CCI-22

Prof. Celso HIRATA

Sala 116 Tel. 347 5987

E mail : hirata@comp.ita.br

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Departamento de Computação Científica

Divisão de Ciência da Computação

14 de dezembro de 2007

Roteiro

1. **Integração Numérica**
   - Introdução
   - Fórmulas de Newton-Cotes
   - Método da Quadratura Adaptiva

Roteiro

1 **Integração Numérica**

- Introdução
- Fórmulas de Newton-Cotes
- Método da Quadratura Adaptiva

Introdução

- A idéia básica da integração numérica é a substituição da função $f(x)$ por um polinômio que a aproxime razoavelmente no intervalo $[a, b]$.

Assim o problema seria resolvido pela integração desse polinômio. O resultado aproximado é da forma:

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

com $x_i \in [a, b]$, $i = 0, 1, \ldots, n$, onde os A_i são coeficientes a se determinar.

Roteiro

1 **Integração Numérica**

- Introdução
- Fórmulas de Newton-Cotes
- Método da Quadratura Adaptiva

Fórmulas de Newton-Cotes

- Nas fórmulas de Newton-Cotes usa-se como função aproximada, o polinômio interpolante em pontos de $[a, b]$ igualmente espaçados. Consideremos a partição do intervalo $[a, b]$ em subintervalos de comprimento h:

$$h = \frac{a-b}{n} = x_{i+1} - x_i \quad i = 0, 1, \ldots, n-1$$

- As fórmulas fechadas de Newton-Cotes são fórmulas de integração do tipo:

$$x_0 = a, x_n = b$$

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

Regra do Retângulo

- Intervalo $[a, b]$ dividido em sub-intervalos $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$, com $x_0 = a$, $x_n = b$, e $h_i = x_{i+1} - x_i$.
- Seja f uma função contínua cuja integral não é conhecida:

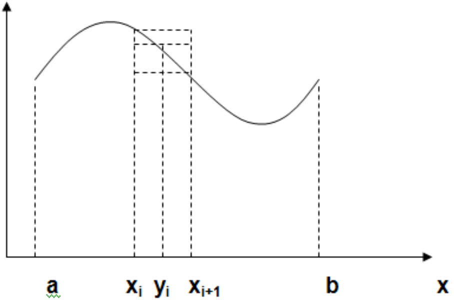
Temos pelo menos 3 formas para calcular a área do retângulo entre $[x_i, x_{i+1}]$:

- $f(x_i).h_i$;
- $f(x_{i+1}).h_i$;
- $f(y_i).h_i$, $y_i \in [x_i, x_{i+1}]$, usualmente, $y_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$.

Então temos que $I(f) \approx \int_a^b f(x)dx$, onde $I(f) = \sum_{i=0}^{n-1} I_i$ e $I_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$.

A fórmula simples é dada quando $n = 1$:

$$I(f) \approx \begin{cases} f(a)(b-a) & \text{ou} \\ f(b)(b-a) & \text{ou} \\ f(y_m)(b-a) & , y_m = \frac{b+a}{2} \end{cases}$$



A fórmula composta será:

$$R(h_i) = \begin{cases} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)h_i & \text{ou} \\ \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1})h_i & \text{ou} \\ \sum_{i=0}^{n-1} f(y_i)h_i & ,y_i = \frac{x_i+x_{i+1}}{2} \end{cases}$$

,onde $h_i = x_{i+1} - x_i$.

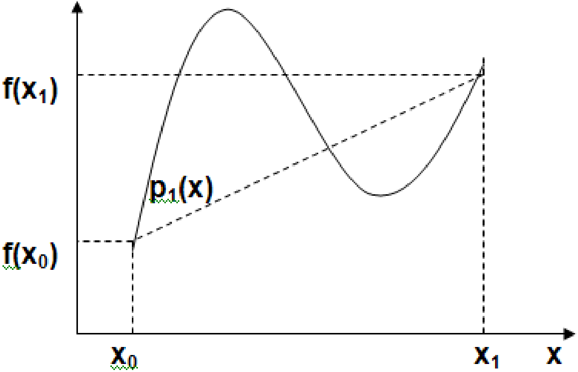
- Se os sub-intervalos forem de mesmo tamanho h, temos:

$$R(h) = h[f(x_0) + f(x_1) + \ldots + f(x_{n-1})] = h.\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)$$

$$R(h) = h[f(x_1) + f(x_2) + \ldots + f(x_n)] = h.\sum_{i=1}^{n} f(x_i)$$

$$R(h) = h[f(y_0) + f(y_1) + \ldots + f(y_{n-1})] = h.\sum_{i=0}^{n-1} f(y_i)$$

Regra do Trapézio



Se usarmos a fórmula de Lagrange para expressar o polinômio $p_1(x)$, que interpola $f(x)$ em x_0 e x_1 temos:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_{a=x_0}^{b=x_1} p_1(x)dx =$$

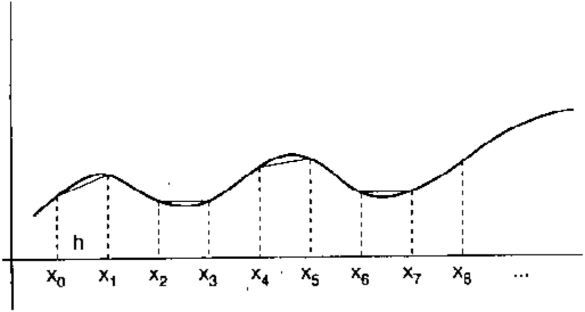
$$= \int_{x_0}^{x_1} [\frac{x-x_1}{-h} f(x_0) + \frac{x-x_0}{h} f(x_1)]dx =$$

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

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

,que é a área de um trapézio de altura $h = x_1 - x_0$ e bases $f(x_0)$ e $f(x_1)$.

- Podemos dividir o intervalo $[a, b]$ em n sub-intervalos e calcular a integral de cada sub-intervalo e somar esses resultados:



Regra do Trapézio Composta

$$T(h) = \sum_{i=0}^{n-1} T_i(h) = \sum_{i=0}^{n-1} [f(x_i) + f(x_{i+1})]\frac{h}{2}$$

$$T(h) = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] + [f(x_1) + f(x_2)] + \ldots + [f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

$$T(h) = h[\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + \ldots + \frac{f(x_n)}{2}]$$

- Exemplo: Calcular a integral de $f(x) = \sqrt{6x-5}$ no intervalo $[1,9]$ pela Fórmula do Trapézio, simples e composta:

Para $x = 1, f(x) = 1$ e para $x = 9, f(x) = 7$.

- Simples:

$I = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)]$, então:

$\int_1^9 \sqrt{6x-5}dx \approx \frac{9-1}{2}[f(1) + f(9)] = 4[1+7] = 32$.

- Composta:

Calcular a integral no intervalo $[1, 9]$ com $n = 8$:

Podemos construir esta tabela:

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

Sabendo-se que $T(h) = h[\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + \ldots + \frac{f(x_n)}{2}]$, temos:

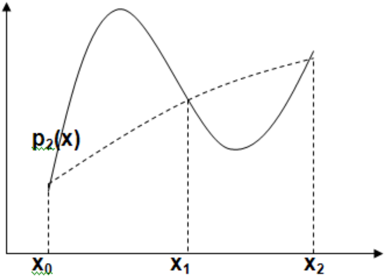
$$T(1) = 1[\frac{1}{2} + 2 \times 2,65 + 2 \times 3,61 + 2 \times 4,36 + 2 \times 5,00 + 2 \times 5,57 + \\ +2 \times 6,08 + 2 \times 6,56 + \frac{7}{2}] = 37,8$$

Regra de Simpson

Novamente podemos usar a fórmula de Lagrange para estabelecer a fórmula de integração resultante da aproximação de $f(x)$ por um polinômio de grau 2.

- Seja $p_2(x)$ o polinômio que interpola $f(x)$ nos pontos

$$x_0 = a, \quad x_1 = x_0 + h, \quad x_2 = x_0 + 2h = b$$



Da fórmula de Lagrange:

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

Assim:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx =$$

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

Fazendo uma mudança de variável:

$$x - x_0 = zh$$

$$dx = hdz$$

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

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

Assim, a integral fica:

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

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

Regra de Simpson Composta

Fazemos $[a, b] = [x_0, x_m]$, com $x_0, x_1, \ldots, x_m$ igualmente espaçadas,

$h = x_{i+1} - x_i$ e m é par.

$$\int_{a=x_0}^{b=x_m} f(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] + [f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)] +$$

$$+ \ldots + [f(x_{m-2}) + 4f(x_{m-2}) + f(x_m)] =$$

$$= \frac{h}{3}[f(x_0) + f(x_m)] + 4[f(x_1) + f(x_3) + \ldots + f(x_{m-1})] +$$

$$+2[f(x_2) + f(x_4) + \ldots + f(x_{m-2})]$$

- Exemplo: $\int_6^{10} \log x dx$:

Pela regra simples, temos $\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$.

Resolvendo o problema: $h = \frac{b-a}{2} = \frac{10-6}{2} = 2$, e:

- $\log 6 = 0,77815125$
- $\log 8 = 0,90308999$
- $\log 10 = 1,0$

Então $\int_6^{10} \log x dx \approx \frac{2}{3}[0,77815125 + 4 \times 0,90308999 + 1,0] = 3,5936742$

Pela regra composta, vamos tomar $m = 8$:

$h = \frac{10-6}{8} = 0,5$, e então:

$\int_6^{10} \log x dx \approx \frac{0{,}5}{3}[\log(6) + \log(10) + 4[\log(6,5) + \log(7,5) + \log(8,5) + \log(9,5)] + 2[\log(7) + \log(8) + \log(9)]] \approx$

≈ 3.5939136.

Para um polinômio interpolador de grau n, temos:

$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_n} p_n(x)dx =$ (usando a forma de Lagrange para $p_n(x)$):

$$
\begin{aligned}
&= \int_{x_0}^{x_n}[f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + \ldots + f(x_n)L_n(x)]dx = \\
&= f(x_0)[\int_{x_0}^{x_n} L_0(x)dx] + f(x_1)[\int_{x_0}^{x_n} L_1(x)dx] + \ldots + f(x_n)[\int_{x_0}^{x_n} L_n(x)dx] = \\
&= A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \ldots + A_n f(x_n) = \\
&= \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)
\end{aligned}
$$

onde $A_i = \int_{x_0}^{x_n} L_i(x)dx$.

Fórmula Geral de Newton-Cotes

$$m = 1, \int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] \quad \text{Trapézio}$$

$$m = 2, \int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] \quad \text{Simpson 1/3}$$

$$m = 3, \int_a^b f(x)dx = \frac{3h}{8}[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] \quad \text{Simpson 3/8}$$

$$m = 4, \int_a^b f(x)dx = \frac{2h}{45}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$$

$$m = 5, \int_a^b f(x)dx =$$

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

Estudo de Erro na Integração

O erro de truncamento na interpolação é dado por:

$E_n(x) = f(x) - p(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_n)\frac{f^{n+1}(\xi_k)}{(n+1)!}$

Então $\int_a^b f(x)dx = \int_a^b p_n(x)dx + \int_a^b E_n(x)dx =$

$= \int_a^b [p_n(x) + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_n)\frac{f^{n+1}(\xi_k)}{(n+1)!}]dx$

Trapézio Simples

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b [p_1(x) + (x - x_0)(x - x_1)\tfrac{f''(\xi_k)}{(n+1)!}]dx, \quad \xi_k \in (x_0, x_1)$$

$$= I_T + \int_{x_0}^{x_1} [(x - x_0)(x - x_1)\tfrac{f''(\xi_k)}{2}]dx \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E_{TS} = -\tfrac{h^3}{12} f''(c), \quad c \in (x_0, x_1).$$

Trapézio Composta

$\sum_{i=0}^{m-1} f''(c_i) = mf''(\xi) \Rightarrow$

$\Rightarrow E_{TC} = -m\frac{h^3}{12}f''(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_n)$.

1/3 Simpson Simples

$$E_S = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(c), \quad c \in (x_0, x_2).$$

$$E_{SC} = -m \frac{h^5}{180} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_m).$$

Observação

Temos que $E_{TC} = -m\frac{h^3}{12}f''(\xi)$.

Sendo $f''(x)$ contínua em $[a,b]$ então $\exists M_2 = max|f''(x)|, \quad x \in [a,b]$. Logo:

$|E_{TC}| \leq m\frac{h^3}{12}M_2 \Rightarrow |E_{TC}| \leq (b-a)\frac{h^2}{12}M_2$

pois $m = \frac{b-a}{h}$.

Da mesma forma, temos $|E_{SC}| = m\frac{h^5}{180}f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_m)$.

Sabemos analogamente que $\exists M_4 = max|f^{(4)}(x)|, \quad x \in [x_0, x_m]$.

Assim, $|E_{SC}| \leq m\frac{h^5}{180}M_4 \Rightarrow |E_{SC}| \leq (b-a)\frac{h^4}{180}M_4$.

- Exemplo: Seja $\int_0^1 e^x dx$. Calcule uma aproximação para a integral usando a regra 1/3 de Simpson com $m = 10$. Estime também o erro cometido.

Resolvendo,

$\int_0^1 e^x dx = \frac{0,1}{3}(e^0 + 4e^{0,1} + 2e^{0,2} + 4e^{0,3} + \ldots + 2e^{0,8} + 4e^{0,9} + e^1) = 1,7182878$

Determinando o erro, $E_{SC} = m\frac{h^5}{180}M_4$, então,

$E_{SC} \leq \frac{10 \times 0,1^5}{180}|e^1| = 1,51016 \times 10^{-6}$.

Fórmula Geral

$$E_{m+1} = K_{m+1}\frac{h^{p+2}}{(p+1)!}f^{(p+1)}(\xi) \qquad x_0 < \xi < x_m$$

$$\text{onde } p = \begin{cases} m+1 & \text{se } m \text{ é par} \\ m & \text{se } m \text{ é ímpar} \end{cases}$$

$$K_{m+1} = \int_0^m x^{p+1}dx - \sum_{k=1}^{m} c_k k^{p+1}$$

c_k: coeficientes dos termos $hf(x)$ da fórmula de Newton-Cotes.

- Exemplo: Regra Simpson Simples:

$\frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) \quad m = 2,$

$c_1 = \frac{4}{3}, \quad c_2 = \frac{1}{3}, \quad p = 3,$

$K_3 = \int_0^2 x^4 dx - \frac{4}{3}1^4 - \frac{1}{3}2^4 = -\frac{4}{15}$

Assim: $E_3 = -\frac{4h^5}{15 \times 4!} f^{(4)}(\xi) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi), \quad x_0 < \xi < x_2.$

- Exemplo: Calcular $\int_0^1 e^x dx$ cujo valor exato é $e - 1$ pelas regras do Trapézio, Simpson e Newton-Cotes ($n = 4$).

Solucionando, temos que $e - 1 = 1,7182818$. Pelas regras indicadas acima, temos:

h	Trapézio	Simpson	Newton-Cotes, $n = 4$
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	1,7182188	1,7182818

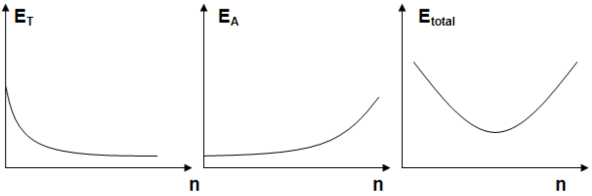
Observe que, a medida que h diminui, o erro também diminui!

- Exemplo: $\int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos x dx$, Newton-Cotes:

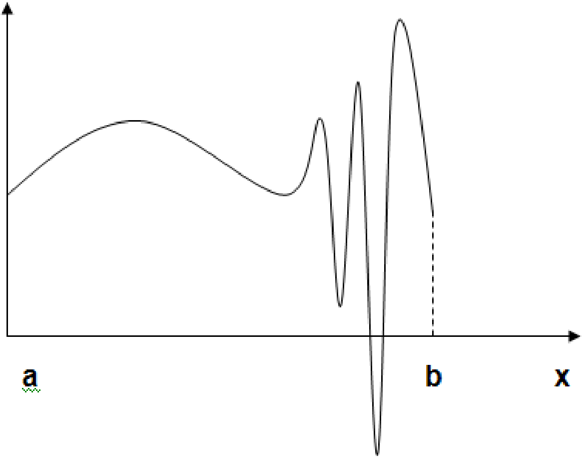
n	h	$m = 4$
4	0,3926990	0,9999908210
8	0,1963495	0,9999986890
16	0,0981748	0,9999987480 (*)
32	0,0490874	0,9999980830
64	0,0245437	0,9999973350

O erro total é dado pela soma do erro de truncamento com o erro de arredondamento:

$$\int_a^b f(x)dx = I + E_T + E_A$$



Observe que para funções do tipo abaixo, para se calcular a integral, em alguns trechos, é necessário fazer mais subdivisões do que em outros.



Roteiro

Método da Quadratura Adaptiva

- Calcular $\int_a^b f(x)dx$ usando mais subdivisões quando necessárias,

considerando que devemos ter um erro total menor que ε.

Vamos dividir o intervalo e calcular a integral: $n \rightarrow P$, $2n \rightarrow Q$.

É necessária uma estratégia para decidir a parada do processo de subdivisão.

Para uma dada subdivisão:

- P_i: regra simples entre $[x_i, x_{i+1}]$;
- Q_i: regra composta entre $[x_i, x_{i+1}]$ subdividido em 2.

Como comparar P_i e Q_i de modo que $|\int_a^b f(x)dx - Q| < \varepsilon$, e dessa forma não subdividamos mais o intervalo $[x_i, x_{i+1}]$?

Sejam:

- I_i: valor da integral entre $[x_i, x_{i+1}]$;
- P_i: integral aproximada entre $[x_i, x_{i+1}]$ com n subdivisões;
- Q_i: integral aproximada entre $[x_i, x_{i+1}]$ com $2n$ subdivisões;

Pode-se mostrar que:

$$I_i - Q_i = \frac{1}{2^p}(I_i - P_i)$$

Ou seja, bisseccionando o subintervalo, o erro diminui por um fator de 2^p, onde p é o grau do polinômio interpolante mais um, i.e., gr(polinônio) = $p-1$.

$$2^p(I_i - Q_i) = (I_i - P_i)$$

$$2^pI_i - 2^pQ_i + Q_i = I_i - P_i + Q_i$$

$$2^pI_i - 2^pQ_i + Q_i - I_i = -P_i + Q_i$$

$$-2^pI_i + 2^pQ_i - Q_i + I_i = P_i - Q_i$$

$$2^p(Q_i - I_i) - (Q_i - I_i) = P_i - Q_i$$

$$(2^p - 1)(Q_i - I_i) = P_i - Q_i$$

$$Q_i - I_i = \frac{P_i - Q_i}{2^p - 1}$$

O erro em Q_i é aproximadamente $\frac{1}{2^p-1}$ vezes a diferença entre duas aproximações sucessivas.

Como desejamos manter o erro total menor que ε, devemos ter que o erro no subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$ deve contribuir proporcionalmente no intervalor $[a, b]$, ou seja:

$$|Q_i - I_i| < \frac{\varepsilon}{\frac{b-a}{h_i}}$$

Rearranjando, temos:

$$|P_i - Q_i| < \frac{2^p - 1}{b - a} h_i \varepsilon$$

que é o critério de parada para subdivisão.

Simpson Adaptativa Recursiva

$$h = \frac{b-a}{4}$$

$$P = \frac{h}{3}[f(a) + 4f(a+2h) + f(b)]$$

$$Q = \frac{h}{3}[f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + f(b)]$$

Critério de parada:

$$|P - Q| \leq \frac{15(b-a)}{b-a}\varepsilon \quad h_i = b - a \text{ (primeira subdivisão)}$$

Função Recursiva

```
function adaptaSimp(a, b, integralAnterior, eps)
h = (b-a) / 4
integralEsq = (h/3) * (f(a) + 4*f(a+h) + f(a+2h))
integralDir = (h/3)* (f(a+2h) + 4*f(a+3h) + f(b))
integral = integralEsq + integralDir
erro = (integral - integralAnterior) - 15
se abs(erro) < eps então
   adaptaSimp = integral + erro
senão
   prof = prof + 1
```