CCI-22

Matemática Computacional

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

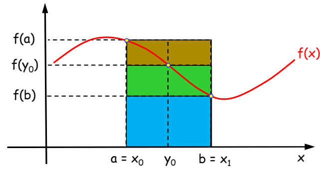
- Definição
- Fórmulas de Newton-Cotes
  - Regra dos trapézios
  - Regra de Simpson
  - Fórmula geral
  - Estimativas de erros
- Método da Quadratura Adaptativa

Definição

- Em determinadas situações, pode ser muito díficil - 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:



$$I(f) = \begin{cases} f(a)(b-a) & \text{ou} \\ f(b)(b-a) & \text{ou} \\ f(y_0)(b-a), & \text{onde } y_0 = (a+b)/2 \end{cases}$$

Supondo que seja disponível...

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

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

- 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

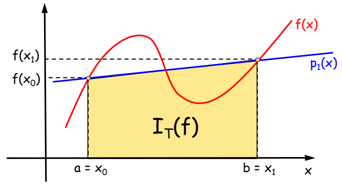
- Nas *Fórmulas de Newton-Cotes*, f(x) é interpolada por um polinômio em n+1 pontos de $[a=x_0,b=x_n]$, igualmente espaçados
- Há outros métodos para o caso em que os pontos não são equidistantes entre si, mas não os estudaremos neste curso
- Cada subintervalo $[x_i,x_{i+1}]$ tem tamanho h: desse modo,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



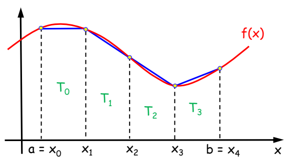
- Usando a fórmula de Lagrange para $p_1(x)$:

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

- 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:



$I_T(f) = T(h) = \Sigma T_i(h)$, $0 \le i < n$

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

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

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

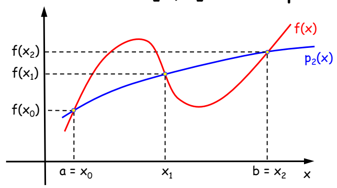
  - T(1) = 1(0,5 + 2,65 + 3,61 + 4,36 + 5 + 5,57 + 6,08 + 6,56 + 3,5)
  - T(1) = 37,8

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:

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

Regra simples de Simpson

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

- Trocas de variáveis:
  - $x - x_0 = z.h \Rightarrow x = x_0 + z.h$
  - $dx = h.dz$
  - $x_1 = x_0 + h$
  - $x - x_1 = x_0 + z.h - (x_0 + h) = (z-1)h$
  - Analogamente, $x - x_2 = (z-2)h$
  - $x = x_0 \Rightarrow z = 0$; $x = x_1 \Rightarrow z = 1$; $x = x_2 \Rightarrow z = 2$

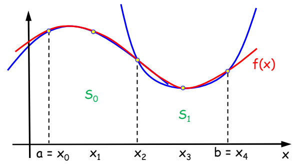
- Substituindo na integral acima:

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

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

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):



$I_S(f) = S(h) = \Sigma S_i(h)$, $0 \leq i < n/2$

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

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

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.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.(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:

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

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

$$I(f) = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \cdots + A_m f(x_m)$$

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	$I(f) = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)]$	Trapézio
m = 2	$I(f) = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$	Simpson 1/3
m = 3	$I(f) = \frac{3h}{8}[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)]$	Simpson 3/8
m = 4	$I(f) = \frac{2h}{45}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$	
m = 5	$I(f) = \frac{5h}{288}[19f(x_0) + 75f(x_1) + 50f(x_2) + 50f(x_3) + 75f(x_4) + 19f(x_5)]$	

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 $E_m(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_m)f^{(m+1)}(\xi)/(m+1)!$, $\forall x \in [x_0,x_m]$, onde $\xi \in (x_0,x_m)$
- Portanto:

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

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

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

Erro na regra dos trapézios

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

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

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

- 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:

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

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:

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

- No caso da regra composta dos trapézios:

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

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

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

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:

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

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

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

- 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:

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

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

- 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):	$E_{TS} = -\frac{h^3}{12}f''(\xi)$	$\xi \in (x_0,x_1)$
Trapézio (composta):	$E_{TC} = -m\frac{h^3}{12}f''(\xi) = -(b-a)\frac{h^2}{12}f''(\xi)$	$\xi \in (x_0,x_m)$
Simpson 1/3 (simples):	$E_{SS} = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)$	$\xi \in (x_0,x_2)$
Simpson 1/3 (composta):	$E_{SC} = -m\frac{h^5}{180}f^{(4)}(\xi) = -(b-a)\frac{h^4}{180}f^{(4)}(\xi)$	$\xi \in (x_0,x_m)$

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:

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

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

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

- 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 ≈ 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 sen π/2 – sen 0 = 1
- Valores obtidos usando apenas Newton-Cotes com m=4:

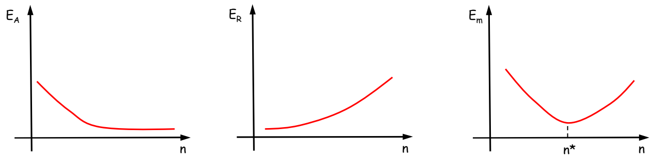
n	h	Resultado
4	0,3926990	0,9999908210
8	0,1963495	0,9999986890
16	0,0981748	0,9999987480
32	0,0490874	0,9999980830
64	0,0245437	0,9999973350

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):



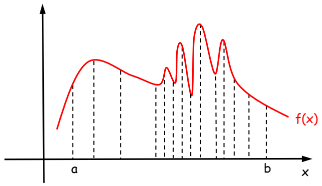
- Portanto, após um certo n*, não é possível aumentar a exatidão do resultado...

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

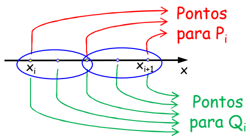
- Em $[x_i,x_{i+1}]$, seja P_i o resultado do cálculo da integração numérica, e Q_i o novo resultado quando esse subintervalo é bisseccionado
- Seja I_i o valor exato da integral de f(x) em $[x_i,x_{i+1}]$. Se f(x) for interpolada nesse subintervalo por um polinômio de grau p-2, então é possível demonstrar 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:
  - $2^p(I_i - Q_i) = (I_i - P_i) \Leftrightarrow 2^pI_i - 2^pQ_i + Q_i = I_i - P_i + Q_i$
  - $-2^pI_i + 2^pQ_i - Q_i + I_i = P_i - Q_i \Leftrightarrow 2^p(Q_i - I_i) - (Q_i - I_i) = P_i - Q_i$
  - $Q_i - I_i = (P_i - Q_i)/(2^p - 1)$
- 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:
  - $|Q_i - I_i| < \varepsilon(x_{i+1} - x_i)/(b - a)$
  - $|P_i - Q_i| < \varepsilon(2^p - 1)(x_{i+1} - x_i)/(b - a)$ — Critério de parada

Exemplo

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

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

Regra composta



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

$$P_i = \frac{h_i}{6}[f(x_i) + 4f(x_i + \frac{h_i}{2}) + f(x_i + h_i)]$$

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

Critério de parada: $|P_i - Q_i| < 15h_i\varepsilon/(b - a)$

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