Integração Numérica

Marcone Jamilson Freitas Souza, Departamento de Computação, Instituto de Ciências Exatas e Biológicas, Universidade Federal de Ouro Preto, 35400-000 Ouro Preto, MG, Brasil. Homepage: http://www.decom.ufop.br/prof/marcone, E-mail: marcone@iceb.ufop.br

Este capítulo tem por objetivo apresentar métodos para resolver numericamente uma integral.

1 Introdução

Sabemos, pelo Teorema Fundamental do Cálculo Diferencial e Integral, que:

$$\int_a^b f(x) = F(b) - F(a) \tag{1.1}$$

onde $F(x)$ é uma primitiva de $f(x)$, isto é, $F'(x) = f(x)$.

Exemplo: Para calcular $I = \int_1^3 \ln(x)dx$, primeiramente determinamos a primitiva de $f(x) = \ln(x)$. Isto pode ser feito utilizando-se a técnica de integração por partes, ou seja, aplicando-se a fórmula $\int udv = uv - \int vdu$.

No caso considerado, tem-se:

$u = \ln(x) \Longrightarrow du = \frac{1}{x}$

$dv = dx \Longrightarrow dv = \int dx \longrightarrow v = x$

Logo, $\int \underbrace{ln(x)}_{u} \underbrace{dx}_{dv} = \underbrace{x\ln(x)}_{uv} - \int \underbrace{x.\frac{1}{x}dx}_{vdu} = x\ln(x) - \int dx = xln(x) - x.$

Desta forma, $I = \int_1^3 \ln(x)dx = x\ln(x) - x|_1^3 = \underbrace{3\ln(3)}_{F(3)} - \underbrace{1\ln(1)}_{F(1)} = 1,2958$

Na determinação numérica de uma integral, várias situações podem ocorrer:

(i) A determinação da primitiva F pode ser "difícil";

(ii) A função f a integrar pode não possuir uma primitiva F. Por exemplo, o cálculo da integral $\int_a^b e^{-x^2}dx$ não é possível pela aplicação do Teorema Fundamental do Cálculo, uma vez que não existe função $F(x)$ cuja derivada seja $f(x) = e^{-x^2}$;

(iii) A função f pode ser conhecida apenas pelos seus pontos $(x_i, f(x_i))$ e não pela sua expressão analítica.

Em situações como as apresentadas anteriormente se justifica a aplicação de métodos numéricos.

2 Fórmulas de Newton-Côtes

A idéia dessa família de procedimentos é dividir o intervalo $[a, b]$ em n subintervalos de mesmo espaçamento $h = (b-a)/n$ e substituir f pelo polinômio interpolador de Gregory-Newton de grau n. Assim,

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x)dx \tag{2.2}$$

sendo $P_n(x) = y_0 + z\Delta y_0 + z(z-1)\frac{\Delta^2 y_0}{2!} + \cdots + \frac{z(z-1)...(z-(n-1))\Delta^n y_0}{n!}$ e $z = \frac{x-x_0}{h}$.

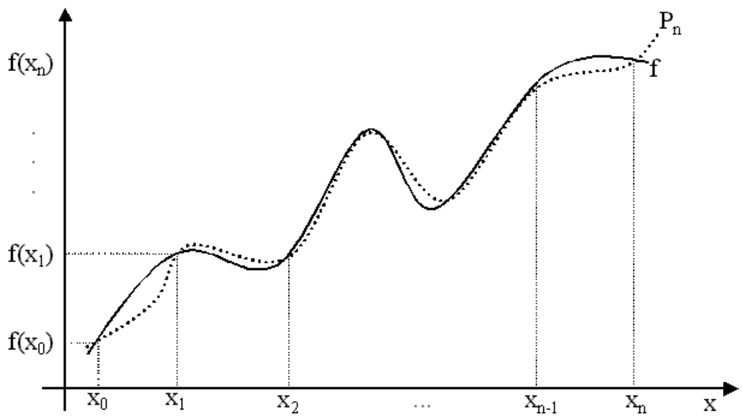

Figura 1: Polinômio interpolador $P_n(x)$ de uma função f

Para calcular o erro cometido na integração (E_i) basta integrar o erro da interpolação (E_T).

De fato, como $E_T(x) = f(x) - P_n(x)$ então $f(x) = P_n(x) + E_T(x)$ e, desta forma:

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

Logo, o erro cometido na integração vale:

$$E_i = \int_a^b E_T(x)dx \tag{2.3}$$

onde $E_T(x) = h^{n+1}z(z-1)(z-2)...(z-n)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$ para algum $\xi \in [a, b]$.

2.1 Regra dos Trapézios

2.1.1 Fórmula simples

A idéia desse procedimento é substituir a função f a integrar pelo polinômio interpolador de Gregory-Newton de grau $n = 1$, ou seja, por $P_1(x) = y_0 + z\Delta y_0$. Tem-se, portanto:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_1(x)dx = \int_a^b (y_0 + z\Delta y_0)dx$$

Tendo em vista a relação entre as variáveis z e x e que $a = x_0$ e $b = x_1$, então a expressão anterior admite a seguinte simplificação:

Como $z = \frac{x-x_0}{h}$ então $dz = \frac{1}{h}dx$, isto é, $dx = hdz$.

Para $x = x_0 \Longrightarrow z = 0$

Para $x = x_1 \Longrightarrow z = \frac{x_1-x_0}{h} = \frac{h}{h} = 1$

$\therefore\ I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1}(y_0 + z\Delta y_0)dx = \int_0^1(y_0 + z\Delta y_0)hdz = h[y_oz + \frac{z^2}{2}\Delta y_0]_0^1 = h[y_0 + \frac{1}{2}\Delta y_0] = h[y_0 + \frac{1}{2}(y_1 - y_0)] = \frac{h}{2}\,[y_0 + y_1]$

Portanto, ao se substituir f por $P_1(x)$ obtemos para a integral a seguinte aproximação:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}\,[y_0 + y_1] \tag{2.4}$$

Geometricamente, a fórmula anterior indica a área da figura compreendida entre as retas $x = a$, $x = b$, o eixo Ox e o polinômio interpolador $P_1(x)$, isto é, a área de um trapézio. Como sabemos, a área de um trapézio vale a metade do produto da altura h pela soma da base menor (no nosso caso, y_0) com a base maior (no nosso caso, y_1).

2.1.2 Erro da fórmula simples

Fazendo $n = 1$ na fórmula do erro dada por 2.3, temos:

$E_i = \int_a^b E_T(x)dx = \int_a^b h^2z(z-1)\frac{f"(\xi)}{2!}dx = \int_0^1 h^2z(z-1)\frac{f"(\xi)}{2}hdz = h^3\frac{f"(\xi)}{2}\int_0^1(z^2 - z)dz = h^3\frac{f"(\xi)}{2}[\frac{z^3}{3} - \frac{z^2}{2}]_0^1 = h^3\frac{f"(\xi)}{2}[\frac{1}{3} - \frac{1}{2}] = -\frac{h^3f"(\xi)}{12}$

Logo, o erro cometido ao se substituir f por um polinômio interpolador de grau 1 é dado pela seguinte fórmula:

$$E_i = -\frac{h^3f"(\xi)}{12} \tag{2.5}$$

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

A fórmula 2.5 tem aplicabilidade prática restrita, uma vez que a determinação de ξ não é uma tarefa trivial. Em virtude disso, na prática é comum obter-se um limitante para o erro da integração, isto é:

$$|E_i| = |-\frac{h^3f"(\xi)}{12}| \leq \frac{h^3M_2}{12} \tag{2.6}$$

sendo $M_2 = \max\limits_{a\leq x\leq b}|f"(x)|$.

2.1.3 Fórmula composta

A idéia desse procedimento é dividir o intervalo $[a, b]$ em n subintervalos de mesmo espaçamento $h = \frac{b-a}{n}$ e aplicar a cada subintervalo $[x_i, x_{i+1}]\ \forall i = 0, 1, \cdots, n-1$ a fórmula simples da Regra dos Trapézios.

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[y_0 + y_1] + \frac{h}{2}[y_1 + y_2] + \cdots + \frac{h}{2}[y_{n-1} + y_n]$$

A fórmula composta da Regra dos Trapézios é, portanto:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[y_0 + 2y_1 + 2y_2 + \cdots + 2y_{n-1} + y_n] \tag{2.7}$$

2.1.4 Erro da fórmula composta

O erro E_{Trap} da fórmula composta da Regra dos Trapézios é a soma dos erros E_i cometidos em cada um dos subintervalos $[x_i, x_{i+1}]$, isto é:

$$E_{\text{Trap}} = E_1 + E_2 + \cdots + E_n$$

onde $E_i = -\frac{h^3 f"(\xi_i)}{12} \quad \forall \xi_i \in [x_{i-1}, x_i], \text{com } i = 1, \cdots, n-1, n.$

Um limitante do erro pode, então, ser determinado:

$$|E_{\text{Trap}}| \leq |E_1| + |E_2| + \cdots + |E_n|$$

sendo $|E_i| \leq |\frac{h^3 M_i}{12}|$ e $M_i = \max\limits_{x \in [x_{i-1}, x_i]} |f"(x)|$.

Seja $M_2 = \max\limits_{a \leq x \leq b} |f"(x)|$. Então $|E_i| \leq |\frac{h^3 M_i}{12}| \leq |\frac{h^3 M_2}{12}|$.

Assim, $|E_{\text{Trap}}| \leq n \frac{h^3}{12} M_2$. Como $h = \frac{b-a}{n}$, vem:

$$|E_{\text{Trap}}| \leq n \frac{(b-a)^3}{n^3} \frac{M_2}{12}.$$

Finalmente, tem-se a fórmula para o erro máximo cometido pela aplicação da fórmula composta da Regra dos Trapézios:

$$|E_{\text{Trap}}| \leq \frac{(b-a)^3 M_2}{12n^2} \tag{2.8}$$

sendo $M_2 = \max\limits_{a \leq x \leq b} |f"(x)|$.

Exemplo:

Calcule $\int_1^3 \ln(x) dx$:

(a) Pela fórmula composta da Regra dos Trapézios com $n = 10$;

(b) Avalie o erro máximo cometido no item anterior;

(c) Determine o número mínimo de subintervalos necessários para que se obtenha o valor da integral com erro inferior a 0,001.

Solução:

(a) Cálculo da Integral

$h = \frac{b-a}{n} = \frac{3-1}{10} = 0,2$

i	x_i	$y_i = \ln(x_i)$	c_i
0	1,0	0,0000	1
1	1,2	0,1823	2
2	1,4	0,3365	2
3	1,6	0,4700	2
4	1,8	0,5878	2
5	2,0	0,6931	2
6	2,2	0,7885	2
7	2,4	0,8755	2
8	2,6	0,9555	2
9	2,8	1,0296	2
10	3,0	1,0986	1

$I = \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n} c_i y_i = 0,1\sum_{i=0}^{10} c_i y_i = 0,1 \times 12,9362 = 1,2936$

(b) Avaliação do erro

Sabemos que $|E| \leq \frac{(b-a)^3 M_2}{12n^2}$ onde $M_2 = \max_{a\leq x\leq b} |f"(x)|$

$f(x) = \ln(x) \Longrightarrow f'(x) = \frac{1}{x} \Longrightarrow f"(x) = -\frac{1}{x^2}$.

$M_2 = \max_{1\leq x\leq 3} |f"(x)| = \max_{1\leq x\leq 3} |-\frac{1}{x^2}| = 1$ para $x = 1$.

$\therefore |E| \leq \frac{2^3\times 1}{12\times 100} = 0,0067$

(c) Determinação do número de subintervalos

$|E| \leq \frac{(b-a)^3 M_2}{12n^2} \leq \varepsilon$

$\therefore (b-a)^3 M_2 \leq 12n^2\varepsilon$

$\therefore 12n^2\varepsilon \geq (b-a^3)M_2$

$\therefore n^2 \geq \frac{(b-a)^3 M_2}{12\varepsilon}$

Sendo o segundo membro desta última desigualdade não-negativo, então:

$$n \geq \sqrt{\frac{(b-a)^3 M_2}{12\varepsilon}}$$

Tendo em vista que $a = 1,\ b = 3,\ \ \varepsilon = 0,001$ e $M_2 = 1$, tem-se:

$$n \geq \sqrt{\frac{(2)^3 1}{12\times 0,001}} = 25,82$$

Logo, o número mínimo de subintervalos necessários para que se obtenha o valor de $\int_1^3 \ln(x)dx$ com erro $\varepsilon < 0,001$ é $n = 26$.

2.2 1^a Regra de Simpson

2.2.1 Fórmula Simples

A idéia desse procedimento é substituir a função f a integrar pelo polinômio interpolador de Gregory-Newton de grau $n = 2$, isto é, por $P_2(x) = y_0 + z\Delta y_0 + z(z-1)\frac{\Delta^2 y_0}{2!}$

$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_2(x)dx = \int_a^b (y_0 + z\Delta y_0 + z(z-1)\frac{\Delta^2 y_0}{2!})dx$

Tendo em vista a relação entre as variáveis z e x e que $a = x_0$ e $b = x_1$, então a expressão anterior admite a seguinte simplificação:

Como $z = \frac{x-x_0}{h}$ então $dz = \frac{1}{h}dx$, isto é, $dx = hdz$.

Para $x = x_0 \Longrightarrow z = 0$

Para $x = x_2 \Longrightarrow z = \frac{x_2-x_0}{h} = \frac{2h}{h} = 2$

$\therefore I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_2}(y_0 + z\Delta y_0)dx = \int_0^2 (y_0 + z\Delta y_0 + (z^2 - z)\frac{\Delta^2 y_0}{2})hdz = h[y_o z + \frac{z^2}{2}\Delta y_0 + (\frac{z^3}{3} - \frac{z^2}{2})\frac{\Delta^2 y_0}{2}]_0^2 = h[2y_0 + 2\Delta y_0 + (\frac{8}{3} - 2)\frac{\Delta^2 y_0}{2}] = h[2y_0 + 2\Delta y_0 + \frac{1}{3}\frac{\Delta^2 y_0}{2}] = h[2y_0 + 2(y_1 - y_0) + \frac{1}{3}(y_2 - 2y_1 + y_0)] = \frac{h}{3}[y_0 + 4y_1 + y_2]$

Portanto, ao se substituir f por $P_2(x)$ obtemos para a integral a seguinte expressão:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}[y_0 + 4y_1 + y_2] \tag{2.9}$$

2.2.2 Erro da fórmula simples

Pode ser mostrado que:

$$E_{1S} = -\frac{h^5 f^{(4)}(\xi)}{90} \tag{2.10}$$

para algum $\xi \in [a, b]$.

2.2.3 Fórmula Composta

Para obter a fórmula composta da 1^a Regra de Simpson, deve-se dividir o intervalo $[a, b]$ em n subintervalos de espaçamento $h = \frac{b-a}{n}$ e aplicar a cada par de subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$, $[x_i, x_{i+1}]$ $\forall i = 1, 2, \cdots, n-1$, a fórmula simples da 1^a Regra de Simpson.

Desta forma, obtém-se:
$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}[y_0 + 4y_1 + y_2] + \frac{h}{3}[y_2 + 4y_3 + y_4] + \cdots + \frac{h}{3}[y_{n-2} + 4y_{n-1} + y_n]$
Portanto:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}[y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + 2y_4 + \cdots + 2y_{n-2} + 4y_{n-1} + y_n] \tag{2.11}$$

sendo n um número par.

2.2.4 Erro da fórmula composta

O erro da fórmula composta é a soma dos erros cometidos em cada um dos $n/2$ pares de subintervalos, um para cada conjunto de 3 pontos, isto é:

$$E_{1\text{S}} = E_1 + E_2 + \cdots + E_{n/2}$$

sendo $E_i = -\frac{h^5 f^{(4)}(\xi_i)}{90}$ para $\xi_i \in [x_{2(i-1)}, x_{2i}]$.

Para determinarmos um limitante para o erro, seja $M_4 = \max\limits_{a \leq x \leq b} |f^{(4)}(x)|$. Então:

$$|E_i| \leq \frac{h^5 M_4}{90} \Longrightarrow |E_{1S}| \leq \frac{n}{2}|E_i| \Longrightarrow |E_{1S}| \leq \frac{n}{2}\frac{h^5}{90}M_4$$

Como $h = \frac{b-a}{n}$ então $|E_{1S}| \leq \frac{n}{180}\left(\frac{b-a}{n}\right)^5 M_4 = \frac{(b-a)^5}{180n^4}M_4$

O limitante para o erro da fórmula composta da 1^a Regra de Simpson é, portanto:

$$|E_{1\text{S}}| \leq \frac{(b-a)^5 M_4}{180n^4} \tag{2.12}$$

sendo $M_4 = \max\limits_{a \leq x \leq b} |f^{(4)}(x)|$.

Exemplo:

Calcular, pela Primeira Regra de Simpson, $\int_1^3 \ln(x)dx$ com erro $\varepsilon < 0,001$.

Solução:

(a) Cálculo de n
Por 2.12, $|E_{1\text{S}}| \leq \frac{(b-a)^5 M_4}{180n^4}$. Impondo-se $|E_{1\text{S}}| < \varepsilon$ tem-se:

$$\frac{(b-a)^5 M_4}{180n^4} < \varepsilon$$

$\therefore \frac{(b-a)^5 M_4}{180} \leq n^4 \varepsilon \Longrightarrow n \geq \sqrt[4]{\frac{(b-a)^5 M_4}{180\varepsilon}}$

Calculemos M_4. Sendo $f(x) = \ln(x) \Longrightarrow f'(x) = \frac{1}{x} \Longrightarrow f''(x) = -\frac{1}{x^2} \Longrightarrow f'''(x) = \frac{2}{x^3} \Longrightarrow f^{(4)}(x) = -\frac{6}{x^4}$. Assim, $M_4 = \max\limits_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)| = \max\limits_{x\in[1,3]} |-\frac{6}{x^4}| = 6$

Tendo em vista que $a = 1$, $b = 3$, $\varepsilon = 0,001$ e $M_4 = 6$, tem-se:

$$n \geq \sqrt[4]{\frac{(3-1)^5 \times 6}{180 \times 0{,}001}} = \sqrt[4]{\frac{32 \times 6}{0{,}180}} = 5,7$$

Como o número de subintervalos nessa regra deve ser par, resulta que o número mínimo de subintervalos necessários para que o cálculo da integral dada contenha erro $\varepsilon < 0,001$ é $n = 6$.

(b) Cálculo da integral
$h = \frac{b-a}{n} = \frac{3-1}{6} = \frac{1}{3}$

i	x_i	$y_i = \ln(x_i)$	c_i
0	1	0,0000	1
1	4/3	0,2877	4
2	5/3	0,5108	2
3	2	0,6931	4
4	7/3	0,8473	2
5	8/3	0,9808	4
6	3	1,0986	1

$I = \frac{h}{3} \sum\limits_{i=0}^{n} c_i y_i = \frac{1}{3} \sum\limits_{i=0}^{6} c_i y_i = \frac{h/3}{3} \times 11,6612 = 1,2957$

Este valor obtido vem comprovar que, de fato, o erro cometido é inferior à $0,001$, uma vez que pelo Cálculo Diferencial e Integral o valor da integral $\int_1^3 \ln(x)dx = 1,2958$.

2.3 2^a Regra de Simpson

2.3.1 Fórmula Simples

A idéia desse procedimento é substituir a função f a integrar pelo polinômio interpolador de Gregory-Newton de grau $n = 3$, isto é, por $P_3(x) = y_0 + z\Delta y_0 + z(z-1)\frac{\Delta^2 y_0}{2} + z(z-1)(z-2)\frac{\Delta^3 y_0}{3!}$

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{3h}{8}[y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3] \tag{2.13}$$

2.3.2 Erro da fórmula simples

$$E_{2S} = -\frac{3h^5 f^{(4)}(\xi)}{80} \tag{2.14}$$

para algum $\xi \in [a, b]$.

2.3.3 Fórmula Composta

Para obter a fórmula composta da 2^a Regra de Simpson, deve-se dividir o intervalo $[a,b]$ em n subintervalos de espaçamento $h = \frac{b-a}{n}$ e aplicar a cada conjunto de 4 pontos, isto é, a cada três subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$, $[x_i, x_{i+1}]$, $[x_{i+1}, x_{i+2}]$ $\forall i = 1, 2, \cdots, n-2$, a fórmula simples da 2^a Regra de Simpson.

Desta forma, obtém-se:

$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{3h}{8}[y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3] + \frac{3h}{8}[y_3 + 3y_4 + 3y_5 + y_6] + \cdots + \frac{3h}{8}[y_{n-3} + 3y_{n-2} + 3y_{n-1} + y_n]$

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{3h}{8}[y_0+3y_1+3y_2+2y_3+3y_4+3y_5+2y_6+\cdots+2y_{n-3}+3y_{n-2}+3y_{n-1}+y_n] \tag{2.15}$$

sendo n um múltiplo de 3.

2.3.4 Erro da fórmula composta

De forma similar ao aplicado na determinação do erro da fórmula composta da 1^a Regra de Simpson, obtém-se:

$$|E_{2S}| \leq \frac{(b-a)^5 M_4}{80n^4} \tag{2.16}$$

sendo $M_4 = \max\limits_{a \leq x \leq b} |f^{(4)}(x)|$.

Exemplo:

Determinar o número mínimo de subintervalos necessários para calcular, pela Segunda Regra de Simpson, o valor da integral $\int_1^3 \ln(x)dx$ com erro $\varepsilon < 0,001$.

Solução:

Por 2.16, $|E_{2S}| \leq \frac{(b-a)^5 M_4}{80n^4}$. Impondo-se $|E_{2S}| < \varepsilon$ tem-se:

$$\frac{(b-a)^5 M_4}{80n^4} < \varepsilon$$

$\therefore \frac{(b-a)^5 M_4}{80} \leq n^4\varepsilon \Longrightarrow n \geq \sqrt[4]{\frac{(b-a)^5 M_4}{80\varepsilon}}$

Do exercício anterior sabemos que $M_4 = \max\limits_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)| = \max\limits_{x\in[1,3]} |-\frac{6}{x^4}| = 6$. Assim, tendo em vista que $a = 1$, $b = 3$, $\varepsilon = 0,001$ e $M_4 = 6$, tem-se:

$$n \geq \sqrt[4]{\frac{(3-1)^5\times 6}{80\times 0{,}001}} = \sqrt[4]{\frac{32\times 6}{0{,}080}} = 7$$

Como o número de subintervalos nessa regra deve ser múltiplo de 3, resulta que o número mínimo de subintervalos necessários para que o cálculo da integral dada contenha erro $\varepsilon < 0,001$ é $n = 9$.

2.4 Observações finais

Analisando-se as expressões dos erros das fórmulas compostas da Regra dos Trapézios, Primeira e Segunda Regras de Simpson, dadas pelas fórmulas 2.8, 2.12 e 2.16, respectivamente, é possível estabelecer a seguinte prioridade de uso:

(i) 1^a Regra de Simpson, a qual exige que n seja par;

(ii) 2^a Regra de Simpson, a qual exige que n seja múltiplo de 3;

(iii) Regra dos Trapézios, na qual n pode ser qualquer;