Integração Numérica

Maria Luísa Bambozzi de Oliveira

SME0300 – Cálculo Numérico

27 de Outubro, 2010 e 8 de Novembro, 2010

Introdução

Nas últimas aulas:

MMQ: aproximar função $y = f(x)$ por uma função $F(x)$, combinação linear de funções conhecidas,

$$f(x) \approx a_0 g_0(x) + a_1 g_1(x) + \ldots + a_m g_m(x) = F(x),$$

tal que a distância entre $f(x)$ e $F(x)$, $[(f - F, f - F)]^{1/2}$, seja mínima.
Aproximação polinomial, trigonométrica.

Interpolação Polinomial: aproximar função $y = f(x)$ por um polinômio de ordem n, $P_n(x)$, tal que

$$y_k = f(x_k) = P_n(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

Fórmula de Lagrange, Newton.

Integração Numérica

Integrar numericamente função $y = f(x)$ em dado intervalo $[a, b]$: integrar aproximação de $f(x)$, polinômio $P_n(x)$, no intervalo $[a, b]$.

Queremos resolver integrais da forma:

$$\int_a^b \omega(x) f(x)\, \mathrm{d}x,$$

onde $\omega(x) \geq 0$ e contínua em $[a, b]$.
$\omega(x)$ é **função peso**.

Aproximar integral com **Fórmulas de Quadratura** ou **Fórmulas de Integração Numérica**:

$$\int_a^b \omega(x) f(x)\, \mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

Fórmulas de Quadratura Interpolatória

Sejam

1) $x_0, x_1, \ldots, x_n$ $n+1$ pontos distintos em $[a, b]$;
2) $f_0, f_1, \ldots, f_n$ $n+1$ valores de função $y = f(x)$;
3) $P_n(x)$ polinômio de interpolação de $y = f(x)$ sobre $n+1$ pontos considerados,

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f_k \ell_k(x).$$

Então,

$$\int_a^b \omega(x) f(x)\, \mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f_k$$

onde $A_k = \int_a^b \omega(x) \ell_k(x)\, \mathrm{d}x$.

Fórmulas de Newton-Cotes

Para calcular integral numericamente de $f(x)$ em um intervalo finito $[a, b]$ tal que

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b,$$
$$x_{k+1} - x_k = h, \quad k = 0, 1, \ldots, n-1;$$
$$\omega(x) = 1,$$

então

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \int_{x_0}^{x_n} f(x)\ \mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} f_k \int_{x_0}^{x_n} \ell_k(x)\ \mathrm{d}x.$$

$\ell_k(x)$ para argumentos igualmente espaçados torna

$$\int_{x_0}^{x_n} \ell_k(x)\ \mathrm{d}x = h \int_0^n \frac{u(u-1)\ldots(u-(k-1))(u-(k+1))\ldots(u-n)}{k(k-1)\ldots(k-(k-1))(k-(k+1))\ldots(k-n)}\ \mathrm{d}u$$

Fórmulas de Newton-Cotes do tipo fechado

Caso 1: $n = 1, x_0, x_1$, polinômio do 1o. grau.
Regra do Trapézio

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\ \mathrm{d}x \approx \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right]$$

Dividindo intervalo $[a, b]$ em N sub-intervalos de amplitude $h = \frac{b-a}{N}$, aplicar Regra do Trapézio em cada sub-intervalo $[x_j, x_{j+1}]$, $j = 0, 1, \ldots, N-1$ (cada intervalo tem 2 pontos).

Regra do Trapézio Generalizada

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x)\ \mathrm{d}x \approx$$

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

Fórmulas de Newton-Cotes do tipo fechado

Caso 2: $n = 2, x_0, x_1, x_2$, polinômio do 2o. grau.
Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\, \mathrm{d}x \approx h \left[\frac{1}{3} f(x_0) + \frac{4}{3} f(x_1) + \frac{1}{3} f(x_2) \right]$$

Dividindo intervalo $[a, b]$ em (número par) $2N$ sub-intervalos de amplitude $h = \frac{b-a}{2N}$, aplicar Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson em cada sub-intervalo $[x_{2j}, x_{2j+2}]$, $j = 0, 1, \dots, N-1$ (cada intervalo tem 3 pontos).

Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson Generalizada

$$\int_{x_0}^{x_{2N}} f(x)\, \mathrm{d}x \approx$$

$$\approx \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 4f(x_{2N-1}) + f(x_{2N}) \right]$$

Fórmulas de Newton-Cotes do tipo fechado

Caso 3: $n = 3, x_0, x_1, x_2, x_3$, polinômio do 3o. grau.
Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)\, \mathrm{d}x \approx \frac{3}{8} h \left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3) \right]$$

Pode-se derivar a
Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson Generalizada
do mesmo modo que os casos anteriores, com quatro pontos por sub-intervalo de amplitude $h = \frac{b-a}{3N}$, com total de sub-divisões sendo múltipla de 3.

Erro nas fórmulas de Newton-Cotes

Teorema - Erro com n ímpar

Se os pontos $x_j = x_0 + jh,\ j = 0, 1, \ldots, n$ dividem $[a, b]$ em um número *ímpar* de intervalos iguais e $f(x)$ tem derivada de ordem $(n+1)$ contínua em $[a, b]$, então a expressão do erro para as fórmulas de Newton-Cotes do tipo fechado, com n ímpar, é dada por:

$$R(f) = \frac{h^{n+2} f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_0^n u(u-1)\ldots(u-n)\, \mathrm{d}u,$$

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

Teorema - Erro com n par

Se os pontos $x_j = x_0 + jh,\ j = 0, 1, \ldots, n$ dividem $[a, b]$ em um número *par* de intervalos iguais e $f(x)$ tem derivada de ordem $(n+2)$ contínua em $[a, b]$, então a expressão do erro para as fórmulas de Newton-Cotes do tipo fechado, com n par, é dada por:

$$R(f) = \frac{h^{n+3} f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_0^n \left(u - \frac{n}{2}\right) u(u-1)\ldots(u-n)\, \mathrm{d}u,$$

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

Erro nas fórmulas de Newton-Cotes

Regra do Trapézio

Erro sobre intervalo $[x_0, x_1]$, com $n = 1$:

Assim,

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\, \mathrm{d}x \approx \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right]$$

Erro nas fórmulas de Newton-Cotes

Regra do Trapézio

Erro sobre intervalo $[x_0, x_1]$, com $n = 1$:

$$R(f) = \frac{h^3 f''(\xi)}{2!} \int_0^1 u(u-1)\,\mathrm{d}u = \frac{h^3 f''(\xi)}{2!}\left(-\frac{1}{6}\right) =$$

$$= -\frac{h^3}{12} f''(\xi), \quad x_0 < \xi < x_1$$

Assim,

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right] - \frac{h^3}{12} f''(\xi), \quad x_0 < \xi < x_1$$

Erro nas fórmulas de Newton-Cotes

Regra do Trapézio Generalizada

Adicionar N erros da Regra do Trapézio, com $N = \frac{b-a}{h}$:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2\left(f(x_1) + \ldots + f(x_{N-1})\right) + f(x_N)\right]$$

Erro nas fórmulas de Newton-Cotes

Regra do Trapézio Generalizada

Adicionar N erros da Regra do Trapézio, com $N = \frac{b-a}{h}$:

$$
\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_N} f(x)\,\mathrm{d}x =& \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2\left(f(x_1) + \ldots + f(x_{N-1})\right) + f(x_N)\right] \\
& - \frac{Nh^3}{12} f''(\xi) \\
=& \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2\left(f(x_1) + \ldots + f(x_{N-1})\right) + f(x_N)\right] \\
& - \frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\xi), \quad x_0 < \xi < x_N
\end{aligned}
$$

Erro nas fórmulas de Newton-Cotes

Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson

Erro sobre intervalo $[x_0, x_2]$, com $n = 2$:

Assim,

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\ \mathrm{d}x \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]$$

Erro nas fórmulas de Newton-Cotes

Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson

Erro sobre intervalo $[x_0, x_2]$, com $n = 2$:

$$R(f) = \frac{h^5 f^{(4)}(\xi)}{4!} \int_0^2 (u-1)u(u-1)(u-2)\ \mathrm{d}u = \frac{h^5 f^{(4)}(\xi)}{4!} \left(-\frac{4}{15} \right) =$$

$$= -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi), \quad x_0 < \xi < x_2$$

Assim,

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\ \mathrm{d}x = \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \right] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi), \quad x_0 < \xi < x_2$$

Erro nas fórmulas de Newton-Cotes

Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson Generalizada

Adicionar N erros da Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson, com $N = \frac{b-a}{2h}$:

$$\int_{x_0}^{x_{2N}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx$$

$$\approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{2N-2}) + 4f(x_{2N-1}) + f(x_{2N})\right]$$

Erro nas fórmulas de Newton-Cotes

Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson Generalizada

Adicionar N erros da Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson, com $N = \frac{b-a}{2h}$:

$$
\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_{2N}} f(x)\,\mathrm{d}x = \\
&= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{2N-2}) + 4f(x_{2N-1}) + f(x_{2N})\right] \\
&\qquad - \frac{Nh^5}{90} f^{(4)}(\xi) \\
&= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{2N-2}) + 4f(x_{2N-1}) + f(x_{2N})\right] \\
&\qquad - \frac{(b-a)}{180} h^4 f^{(4)}(\xi), \quad x_0 < \xi < x_{2N}
\end{aligned}
$$

Erro nas fórmulas de Newton-Cotes

Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson (Simples e Generalizada):

Simples

$$R(f) = -\frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi), \quad x_0 < \xi < x_3$$

Generalizada

$$R(f) = -\frac{(b-a)h^4}{80} f^{(4)}(\xi), \quad x_0 < \xi < x_{3N},$$

com $N = \frac{b-a}{3h}$.

Polinômios Ortogonais

Para utilizar *fórmulas de quadratura de Gauss*, precisamos saber mais sobre *polinômios ortogonais*.

Sejam $\phi_0(x), \phi_1(x), \ldots$ família de polinômios de graus $0, 1, \ldots$. Se

$$\big(\phi_i(x), \phi_j(x)\big) = 0, \text{ para } i \neq j,$$
$$(\phi_i(x), \phi_i(x)) \neq 0, \text{ para } \phi_i(x) \neq 0,$$

então $\phi_0(x), \phi_1(x), \ldots$ são **ortogonais**.
Considerando produto escalar

$$(f, g) = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) \, \mathrm{d}x,$$

com $\omega(x) \geq 0$ e contínua em $[a, b]$; $\omega(x)$ é *função peso*.

Polinômios Ortogonais

Polinômios ortogonais mais conhecidos (e tabelados):

Legendre

Polinômios $P_0(x), P_1(x), \ldots$ obtidos usando prod. escalar

$$(f,g) = \int_{-1}^{1} f(x)g(x)\ \mathrm{d}x,$$

com $\omega(x) = 1, a = -1, b = 1.$

Tchebyshev

Polinômios $T_0(x), T_1(x), \ldots$ obtidos usando prod. escalar

$$(f,g) = \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)g(x)\ \mathrm{d}x,$$

com $\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, a = -1, b = 1.$

Polinômios Ortogonais

Polinômios ortogonais mais conhecidos (e tabelados):

Laguerre

Polinômios $L_0(x), L_1(x), \dots$ obtidos usando prod. escalar

$$(f, g) = \int_0^{\infty} e^{-x} f(x) g(x) \, \mathrm{d}x,$$

com $\omega(x) = e^{-x}, a = 0, b = \infty$.

Hermite

Polinômios $H_0(x), H_1(x), \dots$ obtidos usando prod. escalar

$$(f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) g(x) \, \mathrm{d}x,$$

com $\omega(x) = e^{-x^2}, a = -\infty, b = \infty$.

Fórmulas de Quadratura de Gauss

Fórmulas usadas para calcular valor aproximado de

$$\int_a^b \omega(x) f(x)\, \mathrm{d}x$$

através de

$$\int_a^b \omega(x) f(x)\, \mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k),$$

onde $A_k = \int_a^b \omega(x) \ell_k(x)\, \mathrm{d}x$.

Quadratura de Gauss

Procedimento

1. Determinar o polinômio ortogonal $\phi_{n+1}(x)$, segundo o produto escalar conveniente, com função peso $\omega(x)$ e em $[a, b]$.
2. Calcular as raízes $x_0, x_1, \dots, x_n$ de $\phi_{n+1}(x)$.
3. Determinar polinômios de Lagrange $\ell_k(x),\ k = 0, 1, \dots, n$, usando os pontos $x_0, x_1, \dots, x_n$ obtidos.
4. Calcular $A_k = \int_a^b \omega(x)\ell_k(x)\,\mathrm{d}x,\ k = 0, 1, \dots, n$.
5. Calcular valor de $f(x)$ em $x_0, x_1, \dots, x_n$.
6. Calcular

$$\int_a^b \omega(x) f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k).$$

Obs.: Vale para qualquer produto escalar. Para produtos escalares dados (Legendre, Tchebyshev, Laguerre, Hermite), itens **1** a **4** já executados e *tabelados*. Basta calcular os $f(x_k)$ e calcular a soma.

Fórmula de Quadratura de Gauss-Legendre

Para resolver integrais na forma

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x$$

(para intervalo diferente, fazer mudança de variável).
Usando tabela (Tabela 1 do livro-texto):

x_i	A_i
$N = 2$	
0.5773502691	$(1)0.1000000000$
$N = 3$	
0.7745966692	0.5555555555
0.0000000000	0.8888888888

Fórmula de Quadratura de Gauss-Tchebyshev

Para resolver integrais na forma

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)\,\mathrm{d}x$$

(para intervalo diferente, fazer mudança de variável).
Usando tabela (Tabela 2 do livro-texto):

x_i	A_i
$a = -1/2$	
$N = 2$	
0.7071067811	(1)0.1570796326
$N = 3$	
0.8660254037	(1)0.1047197551
0.0000000000	(1)0.1047197551

Fórmula de Quadratura de Gauss-Laguerre

Para resolver integrais na forma

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x)\, \mathrm{d}x$$

(para intervalo diferente, fazer mudança de variável).
Usando tabela (Tabela 3 do livro-texto):

x_i	A_i
$N = 2$	
0.5857864376	0.8535533905
$(1)0.3414213562$	0.1464466094
$N = 3$	
0.4157745567	0.7110930099
$(1)0.2294280360$	0.2785177335
$(1)0.6289945082$	$(-1)0.1038925650$

Fórmula de Quadratura de Gauss-Hermite

Para resolver integrais na forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x)\, \mathrm{d}x.$$

Usando tabela (Tabela 4 do livro-texto):

x_i		A_i
	$N = 2$	
0.7071067811		0.8862269254
	$N = 3$	
(1)0.1224744871		0.2954089751
0.0000000000		(1)0.1181635900

Erro nas Fórmulas de Gauss

Todas as fórmulas (Gauss-Legendre, Gauss-Tchebyshev, Gauss-Laguerre, Gauss-Hermite) possuem erro com derivadas de f de ordem $2n+2$, onde n é o índice do último ponto considerado no cálculo da integral.