Matemática Computacional
Ficha 5 (Capítulo 5)
Integração numérica

1. Revisão matéria/Formulário

A técnica de aproximar o integral de f pelo integral do seu polinómio interpolador passando num conjunto de pontos de interpolação (depois designados por "nós de integração") é a ideia base aprendida neste curso sobre a obtenção de fórmulas ou regras de quadratura (chamadas interpolatórias). A regra dos trapézios e a regra de Simpson são apenas dois exemplos das chamadas regras de Newton-Cotes (fechadas), em que os pontos são igualmente espaçados, obtidas por esse procedimento.

Algumas fórmulas fechadas:
Regra dos trapézios:

$$T_1(f) = T(f) = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)], \qquad T_N(f) = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_N) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(x_i)\right], \quad h = (b-a)/N$$

$$E_N^T(f) = \frac{(b-a)^3}{12\,N^2}\, f''(\xi) = -\frac{(b-a)\,h^2}{12} f''(\xi) \qquad \xi \in (a,b)$$

Regra de Simpson:

$$S_2(f) = S(f) = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right],$$

$$S_N(f) = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + f(x_N) + 4\sum_{i=1}^{N/2} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{N/2-1} f(x_{2i})\right] \qquad h = (b-a)/N$$

$$E_N^S(f) = -\frac{(b-a)^5}{180\,N^4} f^{(4)}(\xi) = -\frac{(b-a)\,h^4}{180} f^{(4)}(\xi) \qquad \xi \in (a,b)$$

2. Exercícios

1. Considere o integral

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

   (a) Determine o seu valor aproximado, considerando quatro subintervalos e utilizando:

      i. A regra dos trapézios. *Res.* $I \simeq 0.742984$

ii. A regra de Simpson. *Res.* $I \simeq 0.746855$

(b) Faça uma estimativa do número mínimo de subintervalos que se deveria considerar, se se pretendesse calcular o integral da alínea anterior com um erro inferior a 10^{-4}, utilizando

i. A regra dos trapézios.
Res. Use a maj. $max|f''| = |f''(0)| = 2$; obtém-se $N \geq 41$

ii. A regra de Simpson.
Res. Sendo $f^{(IV)}(x) = 4\,e^{-x^2}\,(4x^4 - 12x^2 + 3)$, majorando cada factor, tém-se

$$|f^{(IV)}(x)| \leq (4)(5) = 20, \quad x \in [0, 1]$$

Substituíndo na fórmula, obtém-se $N \geq 6$ (N par)

2. Pretende-se obter uma fórmula de integração com dois nós no intervalo $[-1, 1]$, i.e. uma fórmula do tipo:

$$I_1(f) = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

(a) Escreva o sistema de equações que lhe permite calcular A_0 e A_1 de modo a que a fórmula tenha menos grau de precisão 1.

(b) Resolva o sistema em ordem a A_0 e A_1.
Res. $A_0 = 2x_1/(x_1 - x_0) \quad A_1 = -2x_0/(x_1 - x_0)$.

(c) Mostre que, se x_0 e x_1 forem tais que $x_0 x_1 = -\frac{1}{3}$, a fórmula de integração assim obtida tem grau de precisão $r \geq 2$
Res. Isto significa que a fórmula deve integrar exactamente polinómios de grau pelo menos 0, 1, 2. Equivalentemente, deve integrar exactamente o monómio x^2, isto é,

$$I_1(x^2) = A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \int_{-1}^{1} x^2 dx = 2/3$$

Substituindo A_0 e A_1 de acordo com a alinea anterior, mostre que se verifica essa igualdade.
Note que o grau de precisão r será 2 (se $I_1(x^3) \neq I(x^3)$) ou superior a 2 (caso haja igualdade).

3. Suponha que a função f é definida no intervalo $[0, a]$, do seguinte modo

$$f(x) = \begin{cases} 3 - x & 0 \leq x \leq 1 \\ 3x - 1 & 1 \leq x \leq a \end{cases}$$

(a) Obtenha aproximações para o integral $I(f) = \int_0^a f(x)dx$, com $a = 2$ e $a = 3$, dos seguintes modos:

i. Utilizando a regra dos trapézios composta, com passo $h = 1$.

ii. Utilizando a regra de Simpson (simples).

(b) Determine o erro de cada um dos resultados obtidos, utilizando o valor exacto de $I(f)$.

(c) A fórmula do erro da regra dos trapézios é aplicável neste caso ? E a da regra de Simpson ? Justifique.

Sol. Seja $a = 3$. *Sug.: Faça um gráfico de* f.
a)i- $T_3(f) = 12.5$ *a)ii-* $S(f) = 12.5$; *b)* $I(f) = 12.5$, *logo o erro é zero em cada caso.*
Era de esperar?

4. Considere a seguinte tabela de valores de uma função f

x_i	-1	1	2	3	5	7
$f(x_i)$	-1	1	-1	1	2	$5/2$

(a) Obtenha dois valores aproximados para $\int_{-1}^{7} f(x)dx$ de duas maneiras distintas, recorrendo a fórmulas de quadratura e usando todos os pontos da tabela.

(b) Supondo que $max_{x\in[-1,7]}|f^{(n)}(x)| \leq M, \forall n$ com M constante real, determine expressões, em função de M, para os erros de integração nos dois casos que considerou na alinea anterior.

Sugestão. Pode combinar adequadamente a aplicação da regra dos trapézios e da regra de Simpson

5. Considere a seguinte tabela de valores de uma função $f(x)$

x_i	-2	-1	0	1	2
$f(x_i)$	1	0	2	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$

(a) Utilizando a fórmula de Newton com diferenças divididas, determine o polinómio de grau ≤ 2, $p_2(x)$, que interpola $f(x)$ nos pontos $x_0 = -2$, $x_2 = 0$ e $x_4 = 2$.

(b) Suponha que pretendemos aproximar o valor $I(f) = \int_{-2}^{2} f(x)dx$ por $\int_{-2}^{2} p_2(x)dx$. Sabendo que as derivadas de f verificam $|f^{(j)}(x)| \leq j/2$, $j = 1, 2, 3, 4$ no intervalo $[-2, 2]$, determine um majorante para o erro de integração. Justifique.

Sugestão. Poderá tratar-se de alguma regra conhecida, o que lhe facilitará a tarefa. Com efeito, $S(f) = \int_{-2}^{2} p_2(x)dx$, *onde* $S(f)$ *designa a regra de Simpson simples. Logo, o que se pretende é que use a fórmula de erro dessa regra.*
De qualquer modo, se não se lembrasse, poderia fazer
$|\int_{-2}^{2} f(x)dx - \int_{-2}^{2} p_2(x)dx| = |\int_{-2}^{2}(f(x) - p_2(x))dx| \leq \int_{-2}^{2} |e_2(x)|dx$, *etc...*
onde $e_2(x)$ *é o erro de interpolação.*

6. Pretende-se construir uma fórmula de quadratura do tipo

$$Q(g) = A_0 g(0) + A_1 g(1)$$

para aproximar o integral

$$I(g) = \int_0^1 e^x \; g(x)dx.$$

(a) Calcule A_0 e A_1 de modo a que a fórmula seja exacta para funções $g(x) = a + bx$ (a e b reais).

Res. Equivale a impor que a fórmula dê o valor exacto de $I(g)$ quando $g(x) = x^j, j = 0, 1$. Ou seja:

$$I(1) = Q(1) \Leftrightarrow e - 1 = A_0 + A_1$$
$$I(x) = Q(x) \Leftrightarrow 1 = A_1$$

Resolvendo o sistema linear, obtém-se $A_0 = 0.718218, \quad A_1 = 1$.

(b) Seja $g(x) = \sin\, x$. Obtenha uma aproximação de I usando a regra de quadratura obtida em a) e calcule o valor do erro.

Res. A regra é: $Q(g) = 0.718218\, g(0) + g(1)$; vem $I(\sin x) \simeq Q(\sin x) = \sin 1 = 0.017452406$.

(c) Deduza uma fórmula que lhe permita determinar um majorante para o erro absoluto de integração, $|E(g)| = |I(g) - Q(g)|$, no caso duma função genérica g, e aplique-a ao caso considerado em que $g(x) = \sin\, x$.
Sugestão. Estude a dedução da fórmula de erro da regra dos trapézios.

(d) Determine um valor aproximado para I (com $g(x) = \sin x$), usando a regra dos trapézios composta com: i) 2 subintervalos; ii) 4 subintervalos.

Sol. i) $I \simeq 1.93412$; ii) $I \simeq 0.9237052$

(e) Em relação com a alínea anterior, determine o número mínimo de subintervalos necessário na regra dos trapézios composta, para garantir que o erro absoluto do resultado seja inferior a 10^{-2} (despreze erros de arredondamento).

Res. $N \geq 7$

7. A tabela seguinte mostra os resultados obtidos por uma regra de Newton-Cotes (composta) no cálculo do integral $I(f)$ de uma certa função f indefinidamente diferenciável.

n	8	16	32	64
I_n	295.27	274.15	268.97	267.68

O valor I_n representa a **aproximação** obtida, com $n+1$ nós de integração. Sabendo que o **valor exacto** do integral $I(f) = 267.25$, diga, justificando, que fórmula poderá ter sido utilizada (trap. ou Simp.).
Sugestão: Calcule os erros $E_n = I - I_n$ e verifique o que acontece aos erros ao passar de n para $2n$ pontos.

8. Dados os valores de $f(x)$ nos extremos dum intervalo $[a, b]$, pretende-se uma fórmula $Q(f) = A_0 f(a) + A_1 f(b)$ para aproximar $I(f) = \int_a^b f(x)dx$.

(a) Utilize o método dos coeficientes indeterminados para calcular os valores de A_0 e A_1 (2 incógnitas).
Sol. Imponha que $Q(f)$ seja exacta para polinómios de grau ≤ 1.

(b) Determine o grau de precisão da fórmula obtida.

(c) Trata-se de alguma regra conhecida? Indique um processo alternativo de obter A_0 e A_1. . *Sugestão. Os A_j são os pesos da regra. Relembre como foi deduzida a regra dos trapézios.*

9. (Teste 2017/2018) Considere a seguinte tabela de valores de uma função f

x_i	-2	-1.5	-1	0	1	2	2.5
$f(x_i)$	-5	-5.5	0	-1	-2	3	9.625

(a) Obtenha uma aproximação para $f(-1.2)$ através do polinómio p_2, de grau ≤ 2, que interpola f nos três primeiros pontos da tabela.

Resol.

Pode utilizar-se a fórmula de Newton com diferenças divididas:

$$p_2(x) = f(-2) + f[-2, -1.5](x+2) + f[-2, -1.5, -1](x+2)(x+1.5).$$

Tem-se

$$f[-2, -1.5] = (-5.5+5)/(-1.5+2) = -1,$$
$$f[-1.5, -1] = (0+5.5)/(-1+1.5) = 11,$$

logo

$$f[-2, -1.5, -1] = (11+1)/(-1+2) = 12.$$

Obtém-se a seguinte expressão para p_2:

$$p_2(x) = -5 - (x+2) + 12(x+2)(x+1.5),$$

logo $p_2(-1.2) = -2.92$ é o valor aproximado pedido para $f(-1.2)$.

(b) Calcule um valor aproximado para $I = \int_{-2}^{2} x\, f(x) dx$ usando a regra de Simpson simples.

Resol.

A regra de Simpson simples para aproximar o integral $\int_a^b F(x)dx$ utiliza 3 nós, $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $x_2 = b$, que permitem definir $N = 2$ subintervalos de $[a, b]$ com comprimento $h = (b-a)/2$. A fórmula com $N = 2$ é

$$I \approx S_2(F) = \frac{h}{3}\left[F(a) + 4\,F(\frac{a+b}{2}) + F(b)\right]$$

Neste caso, os nós são $-2, 0, 2$ e, para $F(x) = xf(x)$, tem-se

$$F(-2) = (-2)\cdot(-5) = 10,\ F(0) = 0\cdot(-1) = 0,\ F(2) = 2\cdot 3 = 6.$$

Como $h = 2$, obtém-se

$$S_2(F) = \frac{2}{3}\,(10 + 4\cdot 0 + 6) = \frac{32}{3} \approx 10.6666.$$

(c) Calcule um valor aproximado para $J = \int_{-2}^{2} f(x)dx$ usando a regra de Simpson e mais do que 3 nós de integração.

Resol.

Os nós $x_0 = -2$, $x_1 = -1$, $x_2 = 0$, $x_3 = 1$, $x_4 = 2$ são igualmente espaçados com $h = 1$. Neste caso, a regra de Simpson composta, com $N = 4$ subintervalos, dá

$$\begin{aligned} J \approx S_4(f) &= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + f(x_4) + 4(f(x_1) + f(x_3)) + 2f(x_2)\right] \\ &= \frac{1}{3}\left[-5 + 3 + 4(0 + (-2)) + 2 \cdot (-1)\right] = -4. \end{aligned}$$

(d) Suponha que $f(x) = x^3 + a_2x^2 + a_1x + 5$, onde a_1 e a_2 são números reais.

i. <u>Sem determinar a_1 e a_2</u>, diga, justificando adequadamente, se o valor obtido na questão (a) coincide com o valor exato $f(-1.2)$.

Resol.

Para calcular o erro de interpolação $e_2(-1.2) = f(-1.2) - p_2(-1.2)$, utiliza-se a fórmula do erro de interpolação com $n = 2$,

$$f(x) - p_2(x) = \frac{f'''(\xi)}{3!}\prod_{j=0}^{2}(x - x_j) = \frac{f'''(\xi)}{6}(x + 2)(x + 1.5)(x + 1).$$

Sendo $f'''(x) = 6$, para todo o $x \in \mathbf{R}$, obtém-se

$$f(-1.2) - p_2(-1.2) = (-1.2 + 2)(-1.2 + 1.5)(-1.2 + 1) = -0.048 \neq 0,$$

pelo que o valor $p_2(-1.2)$ calculado em 1.(a) é um valor aproximado para $f(-1.2)$.

ii. Ainda para $f(x)$ da forma acima, determine o valor exato do erro da aproximação obtida em (b).

Resol.

Utiliza-se a fórmula do erro de integração da regra de Simpson simples, a qual, para um integral $\int_a^b F(x)dx$, é dada por:

$$E_2^S(F) = -\frac{(b - a)h^4}{180}F^{(4)}(\xi), \text{ com } h = \frac{b - a}{2}.$$

Neste caso, $a = -2$, $b = 2$ e $h = 2$. Sendo $f(x)$ o polinómio de grau 3 dado, tem-se $F(x) = xf(x) = x^4 +$ termos de grau < 4, donde

$$F^{(4)}(x) = (x^4)^{(4)} = 24, \forall x \in \mathbf{R}.$$

Substituindo na fórmula de erro, obtém-se o valor exato do erro

$$I - S_2(F) = -\frac{4 \cdot 2^4}{180}24 = -\frac{128}{15} = -8.53333....$$