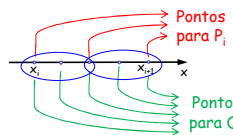
- Em $[x_i, x_{i+1}]$, seja P_i o resultado do cálculo da integração numérica, e Q_i o novo resultado quando esse subintervalo é bissecionado
- Seja I_i o valor exato da integral de $f(x)$ em $[x_i, x_{i+1}]$. Se $f(x)$ for interpolada nesse subintervalo por um polinômio de grau $p-2$, então é possível demonstrar que $I_i - Q_i = (I_i - P_i)/2^p$, ou seja, a bissecção do subintervalo diminui o erro em um fator 2^p
- Portanto:
 - $2^p(I_i - Q_i) = (I_i - P_i) \Leftrightarrow 2^p I_i - 2^p Q_i + Q_i = I_i - P_i + Q_i$
 - $-2^p I_i + 2^p Q_i - Q_i + I_i = P_i - Q_i \Leftrightarrow 2^p(Q_i - I_i) - (Q_i - I_i) = P_i - Q_i$
 - $Q_i - I_i = (P_i - Q_i)/(2^p - 1)$
- Isso estabelece uma relação entre o erro em Q_i e a diferença entre duas aproximações sucessivas
- Se desejamos manter um erro total ϵ na integração em $[a, b]$, então o erro em $[x_i, x_{i+1}]$ deve contribuir proporcionalmente:
 - $|Q_i - I_i| < \epsilon(x_{i+1} - x_i)/(b - a)$
 - $|P_i - Q_i| < \epsilon(2^p - 1)(x_{i+1} - x_i)/(b - a)$

Critério de parada

Exemplo

- Vejam como aplicar a quadratura adaptativa à regra de Simpson 1/3 no subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$ de $[a, b]$:

$$S(h) = \frac{h}{3} [f(x_0) + f(x_n) + 4(f(x_1) + f(x_3) + \dots + f(x_{n-1})) + 2(f(x_2) + f(x_4) + \dots + f(x_{n-2}))]$$



$$h_i = x_{i+1} - x_i$$

Regra composta

$$P_i = \frac{h}{6} [f(x_i) + 4f(x_i + \frac{h}{2}) + f(x_{i+1})]$$

$$Q_i = \frac{h}{12} [f(x_i) + f(x_i + h) + 4(f(x_i + \frac{h}{4}) + f(x_i + \frac{3h}{4})) + 2f(x_i + \frac{h}{2})]$$

$$\text{Critério de parada: } |P_i - Q_i| < 15h_i \epsilon / (b - a)$$

Quando não é satisfeito, ocorrem duas chamadas recursivas:
em $[x_i, x_i + h_i/2]$ e em $[x_i + h_i/2, x_{i+1}]$