Apontamentos das aulas

Integração Numérica

Pedro R. S. Antunes (2005)

O cálculo integral aparece em muitos problemas de engenharia. Uma das possíveis aplicações é o cálculo de áreas.

Seja $f \in C([a,b])$ e consideremos o integral definido

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \tag{1}$$

Em termos geométricos o valor dado pela expressão (1) é a área compreendida entre o gráfico da função f no intervalo $[a,b]$ e o eixo dos $x's$ (Figura 1)

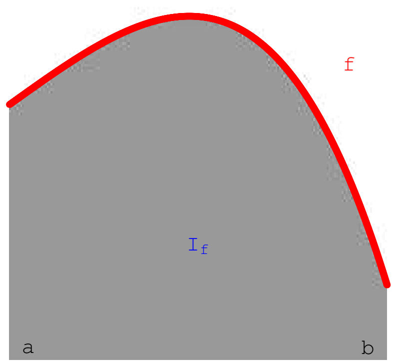

Figura 1: *Interpretação geométrica de* $I(f)$.

São bem conhecidas algumas propriedades elementares do integral definido: Para $a, b, c, \alpha \in \mathbb{R}$ com $a \leq c \leq b$ temos

- $I(f) = \int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx = \int_a^b f(x)dx$
- $I(f+g) = \int_a^b (f(x) + g(x))\, dx = \int_a^b f(x)dx + \int_a^b g(x)dx$
- $\int_a^b f(x)dx = -\int_b^a f(x)dx$
- $\int_a^b \alpha f(x)dx = \alpha \int_a^b f(x)dx$
- $\left|\int_a^b f(x)dx\right| \leq \int_a^b |f(x)|\, dx$

Em termos mais intuitivos as duas primeiras relações traduzem a propriedade geométrica: *a área da reunião de dois conjuntos disjuntos é a soma das áreas de cada um* (Figura 2)

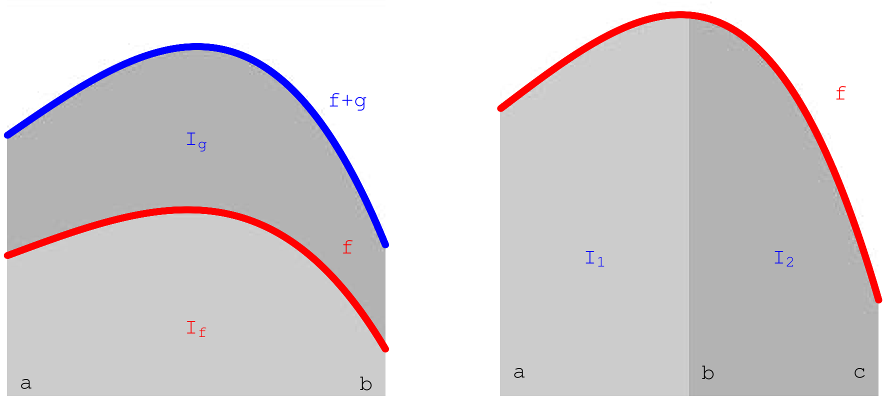

Figura 2: *Propriedades geométricas de $I(f)$.*

Um resultado que permite calcular explicitamente alguns integrais é a *regra de Barrow*

$$\int_a^b g'(x)dx = g(b) - g(a) := g|_a^b \tag{2}$$

Exemplo 1

- $\int_a^b c dx = cx|_a^b = cb - ca = c(b-a)$
- $\int_a^b x dx = \frac{x^2}{2}|_a^b = \frac{b^2}{2} - \frac{a^2}{2} = \frac{(b-a)(b+a)}{2}$
- $\int_a^b x^k dx = \frac{b^{k+1}-a^{k+1}}{k+1},\ k = 0, 1, 2, ...$

Como vimos no exemplo 1, nos casos em que conhecemos uma primitiva da função f, o cálculo do integral é bastante simples. No entanto, há muitas funções das quais não conseguimos calcular uma primitiva. Além disso, em alguns problemas apenas se conhecem os valores da função f num número finito de pontos. Nesse caso para obter aproximações de $\int_a^b f(x)dx$ deveremos recorrer a métodos numéricos - as *fórmulas de quadratura*.

Fórmulas de Quadratura

Com o objectivo de calcular aproximações do integral de uma função f que pode não ser primitivável estamos interessados em aproximar f por uma função "mais simples". Uma das possibilidades é considerar interpolação polinomial, ou seja a aproximação

$$f(x) \approx p_n(x).$$

Como sabemos a integração de funções polinomiais é bastante simples. Assim, uma possibilidade de obter uma aproximação do integral da função f é considerar o integral de um polinómio p_n que interpole f em determinados pontos $x_0, x_1, ..., x_n$. É esta a ideia que motiva as regras de quadratura.

Sejam $a = x_0 < x_1 < ... < x_n = b$, $n+1$ pontos do intervalo $[a,b]$ e seja p_n o polinómio interpolador de f nesses pontos. As fórmulas que iremos considerar baseiam-se na aproximação

$$I(f) \approx I(p_n)$$

Recordamos que se $f \in C^{n+1}([a,b])$, pela fórmula de erro da interpolação polinomial

$$f(x) = p_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$$

Então

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \left(p_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)\right)dx =$$

$$\int_a^b p_n(x)dx + \int_a^b \left(\frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)\right)dx \tag{3}$$

Como

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \overbrace{f(x_i)}^{\text{constantes}} \times \underbrace{l_i(x)}_{\text{pol. de Lagrange}}$$

tem-se

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\int_a^b l_i(x)dx.$$

Assim temos a aproximação para o integral da função f

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \tag{4}$$

com

$$A_i = \int_a^b l_i(x)dx. \tag{5}$$

As aproximações (4) designam-se *fórmulas de integração ou fórmulas de quadratura.* Os pontos x_i são os nós de integração e os coeficientes A_i designam-se pesos da fórmula de quadratura.

Pela expressão (3), o erro de integração é dado por

$$E_n(f) := \int_a^b f(x)dx - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = \int_a^b \left(\frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \right) dx \tag{6}$$

ou seja o erro de integração é dado pelo integral do erro de interpolação associado a p_n. Como em geral $\xi = \xi(x)$ não é conhecido, nos casos em que se podem estimar as derivadas de f obtemos[1]

$$|E_n(f)| \leq \frac{max_{[a,b]} \left| f^{(n+1)} \right|}{(n+1)!} \times \left| \int_a^b \left(\prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \right) dx \right| \tag{7}$$

Fórmulas de Newton-Côtes fechadas

Partindo da expressão (4) vamos agora obter algumas fórmulas de integração. As fórmulas de Newton-Côtes fechadas são obtidas considerando os nós de integração igualmente espaçados no intervalo $[a, b]$ (Figura 3).

$$x_0 = a;\ x_n = b;\ x_i = a + ih,\ i = 0, 1, ..., n;\ com\ h = \frac{b-a}{n}$$

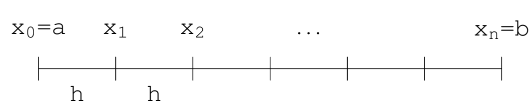

Figura 3: *nós de integração de uma fórmula de Newton-Côtes.*

As fórmulas de Newton-Côtes fechadas mais conhecidas são a *Regra dos Trapézios* (caso $n = 1$) e a *Regra de Simpson* (caso $n = 2$)

[1]uma vez que por hipótese f é uma função C^{n+1}, então a sua $(n+1)$-ésima derivada será uma função contínua no intervalo $[a, b]$ que é compacto. Assim, o teorema de Weirstrass garante a existência de $max_{[a,b]} \left| f^{(n+1)} \right|$.

Regra dos Trapézios (simples)

Consideremos o caso particular em que $n = 1$. Neste caso os nós de integração são $x_0 = a$ e $x_1 = b$ (Figura 4).

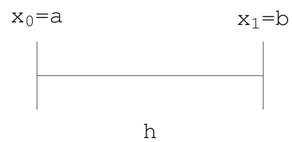

Figura 4: *nós de integração da regra dos trapézios.*

Neste caso, as fórmulas de integração (4) e (5) resumem-se a

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

com

$$A_0 = \int_a^b l_0(x)dx = \int_a^b \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}dx = \frac{x_1 - x_0}{2} = \frac{h}{2}$$

e

$$A_1 = \int_a^b l_1(x)dx = \int_a^b \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}dx = \frac{x_1 - x_0}{2} = \frac{h}{2}$$

Logo $A_0 = A_1 = \frac{h}{2}$, pelo que a expressão (4) toma a forma

$$\int_a^b f(x)dx \approx T(f) := \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right], \tag{8}$$

a fórmula de quadratura da regra dos trapézios. Na Figura 5 apresentamos um exemplo. A vermelho temos o gráfico de uma dada função f da qual se pretende calcular $\int_a^b f(x)dx$. Em termos geométricos esse valor corresponde à área delimitada pelo gráfico de f, o eixo dos $x's$ e os extremos a e b. Aplicando a regra dos trapézios aproximamos esse valor, pelo da área do trapézio representado, ou seja o integral do polinómio p_1 que interpola f nos pontos $x_0 = a$ e $x_1 = b$ assinalados no gráfico.

Vamos agora deduzir uma fórmula de erro para a aproximação (8).

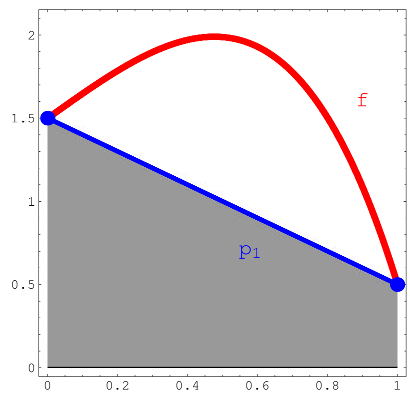

Figura 5: *Interpretação geométrica da regra dos trapézios.*

Fórmula de Erro da Regra dos Trapézios (simples)

Estamos interessados em estimar o erro cometido ao aproximar o integral da função f pela regra dos trapézios, ou seja

$$E^T(f) = \int_a^b f(x)dx - T(f)$$

Como $T(f)$ é o valor do integral do polinómio p_1 que interpola f nos pontos x_0 e x_1, então

$$E^T(f) = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_1(x)dx = \int_a^b [f(x) - p_1(x)]\, dx$$

ou seja

$$E^T(f) = \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2}(x - x_0)(x - x_1)dx,\ \xi(x) \in [a, b] \tag{9}$$

pela fórmula de erro de interpolação polinomial. Esta última expressão é um caso particular da expressão (6) quando $n = 1$. Podemos simplificar esta expressão recorrendo a um resultado de Análise:

Teorema 1. *(Teorema do valor médio para integrais) Se $f \in C([a, b])$ e g é uma função integrável no intervalo $[a, b]$ que não muda de sinal em $[a, b]$, então existe $\eta \in]a, b[$ tal que*

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\eta) \int_a^b g(x)dx$$

Temos $W(x) = \overbrace{(x - x_0)}^{\geq 0} \times \overbrace{(x - x_1)}^{\leq 0} \leq 0$. Assim $W(x)$ não muda de sinal em $[a, b]$ e pelo Teorema 1

$$E^T(f) = \frac{f''(\eta)}{2} \int_a^b (x - x_0)(x - x_1) dx$$

e como $x_0 = a$ e $x_1 = b$, então

$$E^T(f) = \frac{f''(\eta)}{2} \int_a^b (x - a)(x - b) dx. \tag{10}$$

Vamos agora calcular este último integral. Uma possibilidade é usar a conhecida regra de integração por partes:

A partir da regra usual de derivação do produto de duas funções u e v, integrando entre os pontos a e b obtemos

$$\int_a^b (uv)' dx = \int_a^b u'v dx + \int_a^b uv' dx.$$

Assim

$$u(b)v(b) - u(a)v(a) = \int_a^b u'v dx + \int_a^b uv' dx$$

e

$$\int_a^b uv' dx = u(b)v(b) - u(a)v(a) - \int_a^b u'v dx. \tag{11}$$

Com vista a aplicar este último resultado vamos definir as funções $u(x) = (x - a)$ e $v'(x) = (x - b)$, pelo que $v(x) = \frac{(x-b)^2}{2}$. Assim, pela expressão (11)

$$\int_a^b \overbrace{(x - a)}^{u} \times \overbrace{(x - b)}^{v'} dx = \left[(b - a) \frac{\overbrace{(b - b)^2}^{=0}}{2} - \overbrace{(a - a)}^{=0} \frac{(a - b)^2}{2} - \int_a^b \frac{(x - b)^2}{2} dx \right] =$$

$$- \int_a^b \frac{(x - b)^2}{2} dx = - \left[\frac{(x - b)^3}{6} \right]_{x=a}^{x=b} = - \frac{\overbrace{(b - b)^3}^{=0}}{6} + \frac{(a - b)^3}{6} = \frac{(a - b)^3}{6}$$

logo

$$\int_a^b (x - a)(x - b) dx = \frac{(a - b)^3}{6} = -\frac{h^3}{6}$$

pois $b-a=h$ e pela expressão (10) obtemos a fórmula de erro da regra dos trapézios

$$E^T(f) = -f''(\eta)\frac{h^3}{12}. \tag{12}$$

Em geral o valor η não é conhecido. No entanto estamos interessados numa fórmula de erro que nos permita calcular majorantes de erro. Assim, nos casos em que é possível estimar as derivadas da função f, podemos facilmente obter a fórmula de majoração do erro

$$\left|E^T(f)\right| \leq max_{[a,b]}\left|f''\right|\frac{h^3}{12}. \tag{13}$$

Na Tabela 1 resumimos os principais resultados que obtivemos relativos à regra dos trapézios.

Regra dos Trapézios
$x_0 = a; \quad x_1 = b; \quad h = b-a; \quad \int_a^b f(x)dx \approx T(f)$
$T(f) = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right]$
$E^T(f) = -f''(\eta)\frac{h^3}{12}, \ \eta \in]a,b[$
$\left|E^T(f)\right| \leq max_{[a,b]}\left|f''\right|\frac{h^3}{12}$

Tabela 1: Principais resultados relativos à regra dos trapézios

Regra de Simpson (simples)

A *Regra de Simpson* é uma regra de Newton-Côtes e é obtida no caso particular em que $n=2$. Resulta de aproximarmos $\int_a^b f(x)dx$ por $\int_a^b p_2(x)dx$, onde $p_2(x)$ é o polinómio que interpola f nos pontos $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ e $x_2 = b$. Neste caso definimos h por $h = \frac{b-a}{2}$ (Figura 6). Pela fórmula de erro de interpolação polinomial temos

$$f(x) = p_2(x) + \frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2), \ \xi(x) \in [a,b]$$

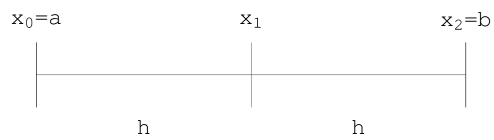

Figura 6: *nós de integração da regra de Simpson.*

com $p_2(x)$ dado pela fórmula de Lagrange

$$p_2(x) = f(x_0)l_0(x) + f(x_1)l_1(x) + f(x_2)l_2(x).$$

Então

$$\int_a^b f(x)dx \approx f(x_0)\overbrace{\int_a^b l_0(x)dx}^{A_0} + f(x_1)\overbrace{\int_a^b l_1(x)dx}^{A_1} + f(x_2)\overbrace{\int_a^b l_2(x)dx}^{A_2}$$

com

$$A_0 = \int_a^b l_0(x)dx = \int_a^b \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}dx;$$

$$A_1 = \int_a^b l_1(x)dx = \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}dx;$$

$$A_2 = \int_a^b l_2(x)dx = \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}dx$$

Vamos agora calcular os pesos da quadratura A_0, A_1 e A_2.

$$A_0 = \int_a^b \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{\underbrace{(x_0-x_1)}_{-h}\underbrace{(x_0-x_2)}_{-2h}}dx = \frac{1}{2h^2}\int_a^b (x-x_1)(x-x_2)dx \tag{14}$$

Podemos calcular este último integral usando a expressão (11). Temos

$$\int_a^b \overbrace{(x-x_1)}^{u} \times \overbrace{(x-x_2)}^{v'} dx =$$

$$\left[(b-x_1)\frac{\overbrace{(b-x_2)^2}^{=0 \ pois \ x_2=b}}{2} - \overbrace{(a-x_1)}^{-h}\frac{(\overbrace{a-x_2}^{-2h})^2}{2} - \int_a^b \frac{(x-x_2)^2}{2}dx \right] =$$

$$\frac{4h^3}{2} - \int_a^b \frac{(x-x_2)^2}{2}dx = 2h^3 - \left[\frac{(x-b)^3}{6}\right]_{x=a}^{x=b} = 2h^3 - \frac{\overbrace{(b-b)^3}^{=0}}{6} + \frac{(a-b)^3}{6} =$$

$$2h^3 + \frac{(a-b)^3}{6} = 2h^3 - \frac{8h^3}{6} = \frac{2h^3}{3}$$

logo, pela expressão (14)

$$A_0 = \frac{2h^3}{3 \times 2h^2} = \frac{1}{3}h \tag{15}$$

Da mesma forma podemos obter

$$A_1 = \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{\underbrace{(x_1-x_0)}_{h}\underbrace{(x_1-x_2)}_{-h}}dx = ... = \frac{4}{3}h \tag{16}$$

e

$$A_2 = \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{\underbrace{(x_2-x_0)}_{2h}\underbrace{(x_2-x_1)}_{h}}dx = ... = \frac{1}{3}h. \tag{17}$$

Assim, a aproximação dada pela regra de Simpson é

$$\int_a^b f(x)dx \approx S(f) := \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]. \tag{18}$$

Na Figura 7 apresentamos um exemplo da aplicação da regra de Simpson. A vermelho temos o gráfico de uma dada função f da qual se pretende calcular $\int_a^b f(x)dx$. A aproximação dada pela regra de Simpson corresponde à área delimitada pelos extremos a e b, o eixo dos $x's$, e o gráfico do polinómio p_2 que interpola f nos pontos x_0, x_1 e x_2 assinalados no gráfico.

Vamos agora apresentar a fórmula de erro desta regra de quadratura

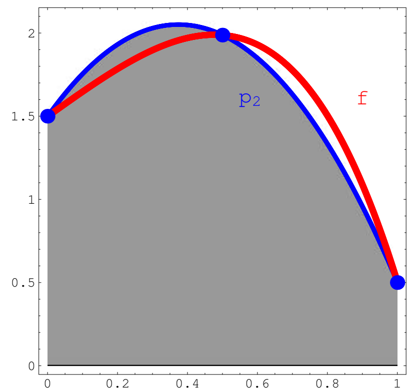

Figura 7: *Interpretação geométrica da regra de Simpson.*

Fórmula de Erro da Regra de Simpson (simples)

Vamos supor que $f \in C^3([a,b])$. Como vimos atrás, o erro de integração da regra de Simpson é dado pelo integral do erro de interpolação da função f pelo polinómio p_2 que interpola f nos pontos x_0, x_1 e x_2, ou seja

$$E^S(f) = \int_a^b \frac{f^{(3)}(\xi(x))}{6}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)dx,\ \xi(x) \in [a,b] \tag{19}$$

No entanto, é possível mostrar que se $f \in C^4([a,b])$, é válida a seguinte fórmula para o erro de integração

$$E^S(f) = -f^{(4)}(\xi)\frac{h^5}{90},\ \xi \in [a,b] \tag{20}$$

Assim, um majorante para o erro de integração da regra de Simpson, pode ser obtido pela seguinte fórmula

$$\left|E^S(f)\right| \leq max_{[a,b]}\left|f^{(4)}\right|\frac{h^5}{90}. \tag{21}$$

Na Tabela 2 resumimos os principais resultados que obtivemos relativos à regra de Simpson.

Regra de Simpson
$x_0 = a; \quad x_1 = \frac{a+b}{2}; \quad x_2 = b; \quad h = \frac{b-a}{2}; \quad \int_a^b f(x)dx \approx S(f)$
$S(f) = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]$
$E^S(f) = -f^{(4)}(\xi)\frac{h^5}{90},\ \xi \in [a,b]$
$\left\|E^S(f)\right\| \leq max_{[a,b]}\left\|f^{(4)}\right\|\frac{h^5}{90}$

Tabela 2: Principais resultados relativos à regra de Simpson

Fórmulas de Quadratura Compostas

Vamos obter novas fórmulas de quadratura para um intervalo $[a,b]$, dividindo o intervalo em vários subintervalos $[x_j, x_{j+1}]$. Em cada subintervalo vamos aplicar uma regra de quadratura simples. Depois somam-se os resultados de modo a obter uma aproximação para $\int_a^b f(x)dx$. Obtém-se assim uma regra de quadratura composta.

Fórmulas dos Trapézios Composta

Sejam x_0,x_1,...,x_N, $N+1$ pontos igualmente espaçados em $[a,b]$, com $x_0 = a$ e $x_N = b$ e $h = \frac{b-a}{N}$. Então,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + ... + \int_{x_{N-1}}^{x_N} f(x)dx$$

portanto

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=0}^{N-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx. \qquad (22)$$

Para obtermos uma aproximação de $\int_a^b f(x)dx$ aplica-se a regra dos trapézios (simples) a cada integral $\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx$, ou seja

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left[f(x_j) + f(x_{j+1})\right]. \qquad (23)$$

De acordo com as expressões (22) e (23), para obtermos uma aproximação do integral de f, deveremos somar todas as contribuições dos integrais em cada um dos subintervalos. Assim

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{h}{2} \left[f(x_j) + f(x_{j+1}) \right] \right) = \frac{h}{2} \sum_{j=0}^{N-1} \left[f(x_j) + f(x_{j+1}) \right] =$$

$$\frac{h}{2} \left[\underbrace{f(x_0) + f(x_1)}_{j=0} + \underbrace{f(x_1) + f(x_2)}_{j=1} + \ldots + \underbrace{f(x_{N-1}) + f(x_N)}_{j=N-1} \right] =$$

$$\frac{h}{2} \left[f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + f(x_N) \right] = h \left(\frac{1}{2} \left[f(x_0) + f(x_N) \right] + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) \right)$$

logo

$$\int_a^b f(x)dx \approx T_N(f) := h \left(\frac{1}{2} \left[f(x_0) + f(x_N) \right] + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) \right), \qquad (24)$$

a expressão da fórmula dos trapézios composta. Na Figura 8 apresentamos um exemplo da aplicação da regra dos trapézios composta com $N = 3$ e $N = 5$. Como vemos no segundo gráfico, com 6 nós de integração a curva a azul, correspondente à função aproximadora quase que "coincide" com a curva de f (a vermelho).

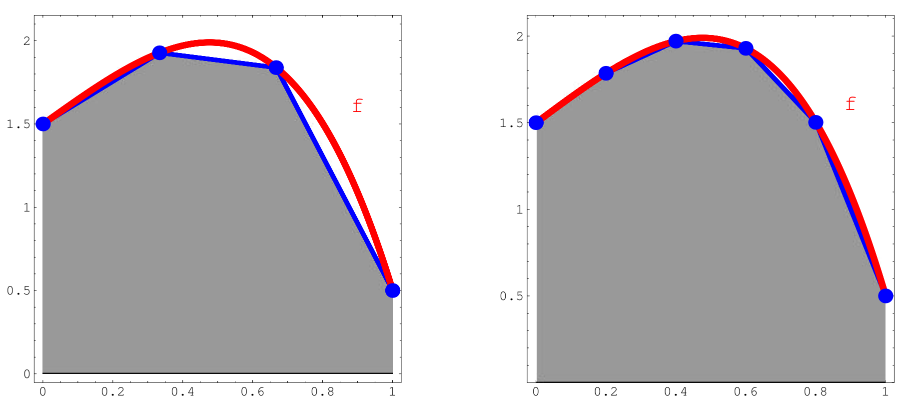

Figura 8: *Aplicação da regra dos trapézios composta com* $N = 3$ *e* $N = 5$.

Vamos agora deduzir uma fórmula de erro da regra dos trapézios composta

Erro de Integração da Fórmula dos Trapézios Composta

Estamos interessados em estimar o erro de integração da fórmula dos trapézios composta

$$E_N^T(f) = \int_a^b f(x)dx - T_N(f) = \sum_{j=0}^{N-1} \left[\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx - \frac{h}{2} [f(x_j) + f(x_{j+1})] \right]$$

Reparamos agora que cada termo do somatório representa o erro de integração da fórmula dos trapézios (simples) no intervalo $[x_j, x_{j+1}]$. Assim se $f \in C^2([a,b])$, pela expressão (12) obtemos

$$E_N^T(f) = \sum_{j=0}^{N-1} \left(-\frac{h^3}{12} f''(\xi_j) \right) = -\frac{h^3}{12} \sum_{j=0}^{N-1} f''(\xi_j), \xi_j \in [x_j, x_{j+1}].$$

Como $f \in C^2([a,b])$, pelo teorema de Weirstrass existem

$$m = min_{x \in [a,b]} f''(x) \qquad e$$

$$M = max_{x \in [a,b]} f''(x)$$

logo

$$m \leq f''(\xi_j) \leq M, \; j = 0, 1, ..., N-1.$$

Assim

$$Nm \leq \sum_{j=0}^{N-1} f''(\xi_j) \leq NM \Rightarrow m \leq \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f''(\xi_j) \leq M$$

e pelo teorema do valor intermédio

$$\exists \xi \in [a,b] : \; \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f''(\xi_j) = f''(\xi).$$

Então

$$E_N^T(f) = -\frac{h^3}{12} \sum_{j=0}^{N-1} f''(\xi_j) = -\frac{h^3}{12} N f''(\xi) = -\frac{h^2}{12}(b-a) f''(\xi)$$

pois $Nh = (b-a)$, ou seja

$$E_N^T(f) = -\frac{h^2}{12}(b-a) f''(\xi), \; \xi \in [a,b]. \tag{25}$$

Fórmula dos trapézios composta
$\int_a^b f(x)dx \approx T_N(f)$
$T_N(f) = h\left(\frac{1}{2}\left[f(x_0)+f(x_N)\right] + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j)\right)$
$E^S(f) = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi),\ \xi \in [a,b]$
$\left\|E_N^T(f)\right\| \leq \frac{h^2}{12}(b-a)max_{x\in[a,b]}\left\|f''\right\|$

Tabela 3: Principais resultados relativos à fórmula dos trapézios composta

Estimando f'' no intervalo $[a,b]$ obtemos a fórmula de majoração de erro

$$\left|E_N^T(f)\right| \leq \frac{h^2}{12}(b-a)max_{x\in[a,b]}\left|f''\right|. \tag{26}$$

Na Tabela 3 resumimos os principais resultados que obtivemos relativos à fórmula dos trapézios composta.

Fórmula de Simpson Composta

Analogamente à fórmula dos trapézios composta, podemos dividir o intervalo $[a,b]$ em subintervalos da forma $[x_j, x_{j+2}]$ e em cada subintervalo aplicar a fórmula de Simpson (simples).

Sejam $a = x_0$,x_1,...,$x_N = b$, $N+1$ pontos em $[a,b]$ onde N **par**. Então,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + ... + \int_{x_{N-2}}^{x_N} f(x)dx.$$

Aplicando a regra de Simpson (simples) a cada subintervalo $[x_j, x_{j+2}]$ obtemos

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\right] + \frac{h}{3}\left[f(x_2)+4f(x_3)+f(x_4)\right] + ...+$$

$$\frac{h}{3}\left[f(x_{N-2})+4f(x_{N-1})+f(x_N)\right]$$

logo

$$\int_a^b f(x)dx \approx S_N(f) := \frac{h}{3}\left(f(x_0) + f(x_N) + 4\sum_{j=1}^{N/2} f(x_{2j-1}) + 2\sum_{j=1}^{N/2-1} f(x_{2j})\right) \quad (27)$$

Na Figura 9 apresentamos um exemplo da aplicação da regra de Simpson composta com $N = 6$ e $N = 8$.

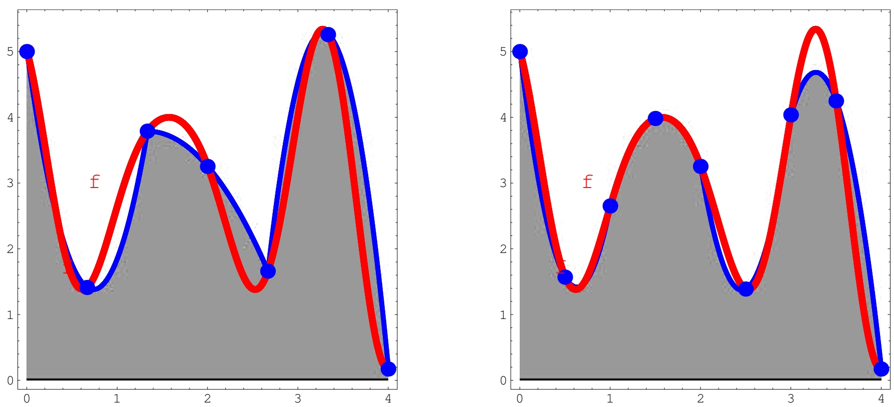

Figura 9: *Aplicação da regra de Simpson composta com $N = 6$ e $N = 8$.*

Erro de Integração da Fórmula de Simpson Composta

No caso da fórmula de Simpson composta pode ser provado que se $f \in C^4([a,b])$, então

$$E_N^S(f) = \int_a^b f(x)dx - S_N(f) = -\frac{h^5}{90}\sum_{j=1}^{N/2} f^{(4)}(\xi_j) = -\frac{Nh^5}{180} f^{(4)}(\xi)$$

e como $Nh = (b-a)$

$$E_N^S(f) = -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi),\ \xi \in [a,b]. \quad (28)$$

e estimando $f^{(4)}$ no intervalo $[a,b]$, obtemos a fórmula de majoração do erro

$$\left|E_N^S(f)\right| \leq \frac{(b-a)h^4}{180} max_{x\in[a,b]} \left|f^{(4)}(x)\right|. \quad (29)$$

Fórmula de Simpson composta

$$\int_a^b f(x)dx \approx S_N(f)$$

$$S_N(f) = \frac{h}{3}\left(f(x_0) + f(x_N) + 4\sum_{j=1}^{N/2} f(x_{2j-1}) + 2\sum_{j=1}^{N/2-1} f(x_{2j})\right)$$

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

$$\left|E_N^S(f)\right| \le \frac{(b-a)h^4}{180} max_{x\in[a,b]} \left|f^{(4)}(x)\right|$$

Tabela 4: Principais resultados relativos à fórmula de Simpson composta

Na Tabela 4 resumimos os principais resultados relativos à fórmula de Simpson composta.

Exemplo

Para ilustar a aplicação das fórmulas dos trapézios composta e de Simpson composta, vamos obter aproximações de $\int_0^1 f(x)dx$, com $f(x) = e^x + 2\cos(4x)$. Na Figura 10 representamos geometricamente as aproximações dadas pela fórmula dos trapézios composta e de Simpson composta quando $N = 4$.

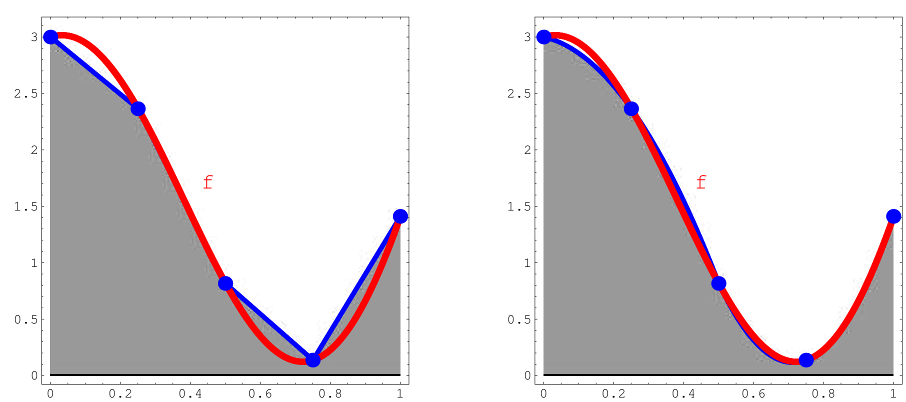

Figura 10: *Aplicação das regras dos trapézios composta e de Simpson composta.*

Na tabela seguinte apresentamos alguns valores de erros absolutos obtidos para diferentes valores de N com as fórmulas dos trapézios composta e de Simpson composta

N	$\lvert E_N^T \rvert$		$\lvert E_N^S \rvert$
8	0.01015		1.331×10^{-4}
16	0.0025		8.127×10^{-6}
32	6.327×10^{-4}		5.051×10^{-7}
64	1.581×10^{-4}		3.152×10^{-8}
128	3.953×10^{-5}		1.970×10^{-9}

Grau de Precisão de uma Fórmula de Quadratura

Sejam

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

e

$$Q(f) := \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

uma fórmula de quadratura que aproxima $I(f)$. O erro de integração é

$$E^Q(f) := I(f) - Q(f)$$

Definição 1. *O grau de precisão da fórmula $Q(f)$ é um número $r \in \mathbb{N}$, tal que $E^Q(p) = 0$, $\forall$ p polinómio de grau $\leq r$ e $E^Q(x^{r+1}) \neq 0$*

Exemplos

$\diamond$ Fórmula dos Trapézios

Vimos que usando a fórmula dos trapézios temos a seguinte expressão

$$\underbrace{\int_a^b f(x)dx}_{I(f)} = \underbrace{\frac{b-a}{2}\left[f(a)+f(b)\right]}_{Q(f)=T(f)} - \underbrace{\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)}_{E^Q(f)},\ \xi \in [a,b]$$

- $f(x) = p_1(x)$ (polinómio de grau ≤ 1)$\Rightarrow f''(x) = 0 \Rightarrow E^T(f) = 0$ logo o grau de precisão da regra dos trapézios é $r \geq 1$.
- $f(x) = x^2 \Rightarrow f''(x) = 2 \Rightarrow\ E^T(f) = -\frac{2(b-a)^3}{12} \neq 0$ logo o grau de precisão de $T(f)$ é $r = 1$.

◇ **Fórmula de Simpson**

Para a fórmula de Simpson obtivemos a seguinte expressão

$$\underbrace{\int_a^b f(x)dx}_{I(f)} = \underbrace{\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]}_{Q(f)=S(f)} - \underbrace{\left(\frac{(b-a)}{2}^5\right)\frac{f^{(4)}(\xi)}{90}}_{E^Q(f)},\ \xi\in[a,b]$$

- $f(x) = p_3(x)$ (polinómio de grau ≤ 3)$\Rightarrow f^{(4)}(x) = 0 \Rightarrow E^S(f) = 0$ logo o grau de precisão da regra de Simpson é $r \geq 3$.

- $f(x) = x^4 \Rightarrow f^{(4)}(x) = 4! \Rightarrow\ E^S(f) = \left(\frac{(b-a)}{2}^5\right)\frac{4!}{90} \neq 0$ logo o grau de precisão de $S(f)$ é $r = 3$.

Acabámos de ver que a regra dos trapézios simples tem grau de precisão $r = 1$ e a regra de Simpson $r = 3$. De acordo com a Definição 1 quer isto dizer que quando a função f da qual pretendemos calcular um integral for um polinómio de grau não superior a 1 (resp. 3), o erro de integração pela regra dos trapézios (resp. Simpson) é zero, e portanto, as regras de quadratura devolvem o valor exacto de $\int_a^b f(x)dx$.

Método dos Coeficientes Indeterminados

As fórmulas de quadratura que obtivemos até agora foram construidas de forma a que o valor obtido pela fórmula de quadratura fosse o valor exacto do integral de um polinómio interpolador de f, ou seja

$$Q(f) = I(p_n),\ \forall f \in C([a,b])$$

onde p_n é o polinómio de grau $\leq n$ que interpola f nos pontos $x_0, x_1, ..., x_n$. Portanto, por unicidade de polinómio interpolador

$$Q(p) = I(p), \forall \text{ p polinómio de grau} \leq \text{n.} \tag{30}$$

Vamos agora ver que os pesos $A_0, A_1, ..., A_n$ da fórmula de quadratura

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

podem ser obtidos a partir da condição (30).

Se escrevermos $p(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + ... + \alpha_n x^n$, então obtemos

$$Q(p) = I(p) \Leftrightarrow \sum_{i=0}^{n} A_i \; p(x_i) = \int_a^b p(x)dx \Leftrightarrow$$

$$\sum_{i=0}^{n} \left[A_i \left(\alpha_0 + \alpha_1 x_i + ... + \alpha_n x_i^n\right)\right] = \int_a^b \left(\alpha_0 + \alpha_1 x + ... + \alpha_n x^n\right) dx$$

e portanto

$$\alpha_0 \left(\sum_{i=0}^{n} A_i\right) + \alpha_1 \left(\sum_{i=0}^{n} A_i x_i\right) + ... + \alpha_n \left(\sum_{i=0}^{n} A_i x_i^n\right) = \alpha_0 \int_a^b 1dx + \alpha_1 \int_a^b xdx + ... + \alpha_n \int_a^b x^n dx$$

ou seja, a expressão (30) é equivalente a

$$\alpha_0 \left(\sum_{i=0}^{n} A_i - \int_a^b 1dx\right) + \alpha_1 \left(\sum_{i=0}^{n} A_i x_i - \int_a^b xdx\right) + ... + \alpha_n \left(\sum_{i=0}^{n} A_i x_i^n - \int_a^b x^n dx\right) = 0$$

para quaisquer $\alpha_0, \alpha_1, ..., \alpha_n \in \mathbb{R}$. Assim, obtemos o seguinte sistema

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^{n} A_i = \int_a^b 1dx \\ \sum_{i=0}^{n} A_i \; x_i = \int_a^b xdx \\ ... \\ \sum_{i=0}^{n} A_i \; x_i^n = \int_a^b x^n dx \end{cases}$$

ou seja

$$\begin{cases} Q(1) = I(1) \\ Q(x) = I(x) \\ ... \\ Q(x^n) = I(x^n) \end{cases} \tag{31}$$

Acabámos de provar que uma condição necessária e suficiente para que a condição (30) seja verificada é que os coeficientes $A_0, A_1, ..., A_n$ sejam solução do sistema (31) que matricialmente toma forma

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & ... & 1 \\ x_0 & x_1 & ... & x_n \\ .... & ... & ... & ... \\ x_0^n & x_1^n & ... & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ ... \\ A_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int_a^b 1dx \\ \int_a^b xdx \\ ... \\ \int_a^b x^n dx \end{pmatrix}. \tag{32}$$

As componentes do vector da direita são facilmente calculados reparando que

$$\int_a^b x^k dx = \frac{b^{k+1} - a^{k+1}}{k+1}.$$

A matriz do sistema é uma matriz de Vandermonde que sabemos ser invertível se os nós de integração forem distintos, pelo que o sistema tem solução única.