VI - Integração Numérica

1. Introdução

São, neste momento, conhecidos dos alunos métodos analíticos para o cálculo do integral definido

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

sendo $f(x)$ contínua e integrável no intervalo $[a;b]$. Contudo, algumas primitivas são de difícil, ou mesmo impossível cálculo pelos métodos usuais de integração, veja-se por exemplo

$$\int \frac{e^x}{x}dx, \quad \int e^{x^2}\, dx \quad \text{ou} \quad \int \cos\frac{1}{x}dx\,.$$

Outra situação que, do mesmo modo, causa algumas dificuldades, ocorre quando $f(x)$ é uma função discreta, da qual apenas se conhecem um dado número de valores. Esta situação é muito usual em funções que traduzem resultados experimentais. Para todas estas situações as técnicas de integração numérica são por vezes a única forma de calcular o valore do integral definido.

Neste capítulo apresentaremos apenas dois métodos de integração numérica, nomeadamente a "Regra dos Trapézios" e a "Regra de Simpson". Veremos também uma forma de acelerar a convergência destes dois métodos através a chamada "Aproximação Diferida de Richardson".

2. Regra dos Trapézios

Para calcular

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

Supomos que o intervalo $[a;b]$ está subdividido em n subintervalos de amplitude $h = (b-a)/n$, delimitados pelas seguintes abcissas $a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{j-1} < x_j < \cdots < x_n = b$, i.e., $x_j - x_{j-1} = h, \quad j = 1, \cdots, n$. Para simplificar a escrita vamos considerar $f_j = f(x_j)$.

Em cada j-ésimo intervalo a função f é substituída pelo segmento de recta que une os pontos (x_{j-1}, f_{j-1}) e (x_j, f_j), calculando-se a área abaixo deste. Desta forma, a regra dos trapézios consiste em aproximar a área abaixo da função pela área do trapézio abaixo do segmento de recta que une os valores da função nos extremos do intervalo. Pela formula da área de um trapézio, esta área é igual a

$$A_j = \left(x_{j-1} - x_j\right)\left(\frac{f_{j-1} + f_j}{2}\right)$$

Desta forma aproximamos o valor do integral no intervalo *j* por esta área:

$$I_j \approx A_j = \frac{h}{2}\left(f_{j-1} + f_j \right).$$

A área total definida pelo gráfico da função f é aproximada pela soma das áreas dos n trapézios, definidas de mono análogo à anterior,

$$\begin{aligned}
I &\approx A_1 + A_2 + \cdots + A_n \\
I &\approx \frac{h}{2}\left(f_0 + f_1 \right) + \frac{h}{2}\left(f_1 + f_2 \right) + \cdots + \frac{h}{2}\left(f_{n-1} + f_n \right) \\
I &\approx \frac{h}{2}\left(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n \right) \\
I &\approx \frac{h}{2}\left(f_0 + f_n + \sum_{j=1}^{n-1} 2f_j \right).
\end{aligned}$$

Verifica-se assim que na regra dos trapézios os extremos do intervalo $[a,b]$ contribuem com peso 1 para o valor de *I*, enquanto que os pontos interiores assumem um peso igual a 2.

É possível prever o número de intervalos em que é necessário subdividir o intervalo $[a,b]$ para que o erro (de truncatura) seja inferior a um certo valor fixado. Esse erro é dado pela expressão

$$\varepsilon_T = -\frac{h^2}{12}(b-a)\, f''(\xi), \quad \xi \in [a,b].$$

Quando são conhecidos dois valores aproximados de *I*, nomeadamente I_h e $I_{h'}$, em que $I_{h'}$ representa um valor aproximado de I calculado para um número de intervalos $n' = 2n$, logo intervalos com metade do comprimento dos utilizados para calcular I_h. Pelo que é de esperar que $I_{h'}$ esteja mais próximo do verdadeiro valor de *I* do que I_h. A chamada "Aproximação Diferida de Richardson" permite acelerar a convergência para *I*, atribuindo, numa média pesada de pesos 4 e -1, com o peso maior atribuído ao valor considerado mais exacto:

$$I_{hh'} = \frac{4I_{h'} - I_h}{3}.$$

3. Regra de Simpson

Tal como no método anterior, para calcular o valor de *I*, o integral de f no intervalo $[a;b]$, vamos supor que este intervalo está subdividido em n subintervalos de amplitude $h = (b-a)/n$, delimitados pelas seguintes abcissas $a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{j-1} < x_j < \cdots < x_n = b$, i.e., $x_j - x_{j-1} = h, \quad j = 1, \cdots, n$.

A regra de Simpson consiste em substituir a função, não por uma recta como é o caso na regra dos trapézios, mas sim por uma parábola (polinómio do segundo grau). Como a definição de um polinómio do segundo grau exige 3 pontos (x_{j-1}, x_j e x_{j+1}) esta regra consiste em decompor a área definida pelo gráfico da função em pares de subintervalos consecutivos (os intervalos *j* e *j+1*), para os quais é ajustado um polinómio do segundo grau que passa pelos pontos (x_{j-1}, f_{j-1}), (x_j, f_j) e (x_{j+1}, f_{j+1}). Por esta razão o número total de subintervalos n tem de ser par.

Tal como vimos no capítulo anterior, o polinómio pretendido $p_2(x)$ pode ser obtido através do Método de Lagrange:

$$p_2(x) = f_{j-1}\frac{(x-x_j)(x-x_{j+1})}{(x_{j-1}-x_j)(x_{j-1}-x_{j+1})} + f_j\frac{(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})}{(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})} + f_{j+1}\frac{(x-x_{j-1})(x-x_j)}{(x_{j+1}-x_{j-1})(x_{j+1}-x_j)}$$

Aproximado o valor do integral da função $f(x)$ nos subintervalos *j, j+1* pelo integral do polinómio $p_2(x)$ nos mesmos intervalos

$$\int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} f(x)dx \approx \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} p(x)dx =$$
$$= \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} \left(f_{j-1}\frac{(x-x_j)(x-x_{j+1})}{(x_{j-1}-x_j)(x_{j-1}-x_{j+1})} + f_j\frac{(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})}{(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})} + f_{j+1}\frac{(x-x_{j-1})(x-x_j)}{(x_{j+1}-x_{j-1})(x_{j+1}-x_j)} \right) dx$$

Para calcular mais facilmente este integral, podemos fazer $x_j = x_{j-1} + h$, $x_{j+1} = x_{j-1} + 2h$ e $x = x_{j-1} + sh$. Assim $dx = hds$ e o integral anterior é igual a

$$\int_0^2 \left(f_{j-1}\frac{(hs-h)(hs-2h)}{(-h)(-2h)} + f_j\frac{(hs)(hs-2h)}{(h)(-h)} + f_{j+1}\frac{(hs)(hs-h)}{(2h)(h)} \right) hds =$$
$$\frac{h}{2} f_{j-1}\int_0^2 (s-1)(s-2)ds - hf_j\int_0^2 s(s-2)ds + \frac{h}{2} f_{j+1}\int_0^2 s(s-1)ds \quad =$$
$$\frac{h}{2} f_{j-1}\left(\frac{2}{3}\right) - hf_j\left(-\frac{4}{3}\right) + \frac{h}{2} f_{j+1}\left(\frac{2}{3}\right) =$$
$$= \frac{h}{3}\left(f_{j-1} + 4f_j + f_{j+1} \right)$$

Repetindo o processo para todos os pares de subintervalos entre $[a,b]$ e somando-os obtemos a seguinte aproximação para o valor do integral

$$I \approx I_2 + I_4 + \cdots + I_n$$
$$I \approx \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + f_2 \right) + \frac{h}{3}\left(f_2 + 4f_3 + f_4 \right) + \cdots + \frac{h}{3}\left(f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n \right)$$
$$I \approx \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n \right)$$
$$I \approx \frac{h}{3}\left(f_0 + f_n + 4\sum_{j=1}^{n/2} f_{2j-1} + 2\sum_{j=2}^{n/2} f_{2j-2} \right).$$

Verifica-se assim que na regra dos trapézios os pontos extremos do intervalo $[a,b]$ contribuem com peso 1 para o valor de *I*, os pontos de índice impar tem peso igual a 4 e os pontos de índice par tem peso igual a 2.

É igualmente possível prever o número de intervalos em que é necessário subdividir o intervalo $[a,b]$ para que o erro (de truncatura) seja inferior a um certo valor fixado. Usando a regra de Simpson, esse erro é dado pela expressão

$$\varepsilon_s = -\frac{h^4}{180}(b-a)\, f^{(iv)}(\xi), \quad \xi \in [a,b].$$

Quando são conhecidos dois valores aproximados de *I*, nomeadamente I_h e $I_{h'}$, em que $I_{h'}$ representa um valor aproximado de I calculado para um número de intervalos $n' = 2n$, logo intervalos com metade do comprimento dos utilizados para calcular I_h. A "Aproximação Diferida de Richardson" permite acelerar a convergência para *I*, atribuindo, numa média pesada de pesos 16 e -1, sendo o peso maior atribuído ao valor considerado mais exacto ($I_{h'}$):

$$I_{hh'} = \frac{16 I_{h'} - I_h}{15}.$$

4. **Problemas exemplo**

Pretende-se calcular, correctamente arredondado à sétima decimal, o valor de

$$I = \int_{1.2}^{1.5} \frac{e^x}{x}\, dx$$

a) Pela "*regra dos trapézios*":

i) Estime o menor número par n de intervalos são necessários?

ii) Calcule I_n, valor do integral dado, para n intervalos.

iii) Calcule $I_{n'}$, valor do integral dado, para $n' = \frac{n}{2}$ intervalos.

iv) Calcule uma aproximação diferida $I_{nn'}$ do valor de I. Verifique que o valor assim obtido é mais próximo de I que qualquer dos anteriores.

b) Pela “*regra de Simpson*”:

i) Estime o menor número par n de intervalos são necessários?

ii) Calcule I_n, valor do integral dado, para n intervalos (tenha já em consideração que n', valor de n a utilizar na alínea seguinte, deve ser par)..

iii) Calcule $I_{n'}$, valor do integral dado, para $n' = \frac{n}{2}$ intervalos.

iv) Calcule uma aproximação diferida $I_{nn'}$ do valor de I. Verifique que o valor assim obtido é mais próximo de I que qualquer dos anteriores.

v) Verifique que a “regra de Simpson” é muito mais eficiente que a “regra dos trapézios”.

Resolução: $I = \int_{1.2}^{1.5} \frac{e^x}{x}\, dx$; $\Delta \le 0.5\times10^{-7}$

$$f(x) = \frac{e^x}{x}$$

a) i) $f^{(2)}(x) = \dfrac{(x^2 - 2x + 2)e^x}{x^3}$; $M = \max\left| f^{(2)}(x)\right|_{1.2\le x\le1.5} \approx 1.998$

$$n \ge \frac{|b-a|}{h} \ge \frac{|b-a|}{\left(\dfrac{12\Delta}{|b-a|M}\right)^{1/2}} \Rightarrow n = 300 \Rightarrow h = 0.001$$

$$\Rightarrow x_i = 1.2 + 0.001i \; ; \; i = 0,1,\cdots,300$$

ii) $I \approx I_{300} = \sum_{i=0}^{300}\left(p_i\, f(x_i)\right) = 0.85919320850 \approx 0.8591932$

iii) $n' = 150 \Rightarrow h = 0.002 \Rightarrow x_i = 1.2 + 0.002i \; ; \; i = 0,1,\cdots,150$

$$I \approx I_{150} = \sum_{i=0}^{150}\left(p_i\, f(x_i)\right) = 0.85919334220 \approx 0.859193$$

iv) $I_{nn'} = \dfrac{4I_n - I_{n'}}{3} = 0.85919316394 \approx 0.8591931639$

b) i) $f^{(4)}(x) = \dfrac{(x^4 - 4x^3 + 12x^2 - 24x + 24)e^x}{x^5}$;

$$M = \max\left| f^{(4)}(x)\right|_{1.2\le x\le1.5} \approx 10.196$$

$$n \geq \frac{|b-a|}{h} \geq \frac{|b-a|}{\left(\frac{180\Delta}{|b-a|M}\right)^{1/4}} \qquad \Rightarrow \qquad n = 8 \Rightarrow \qquad h = 0.0375$$

$$\Rightarrow \qquad x_i = 1.2 + 0.0375i \quad ; \qquad i = 0,1,\cdots,8$$

ii) $$I \approx I_8 = \sum_{i=0}^{8} \left(p_i \; f\left(x_i\right) \right) = 0.85919318472 \approx 0.8591932$$

iii) $n' = 4 \qquad \Rightarrow \qquad h = 0.075 \qquad \Rightarrow \qquad x_i = 1.2 + 0.075i \quad ;$ $i = 0,1,\cdots,4$

$$I \approx I_4 = \sum_{i=0}^{4} \left(p_i \; f\left(x_i\right) \right) = 0.85919349392 \approx 0.859193$$

iv) $$I_{nn'} = \frac{16 I_n - I_{n'}}{15} = 0.85919316411 \approx 0.8591931641$$

5. Problemas propostos

1) Determine um valor aproximado de

$$I = \int_1^2 e^x dx$$

para intervalos de comprimento $h = 0,25$ e $h = 0,125$, pelos métodos:

a) Regra dos trapézios,

b) Regra de Simpson,

c) Aproximação diferida de Richardson.

2) Sabe-se que o ***I=0,74682413*** é o valor exacto de

$$I = \int_0^1 e^{-x^2} dx$$

a) Determine o número mínimo de subintervalos (e de pontos) necessários para conseguir tal precisão, usando a regra dos Trapézios ou a regra de Simpson.

b) Calcule o valor aproximado de ***I***.

3) Determine o número de subintervalos ***n*** e respectiva amplitude ***h*** de modo a aproximar o valor de $I = \int_0^2 e^{2x} \sin(3x) dx$, com erro inferior a 10^{-4}, usando

   a. Regra dos trapézios,
   b. Regra de Simpson.

4) Calcular com erro inferior a 10^{-7}, o valor de

$$I = \int_{4,2}^{4,8} 5^{-x} dx .$$

5) Considere a função $f(x)$ conhecida apenas através dos seguintes valores:

x	$0,0$	$0,2$	$0,4$	$0,6$	$0,8$
y	$1,00000$	$1,22140$	$1,49182$	$1,82212$	$2,22554$

   a. Aproxime esta função através de um polinómio interpolador usando um método da sua escolha.
   b. Aproxime os valores de $f(0,05)$ e $f(0,65)$, usando o polinómio interpolador determinado em a.
   c. Calcule um valor aproximado de $I = \int_0^{0,8} f(x) dx$ através da regra de Simpson.

6. Bibliografia

- Heitor Pina. *Método Numéricos*. McGraw-Hill, Lisboa, 1995.

- Curtis F. Gerald, Patrick O. Whealtley. Applied Numerical Analysis, Sixth Edition. Addison-Westley, 1999.

- Michael T. Heath. Scientific Computing an Introductory Survey. McGraw-Hill, New York, 2002.