Integração Numérica

Leonardo F. Guidi

DMPA – IME
UFRGS

Cálculo Numérico

Índice

Quadratura por interpolação

O método de quadratura por interpolação consiste em utilizar um polinômio interpolante $p(x)$ para aproximar o integrando $f(x)$ no domínio de integração $[a, b]$. Dessa forma a integral

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

pode ser aproximada pela integral

$$\int_a^b p(x)\,dx.$$

Se o integrando $f(x)$ é conhecido em n pontos distintos $x_1, \ldots, x_n$, podemos utilizar algum dos métodos desenvolvidos para encontrar um polinômio $p(x)$ que interpole $f(x_i)$, $i = 1, \ldots, n$.

Quadratura por interpolação

De acordo com o método de interpolação de Lagrange, uma vez determinados os polinômios de Lagrange $l_i(x)$, (e a interpolação $p(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\, l_i(x)$), a aproximação seria então dada por

$$\int_a^b p(x)\, dx = \int_a^b \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\, l_i(x)\, dx.$$

Quadratura por interpolação

De acordo com o método de interpolação de Lagrange, uma vez determinados os polinômios de Lagrange $l_i(x)$, (e a interpolação $p(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\, l_i(x)$), a aproximação seria então dada por

$$\int_a^b p(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \int_a^b l_i(x)\, dx.$$

Quadratura por interpolação

De acordo com o método de interpolação de Lagrange, uma vez determinados os polinômios de Lagrange $l_i(x)$, (e a interpolação $p(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\, l_i(x)$), a aproximação seria então dada por

$$\int_a^b p(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \int_a^b l_i(x)\, dx.$$

Quadratura por interpolação

De acordo com o método de interpolação de Lagrange, uma vez determinados os polinômios de Lagrange $l_i(x)$, (e a interpolação $p(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\, l_i(x)$), a aproximação seria então dada por

$$\int_a^b p(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\, C_i.$$

Quadratura por interpolação

De acordo com o método de interpolação de Lagrange, uma vez determinados os polinômios de Lagrange $l_i(x)$, (e a interpolação $p(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\, l_i(x)$), a aproximação seria então dada por

$$\int_a^b p(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\, C_i.$$

A aproximação da integral de $f(x)$ é dada então por

$$\int_a^b f(x)\, dx \approx \sum_{i=1}^{n} C_i\, f(x_i),$$

onde os coeficientes C_i são dados pelas integrais (que podem ser resolvidas exatamente) . Expressões dessa forma são denominadas *fórmulas de quadratura*. De uma maneira geral, todas as aproximações de operações de integração numérica podem ser descritas nessa forma – naturalmente, o coeficiente C_i vai depender do método utilizado.

Quadratura por interpolação

A chave para determinar os coeficientes é o fato de que os polinômios de Lagrange, $l_i(x)$, dependem apenas dos pontos x_i. Então, qualquer que seja o integrando $f(x)$, uma vez fixados os pontos x_i, os polinômios de Lagrange serão são sempre os mesmos. Se a escolha de $f(x)$ for um polinômio de grau menor ou igual a $n-1$, a interpolação é exata, ou seja, $f(x) \equiv p(x)$ e portanto

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b p(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} C_i\, f(x_i).$$

Como a integral indefinida de f é conhecida, então a expressão anterior torna-se uma equação para os n coeficientes C_i. A escolha de funções f da forma $f_j(x) = x^j$ para $j = 0, \ldots, n-1$ dá origem a um sistema linear para os coeficientes.

Quadratura por interpolação

Assim, a partir de um conjunto de pontos $\{x_i\}_{i=1}^{n}$distribuidos sobre o intervalo $[a, b]$, aproximamos a integral

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} C_i f(x_i),$$

onde C_i são solução de

$$\begin{cases} (x_1)^0 C_1 + (x_2)^0 C_2 + \ldots + (x_n)^0 C_n & = & \int_a^b x^0 \, dx & = & b - a \\ x_1 C_1 + x_2 C_2 + \ldots + x_n C_n & = & \int_a^b x \, dx & = & \dfrac{b^2 - a^2}{2} \\ & \vdots & \vdots & & \vdots \\ (x_1)^{n-1} C_1 + (x_2)^{n-1} C_2 + \ldots + (x_n)^{n-1} C_n & = & \int_a^b x^{n-1} \, dx & = & \dfrac{b^n - a^n}{n} \end{cases}$$

Quadratura por interpolação

Assim, a partir de um conjunto de pontos $\{x_i\}_{i=1}^{n}$distribuidos sobre o intervalo $[a,b]$, aproximamos a integral

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} C_i f(x_i),$$

onde C_i são solução de

$$\begin{cases} C_1 + C_2 + \ldots + C_n &= b - a \\ x_1 C_1 + x_2 C_2 + \ldots + x_n C_n &= \dfrac{b^2 - a^2}{2} \\ \vdots & \vdots \\ (x_1)^{n-1} C_1 + (x_2)^{n-1} C_2 + \ldots + (x_n)^{n-1} C_n &= \dfrac{b^n - a^n}{n} \end{cases}$$

Quadratura por interpolação

Exemplo

Vamos utilizar os pontos $x_1 = -1/2$, $x_2 = 0$ e $x_3 = 1/2$ para construir uma quadratura para a integral definida $\int_{-1/2}^{1/2} f(x)\,dx$. Nesse caso, o sistema para os coeficientes C_i toma a seguinte forma

$$\left\{\begin{array}{rcccccl} C_1 & + & C_2 & + & C_3 & = & 1 \\ -C_1 & + & 0 & + & C_3 & = & 0 \\ C_1 & + & 0 & + & C_3 & = & \frac{1}{3} \end{array}\right.$$

cuja solução é $C_1 = C_3 = \dfrac{1}{6}$ e $C_2 = \dfrac{2}{3}$. Portanto a aproximação de uma integral $\int_{-1/2}^{1/2} f(x)\,dx$ é dada por

$$\int_{-1/2}^{1/2} f(x)\,dx \approx \frac{1}{6}\left(f(-1/2) + 4f(0) + f(1/2)\right).$$

Quadratura por interpolação

Se conhecemos a aproximação de uma integral $\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^n f(x_i)\,C_i$ e quisermos encontrar uma aproximação para $\int_c^d f(y)\,dy$, devemos realizar a mudança de variável $y = \alpha x + \beta$ (transformação afim) que implica

$$\int_c^d f(y)\,dy = \alpha \int_{\frac{c-\beta}{\alpha}}^{\frac{d-\beta}{\alpha}} f(\alpha x + \beta)\,dx.$$

Os valores de α e β são determinados quando exigimos que os limites de integração coincidam: $\dfrac{c-\beta}{\alpha} = a$ e $\dfrac{d-\beta}{\alpha} = b$. Ou seja,

$$\alpha = \frac{d-c}{b-a} \quad \text{e} \quad \beta = \frac{bc-ad}{b-a}.$$

e assim,

$$\int_c^d f(y)\,dy = \alpha \int_a^b f(\alpha x + \beta)\,dx \approx \alpha \sum_{i=1}^n f(\alpha x_i + \beta)\,C_i.$$

Regra do trapézio

Quando os pontos de interpolação $a = x_1 < x_2 < \ldots < x_n = b$ são igualmente espaçados, o método de quadratura por interpolação recebe o nome de *fórmula de Newton-Cotes*.

Nesse caso, os coeficientes da quadratura são dados a partir de fórmulas que contém informação sobre o intervalo de integração e o número de pontos utilizados, na forma do parâmetro h,

$$h = \frac{b-a}{n-1},$$

dos pontos x_i,

$$x_i = a + (i-1)h, \qquad \text{onde } i = 1, 2, \ldots n$$

e dos pesos que dependem do número de pontos utilizados na quadratura.

Regra do trapézio

Um dos casos mais simples é a *regra do trapézio* na qual apenas dois pontos são utilizados. A quadratura com dois pontos é dada pela fórmula

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx C_1 f(a) + C_2 f(b),$$

onde C_1 e C_2 são solução do sistema de equações lineares

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = b - a \\ a\,C_1 + b\,C_2 = \dfrac{b^2 - a^2}{2} \end{cases}.$$

A solução do sistema é $C_1 = C_2 = \dfrac{b-a}{2}$.

Regra do trapézio

Em termos de x_i e h, a regra do trapézio para a integral $\int_a^b f(x)\,dx$ assume a forma

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\left(f(a)+f(b)\right) = \frac{h}{2}\left(f(x_1)+f(x_2)\right).$$

Regra do trapézio

Estudamos no capítulo sobre interpolação que se $f^{(n)}$ for contínua em um intervalo que contenha (a,b), então a cada x no intervalo de interpolação $[a,b]$, existe um $\xi \in (a,b)$ (que depende de x, ou seja, $\xi(x)$) tal que

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

onde n é o número de pontos de interpolação e x_i, para $i = 1, 2, \dots, n$ são os pontos de interpolação.

Regra do trapézio

Essa relação entre f e p permite estimar o erro de truncamento cometido ao aproximarmos a integral pela regra do trapézio. Então, como

$$\frac{h}{2}(f(a)+f(b)) = \int_a^b p(x)\,dx,$$

em vista da relação entre f e p temos que

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx - \frac{h}{2}(f(a)+f(b)) &= \int_a^b (f(x)-p(x))\,dx \\
&= \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2}(x-a)(x-b)\,dx.
\end{aligned}$$

Regra do trapézio

Com o objetivo de tornar explícita a dependência desse termo em h, vamos realizar a mudança de variável de integração $y = \dfrac{x-a}{h}$. Nesse caso, quando $x = a$, $y = 0$ e quando $x = b$, $y = 1$. Dessa forma,

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx - \frac{h}{2}(f(a)+f(b)) &= \int_0^1 \frac{f''(\xi(a+yh))}{2} h\,y\,h(y-1)\,(h\,dy) \\
&= \frac{h^3}{2}\int_0^1 f''(\xi(a+yh))\,y(y-1)\,dy
\end{aligned}$$

Regra do trapézio

Com o objetivo de tornar explícita a dependência desse termo em h, vamos realizar a mudança de variável de integração $y = \dfrac{x-a}{h}$. Nesse caso, quando $x = a$, $y = 0$ e quando $x = b$, $y = 1$. Dessa forma,

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx - \frac{h}{2}(f(a)+f(b)) &= \int_0^1 \frac{f''(\xi(a+yh))}{2} h\,y\,h(y-1)\,(h\,dy)\\ &= \frac{h^3}{2}\int_0^1 f''(\xi(a+yh))\,y(y-1)\,dy\end{aligned}$$

1º teorema do valor médio para a integração

Se f e g são funções contínuas e g não muda de sinal no intervalo fechado $[c,d]$, então existe um ponto $\eta \in (c,d)$ tal que

$$\int_c^d f(x)g(x)\,dx = f(\eta)\int_c^d g(x)\,dx.$$

Regra do trapézio

Uma vez que $y(y-1)$ não muda de sinal no intervalo $[0,1]$, o teorema garante a existência de um $\eta \in (0,1) \Rightarrow \exists \xi \in (a,b)$ tal que

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx - \frac{h}{2}(f(a)+f(b)) &= \frac{h^3}{2} f''(\xi) \int_0^1 y(y-1)\,dy \\
&= -\frac{h^3}{12} f''(\xi).
\end{aligned}$$

Regra do trapézio

Regra do trapézio

Se f é um função de classe $\mathscr{C}^2(a,b)$, então existe um $\xi \in (a,b)$ tal que

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left(f(x_1)+f(x_2)\right) - \frac{h^3}{12}f''(\xi),$$

onde $h = b-a$ e $x_i = a+(i-1)h$.

Exemplo

Vamos estudar novamente a aproximação da integral $\int_{-1/2}^{1/2} e^{-x^2} dx$, agora porém, a partir da fórmula do trapézio para quadratura. O intervalo de integração é $\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$, portanto nesse caso, $h = 1$. De acordo com a fórmula do trapézio

$$\int_{-1/2}^{1/2} e^{-x^2} dx \approx \frac{1}{2}\left(e^{-1/4} + e^{-1/4}\right) = 0.77880078\ldots$$

Quanto ao erro de truncamento na aproximação, sabemos que existe um $\zeta \in \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ tal que

$$\int_{-1/2}^{1/2} e^{-x^2} dx - \frac{1}{2}\left(e^{-1/4} + e^{-1/4}\right) = -\frac{1^3}{12}\left(4\zeta^2 - 2\right) e^{-\zeta^2}.$$

Exemplo

A função $-\frac{1}{12}\left(4\zeta^2-2\right)e^{-\zeta^2}$ transforma o intervalo $\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ no intervalo $\left(\frac{1}{12}e^{-1/4},\frac{1}{6}\right)=(0.06490\ldots,0.1\bar{6})$. Esse novo intervalo determina a região de possíveis valores para o erro de truncamento. De fato, a diferença entre o valor exato e a aproximação é $0.143761\ldots\in(0.06490\ldots,0.1\bar{6})$.

Regra de Simpson

A regra de Simpson é a fórmula de quadratura de Newton com três pontos. Nesse caso, o intervalo de integração $[a, b]$ é dividido em duas partes pelo ponto intermediário $\dfrac{a+b}{2}$. Assim, os três pontos de interpolação x_1,x_2 e x_3 são dados por $x_1 = a$, $x_2 = a + h = \dfrac{a+b}{2}$ e $x_3 = a + 2h = b$, onde $h = \dfrac{b-a}{2}$ é a separação entre os pontos consecutivos.
A fórmula de quadratura possui a forma

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{3} C_i f(x_i),$$

onde C_i, $i = 1, 2$e 3 são solução do seguinte sistema de equações lineares

Regra de Simpson

$$\begin{cases} C_1 + C_2 + C_3 = b - a \\ aC_1 + \frac{a+b}{2} C_2 + bC_3 = \frac{b^2 - a^2}{2} \\ a^2 C_1 + \left(\frac{a+b}{2}\right)^2 C_2 + b^2 C_3 = \frac{b^3 - a^3}{3} \end{cases}.$$

A solução do sistema é dada por

$$C_1 = \frac{b-a}{6}, \; C_2 = \frac{2}{3}(b-a) \text{ e } C_3 = \frac{b-a}{6}.$$

Em termos da separação entre os pontos $h = \frac{b-a}{2}$,

$$C_1 = \frac{h}{3}, \; C_2 = \frac{4}{3}h \text{ e } C_3 = \frac{h}{3}.$$

Regra de Simpson

Quanto ao erro de truncamento cometido na aproximação, o mesmo pode ser estimado de maneira análoga à da regra do trapézio.

Regra de Simpson

Se f é um função de classe $\mathscr{C}^4(a,b)$, então existe um $\xi \in (a,b)$ tal que

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f(x_1) + 4f(x_2) + f(x_3)\right) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi),$$

onde $h = \dfrac{b-a}{2}$, $x_i = a + (i-1)h$ e $i = 1, 2, 3$.

Regras de ordem superior

Regra 3/8 – 4 pontos

Se f é um função de classe $\mathscr{C}^4(a,b)$, então existe um $\xi \in (a,b)$ tal que

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{3}{8}h(f(x_1)+3f(x_2)+3f(x_3)+f(x_4)) - \frac{3h^5}{80}f^{(4)}(\xi),$$

onde $h = \dfrac{b-a}{3}$, $x_i = a+(i-1)h$ e $i = 1,2,3,4$.

Regra de Boole – 5 pontos

Se f é um função de classe $\mathscr{C}^6(a,b)$, então existe um $\xi \in (a,b)$ tal que

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{2}{45}h(7f(x_1)+32f(x_2)+12f(x_3)+32f(x_4)+7f(x_5)) - \frac{8h^7}{945}f^{(6)}(\xi),$$

onde $h = \dfrac{b-a}{4}$, $x_i = a+(i-1)h$ e $i = 1,2,3,4,5$.

Regras de ordem superior

No entanto devemos levar em conta que *não há garantias* de que o aumento do número de pontos implica a convergência da quadratura para o valor exato da integral.

Isto é um reflexo direto do fato de que as aproximações que estudamos até aqui são desenvolvidas a partir da integração de um polinômio que interpola f em pontos igualmente espaçados e, como já estudamos no capítulo sobre interpolação, existem exemplos de funções contínuas e com todas as derivadas contínuas em algum intervalo cuja interpolação polinomial com pontos igualmente espaçados não converge para f quando o número de pontos cresce (lembre-se da função de Runge $f(x) = \dfrac{1}{1+25x^2}$ no intervalo $x \in [-1,1]$).

A seguir veremos uma técnica de quadratura que garante a convergência para o valor exato da integral de f quando o número de pontos $n \to \infty$.

Quadraturas compostas

Uma maneira de evitar as instabilidades relacionadas à interpolação em pontos igualmente espaçados consiste em particionar o intervalo de integração em diversos subintervalos e realizar a quadratura newtoniano em cada um desses subintervalos com uma pequena quantidade de pontos.

Dessa forma, o aumento do número total de pontos implica uma menor variação da função no domínio de integração de cada quadratura e consequentemente, a aproximação do integrando por um polinômio torna-se cada vez melhor. No limite, desconsiderando os erros de arredondamento realizados pela máquina que realiza as operações, a aproximação converge para o valor exato quando o integrando for suficientemente suave.

Veremos duas regras compostas, a regra composta do trapézio e a regra composta de Simpson.

Regra composta do trapézio

A regra composta do trapézio consiste em dividir o intervalo de integração $[a,b]$ em $n-1$ sub-intervalos

$$[a,x_2]\bigcup[x_2,x_3]\bigcup\ldots\bigcup[x_{n-1},b]=[a,b],$$

de mesma extensão $h=\dfrac{b-a}{n-1}$ e aplicar a regra do trapézio em cada intervalo $[x_k,x_{k+1}]$.

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \int_{a=x_1}^{x_2} f(x)\,dx+\int_{x_2}^{x_3} f(x)\,dx+\ldots+\int_{x_{n-1}}^{b=x_n} f(x)\,dx \\
&\approx \frac{h}{2}(f(a)+f(x_2))+\frac{h}{2}(f(x_2)+f(x_3))+\ldots+\frac{h}{2}(f(x_{n-1})+f(b)) \\
&= h\left(\frac{1}{2}f(a)+f(x_2)+f(x_3)+\ldots+f(x_{n-2})+f(x_{n-1})+\frac{1}{2}f(b)\right),
\end{aligned}$$

onde $x_1=a$, $x_n=b$ e $x_k=a+(k-1)h$, para $k=1,\ldots,n$.

Regra composta do trapézio

Erro de truncamento

A cada subintervalo $[x_k, x_{k+1}]$ podemos estimar o erro de truncamento cometido na regra do trapézio: se $f \in \mathscr{C}^2(a,b)$, existe um $\xi_k \in (x_k, x_{k+1})$ tal que

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left(f(x_{k+1}) + f(x_k)\right) - \frac{h^3}{12} f''(\xi_k).$$

A união de todos os intervalos implica

$$\int_a^b f(x)\,dx = h\left(\frac{1}{2}f(a) + f(x_2) + \ldots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2}f(b)\right) - \frac{h^3}{12}\sum_{k=1}^{n-1} f''(\xi_k).$$

Como, por hipótese, a função f'' é contínua, então existe um $\xi \in (a,b)$ tal que

$$f''(\xi) = \frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^{n-1} f''(\xi_k).$$

Regra composta do trapézio

Por outro lado, $h = \dfrac{b-a}{n-1}$ e portanto, podemos reescrever a igualdade como

$$\int_a^b dx\, f(x) = h\left(\frac{1}{2}f(a) + f(x_2) + \ldots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2}f(b)\right) - \frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi),$$

onde $\xi \in (a, b)$.

Regra composta do trapézio

Regra Composta do Trapézio

Se f é um função de classe $\mathscr{C}^2(a,b)$, então existe um $\xi \in (a,b)$ tal que

$$\int_a^b dx\, f(x) = h\left(\frac{1}{2}f(a) + f(x_2) + \ldots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2}f(b)\right) - \frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi),$$

onde $h = \dfrac{b-a}{n-1}$, $x_i = a + (i-1)h$ e $i = 1, 2, \ldots, n$.

Note que nesse caso, na ausência de erros de arredondamento, a aproximação dada pela regra composta converge para a integral exata no limite $h \to 0$.

Regra composta de Simpson

De maneira totalmente análoga, construimos uma quadratura composta a partir da união das quadraturas realizadas nos subintervalos com três pontos igualmente espaçados. A partir de um número **ímpar** de pontos igualmente espaçados de $h = \dfrac{b-a}{n-1}$, aproximamos a integral de f no intervalo $[a,b]$ através de quadraturas de Simpson nos $\dfrac{n-1}{2}$ intervalos $[a,x_3]$, $[x_3,x_5],\ldots,[x_{n-2},b]$:

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \int_{a=x_1}^{x_3} f(x)\,dx + \int_{x_3}^{x_5} f(x)\,dx + \ldots + \int_{x_{n-2}}^{b=x_n} f(x)\,dx \\
&\approx \frac{h}{3}\left(f(a)+4f(x_2)+f(x_3)\right) + \frac{h}{3}\left(f(x_3)+4f(x_4)+f(x_5)\right) + \ldots \\
&\quad \ldots + \frac{h}{3}\left(f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(b)\right) \\
&= \frac{h}{3}\left[f(a)+4\left(f(x_2)+f(x_4)+\ldots+f(x_{n-1})\right)+\right. \\
&\quad \left. +2\left(f(x_3)+f(x_5)+\ldots+f(x_{n-2})\right)+f(b)\right],
\end{aligned}
$$

Regra composta de Simpson

A regra de Simpson composta pode ser representada pelo somatório

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\sum_{k=1}^{n} C_k f(x_k),$$

onde

$$C_k = \begin{cases} 1, & \text{se } k = 1 \text{ ou } k = n \\ 4, & \text{se } k \text{ for par} \\ 2, & \text{se } k \text{ for ímpar} \end{cases} .$$

A análise do erro de truncamento cometido na aproximação segue a linha já estudada na regra do trapézio composta

Regra composta de Simpson

Regra Composta do Simpson

Se f é um função de classe $\mathscr{C}^4(a,b)$, então existe um $\xi \in (a,b)$ tal que

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\sum_{k=1}^{n} C_k f(x_k) - \frac{h^4}{180}(b-a)f^{(4)}(\xi),$$

onde

$$C_k = \begin{cases} 1, & \text{se } k=1 \text{ ou } k=n \\ 4, & \text{se } k \text{ for par} \\ 2, & \text{se } k \text{ for ímpar} \end{cases}.$$

$h = \dfrac{b-a}{n-1}$, $x_i = a+(i-1)h$ e $i = 1,2,\ldots,n$.

Método de Romberg

Se f for uma função de classe $\mathscr{C}^{2k+2}$ em um intervalo $[a, b]$, então de acordo com a fórmula de Euler-Maclaurin a sua integral definida nesse intervalo satisfaz a expressão

$$\int_a^b f(x)\,dx = T_n + c_2 h^2 + c_4 h^4 + \ldots + c_{2k} h^{2k} + c_{2k+2}\, h^{2k+2} f^{(2k+2)}(\xi),$$

onde T_n é a regra composta do trapézio com n pontos e espaçamento h, os coeficientes $c_2, \ldots, c_{2k}$ não dependem de h e $\xi \in (a, b)$ é um função que representa o resto do soma.

Método de Romberg

Se f for uma função de classe $\mathscr{C}^{2k+2}$ em um intervalo $[a,b]$, então de acordo com a fórmula de Euler-Maclaurin a sua integral definida nesse intervalo satisfaz a expressão

$$\int_a^b f(x)\,dx = T_n + c_2 h^2 + c_4 h^4 + \ldots + c_{2k} h^{2k} + c_{2k+2}\, h^{2k+2} f^{(2k+2)}(\xi),$$

onde T_n é a regra composta do trapézio com n pontos e espaçamento h, os coeficientes $c_2, \ldots, c_{2k}$ não dependem de h e $\xi \in (a,b)$ é um função que representa o resto do soma.
Portanto, de acordo com a fórmula, uma quadratura no mesmo intervalo com $2n-1$ pontos, corresponde a um espaçamento igual a metade do original, assim

$$\int_a^b f(x)\,dx = T_{2n-1} + c_2\left(\frac{h}{2}\right)^2 + c_4\left(\frac{h}{2}\right)^4 + \ldots + c_{2k}\left(\frac{h}{2}\right)^{2k} + c_{2k+2}\left(\frac{h}{2}\right)^{2k+2} f^{(2k+2)}(\tilde{\xi}).$$

Isto permite combinar as equações de modo que o resultado da combinação linear cancela o termo h^2:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{4\,T_{2n-1} - T_n}{3} + d_4 h^4 + \ldots + d_k h^{2k} + O\left(h^{2k+2}\right).$$

Método de Romberg

A quadratura resultante, $\dfrac{4\,T_{2n-1} - T_n}{3}$ é a quadratura de Simpson composta com $2n-1$ pontos. O mesmo procedimento pode ser repetidamente iterado com o objetivo de produzir resultados com erro de truncamento de ordem superior. Algumas dessas combinações correspondem a regras compostas de Newton-Cotes.

O método de Romberg propõe a seguinte abordagem. Colecionamos m quadraturas compostas pela regra do trapézio com $3, 5, 9, \ldots, 2^m + 1$ pontos. Essas quadraturas podem ser convenientemente calculadas segundo a recursão:

$$T_{2^j+1} = \frac{1}{2}\,T_{2^{j-1}+1} + h_j \sum_{k=1}^{2^{j-1}} f\left(a + (2k-1)h_j\right),$$

onde $h_j = \dfrac{b-a}{2^j}$, $T_2 = h_0 \left(\dfrac{1}{2} f(a) + \dfrac{1}{2} f(b)\right)$ e $j = 1, 2, \ldots m$.

Método de Romberg

De acordo com a extrapolação de Richardson, podemos encontrar a quadratura de Simpson composta com 2^j+1 pontos através da combinação

$$\frac{4T_{2^j+1} - T_{2^{j-1}+1}}{3}.$$

Vamos simbolizar essas novas quadraturas por $R_{j,1}$, ou seja,

$$R_{j,1} = \frac{4T_{2^j+1} - T_{2^{j-1}+1}}{3}$$

para $j = 1, 2, \ldots, m$. Uma nova sequência de extrapolações de Richardson cancelará os termos h^4. Denominamos essas novas quadraturas compostas por $R_{j,2}$:

$$R_{j,2} = \frac{16R_{j,1} - R_{j-1,1}}{15}.$$

Método de Romberg

Através de um processo de indução, chegamos à recorrência

$$R_{j,n} = \frac{4^n R_{j,n-1} - R_{j-1,n-1}}{4^n - 1},$$

para $n = 1, 2, \ldots, j$, onde $R_{j,0} \equiv T_{2^j+1}$. A relação de recorrência é a expressão do método de Romberg.

Método de Romberg

Em resumo:

- calculamos a quadratura do trapézio simples e as m quadraturas do trapézio compostas T_{2^j+1}, de acordo com a recorrência.
- em seguida, de acordo com a relação de recorrência , calculamos recursivamente as quadraturas $R_{j,1}$ para $j = 1, 2, \ldots, m$, $R_{j,2}$ para $j = 2, \ldots, m$, $R_{j,3}$ para $j = 3, \ldots, m$, etc. até $R_{m,m}$ que é a aproximação de ordem $O\left(h_m^{2m+2}\right)$ para a integral $\int_a^b f(x)\,dx$.

Quadratura Gaussiana

Os métodos de quadratura que envolvem a interpolação polinomial em n pontos fornecem, por construção, o valor exato da integral quando o integrando é um polinômio de grau menor ou igual $n-1$.

Uma vez escolhidos os n pontos $x_i \in [a, b]$, utilizamos os n polinômios x^j, $j = 0, 1, \ldots, n-1$ para determinar os coeficientes C_i da quadratura através da solução do sistema de equações lineares

$$\sum_{i=1}^{n} C_i \, (x_i)^j = \int_a^b x^j \, dx = \frac{b^{j+1} - a^{j+1}}{j+1}.$$

A quadratura gaussiana utiliza as mesmas equações, porém trata os pontos de interpolação x_i como incógnitas e inclui outras n equações relacionadas à interpolação dos polinômios x^j, $j = n, n+1, \ldots, 2n-1$.

Quadratura Gaussiana

A fórmula de quadratura é determinada pela solução do sistema de $2n$ equações não lineares

$$\sum_{i=1}^{2n} C_i (x_i)^j = \frac{b^{j+1} - a^{j+1}}{j+1}, \qquad j = 0, 1, 2, \ldots, 2n-1.$$

em termos das incógnitas C_i e x_i, $i = 1, 2, \ldots, 2n$.

Como já estudamos, através de mudanças de variáveis podemos mudar o intervalo de integração.
Desse modo não perdemos nenhuma generalidade ao estudar a solução do sistema não linear dado pelo limite de integração $[-1, 1]$.

Quadratura Gaussiana

$$\left\{\begin{array}{rcccl}
C_1 + C_2 + \ldots + C_n & = & \int_{-1}^{1} x^0\, dx & = & 1-(-1)=2 \\
x_1 C_1 + x_2 C_2 + \ldots + x_n C_n & = & \int_{-1}^{1} x\, dx & = & \frac{1^2-(-1)^2}{2} = 0 \\
(x_1)^2 C_1 + (x_2)^2 C_2 + \ldots + (x_n)^2 C_n & = & \int_{-1}^{1} x^2\, dx & = & \frac{1^3-(-1)^3}{3} = \frac{2}{3} \\
\vdots & & \vdots & & \vdots \\
(x_1)^k C_1 + (x_2)^k C_2 + \ldots + (x_n)^k C_n & = & \int_{-1}^{1} x^k\, dx & = & \left\{\begin{array}{ll} \frac{2}{k+1}, & k \text{par} \\ 0, & k \text{ímpar} \end{array}\right. \\
\vdots & & \vdots & & \vdots \\
(x_1)^{2n-1} C_1 + (x_2)^{2n-1} C_2 + \ldots + (x_n)^{2n-1} C_n & = & \int_{-1}^{1} x^{2n-1}\, dx & = & \frac{1^{2n}-(-1)^{2n}}{2n} = 0
\end{array}\right.$$

Quadratura Gaussiana

É possível demonstrar que esse sistema possui apenas uma solução que satisfaça os critérios, $-1 < x_i < 1$ e $C_i > 0$.
Apesar da aparente complexidade apresentada pelo sistema , não é difícil perceber que os pontos x_i satisfazem uma equação polinomial (basta isolar as variáveis C_i e em seguida as variáveis x_i a partir da primeira equação.
Na realidade, é possível demonstrar que os pontos x_i são as raízes do polinômio de Legendre de grau n, $\mathscr{P}_n$.
O polinômio de Legendre de grau n, $\mathscr{P}_n(x)$ pode ser determinado através da fórmula de Rodrigues:

$$\mathscr{P}_n(x) = \frac{1}{2^n(n!)} \frac{d^n}{dx^n} \left(\left(x^2 - 1 \right)^n \right).$$

De acordo com sua estrutura, é possível determinar as raízes exatas até, pelo menos, $n = 9$.

Quadratura Gaussiana

Os coeficientes C_i são então dados pela expressão

$$C_i = \frac{2}{(1 - x_i^2)\left(\mathscr{P}_n'(x_i)\right)^2}.$$

Isto permite, ao menos numericamente, construir a quadratura com um número arbitrário de pontos.

Quadratura Gaussiana

As três primeiras quadraturas gaussianas no intervalo $(-1,1)$ são dadas exatamente pelos coeficientes:

- 2 pontos: $C_1 = C_2 = 1$ e $-x_1 = x_2 = \dfrac{1}{\sqrt{3}}$
- 3 pontos: $C_1 = C_3 = \dfrac{5}{9}$, $C_2 = \dfrac{8}{9}$, $-x_1 = x_3 = \sqrt{\dfrac{3}{5}}$ e $x_2 = 0$.
- 4 pontos: $C_1 = C_4 = \dfrac{1}{36}\left(18 - \sqrt{30}\right)$, $C_2 = C_3 = 1 - C_1$, $-x_1 = x_4 = \sqrt{\dfrac{1}{35}\left(15 + 2\sqrt{30}\right)}$, $-x_2 = x_3 = \sqrt{\dfrac{1}{35}\left(15 - 2\sqrt{30}\right)}$.
- 5 pontos: $C_1 = C_5 = \dfrac{1}{900}\left(322 - 13\sqrt{70}\right)$, $C_2 = C_4 = \dfrac{1}{900}\left(322 + 13\sqrt{70}\right)$, $C_3 = \dfrac{128}{225}$, $-x_1 = x_5 = \sqrt{\dfrac{1}{63}\left(35 + 2\sqrt{70}\right)}$, $-x_2 = x_4 = \sqrt{\dfrac{1}{63}\left(35 - 2\sqrt{70}\right)}$ e $x_3 = 0$.

Integrais impróprias

Nesta seção veremos algumas estratégias que podem ser adotadas para aproximar o valor exato de algumas "classes" de integrais impróprias.

Integrais impróprias são aquelas que possuem alguma singularidade nas extremidades do intervalo de integração. Tipicamente, quando o intervalo de integração é toda reta real ou uma semirreta, ou quando o integrando possui uma singularidade integrável em um ou nos dois extremos do intervalo.

$$\int_a^\infty f(x)dx := \lim_{y\to\infty} \int_a^y f(x)dx$$

Inicialmente trataremos os integrandos que possuem singularidade em uma das extremidades do intervalo de integração (finito). Os demais casos podem ser reescritos como um desses.

Integrais impróprias

Uma classe de singularidades integráveis muito comum é caracterizada pela presença do termo

$$\frac{1}{(x-a)^r}$$

onde $a \in \mathbb{R}$ e $0 < r < 1$. Neste caso, apesar da singularidade em $x = a$, a integral em um intervalo $[a, b]$ é bem definida:

$$\int_a^b \frac{1}{(x-a)^r}\,dx = \frac{1}{1-r}(x-a)^{1-r}\Big|_{x=a}^{x=b} = \frac{1}{1-r}(b-a)^{1-r} \in \mathbb{R}$$

O fato de integrandos dessa família admitirem primitivas cuja expressão é conhecida permite o tratamento de integrais de funções $f : (a, b] \to \mathbb{R}$ da forma

$$f(x) = \frac{g(x)}{(x-a)^r}, \qquad r \in (0,1),$$

onde $g : [a, b] \to \mathbb{R}$ é uma função contínua de classe $\mathscr{C}^n[a, b]$, cuja derivada $g^{(n+1)}$ existe em um aberto que contém a.

Integrais impróprias

Neste caso, o Teorema de Taylor com a fórmula de erro de Lagrange garante que para cada $x \in [a,b]$, existe um $\xi \in (a,x)$ tal que

$$g(x) = g(a) + g'(a)(x-a) + \frac{1}{2}g''(a)(x-a)^2 + \ldots + \frac{1}{(n+1)!}g^{(n+1)}(\xi)(x-a)^{n+1}.$$

Por simplicidade, vamos considerar o caso em que g é de classe $\mathscr{C}^2[a,b]$ e possui a terceira derivada limitada no intervalo aberto (a,b).
Seja p_2 o polinômio de grau 2 formado pelos três primeiros termos da série de Taylor anterior e a seguinte decomposição para f

$$f(x) = \frac{p_2(x)}{(x-a)^r} + \frac{g(x) - p_2(x)}{(x-a)^r}.$$

Como o denominador do último termo contém potências de $(x-a)$ maiores ou iguais a 3, esse termo é livre de singularidades e seu limite é igual a zero quando $x \to a^+$.

Integrais impróprias

Iremos representar esse termo pela função $G : [a, b] \to \mathbb{R}$ (note que G está definida em $x = a$)

$$G(x) = \begin{cases} \dfrac{g(x) - p_2(x)}{(x-a)^r}, & x > a \\ 0, & x = a \end{cases}.$$

Assim, a integral original é decomposta na forma da soma

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \frac{p_2(x)}{(x-a)^r}dx + \int_a^b G(x)dx.$$

O primeiro termo contém a singularidade mas o seu valor exato é conhecido:

$$\int_a^b \frac{p_2(x)}{(x-a)^r}dx = g(a)\frac{(b-a)^{1-r}}{(1-r)} + g'(a)\frac{(b-a)^{2-r}}{(2-r)} + \frac{g''(a)}{2}\frac{(b-a)^{3-r}}{(3-r)}.$$

Por construção, G é uma função regular contínua, a sua integral definida pode ser aproximada por um método de quadratura usual.

Integrais impróprias

Se a integral imprópria for em um intervalo de comprimento infinito, como a família de integrais da forma

$$\mathscr{I} = \int_a^\infty \frac{g(x)}{x^s}\,dx, \quad s > 1,$$

onde $g : [a, \infty)$ é uma função contínua, suficientemente diferenciável e limitada. Nesse caso, o integrando é integrável e $\mathscr{I}$ assume um valor real. Veremos que é possível reduzir essa família àquela que estudamos anteriormente.
O intervalo de integração é transformado em um intervalo finito através da mudança de variável

$$t = \frac{1}{x} \implies x = \frac{1}{t} \implies dx = -\frac{1}{t^2}\,dt,$$

que transforma a extremidade $x = a$ na extremidade $t = a^{-1}$ e a extremidade $x = +\infty$ na extremidade $t = 0$.

Integrais impróprias

Na nova variável, a integral assume a forma

$$\begin{aligned}\mathscr{I} &= \int_{a^{-1}}^{0} t^s g(1/t) \left(-\frac{1}{t^2}dt\right) \\ &= \int_{0}^{a^{-1}} \frac{g(1/t)}{t^{2-s}}dt.\end{aligned}$$

Como g é limitada e $s > 1$, a singularidade em $t = 0$ é integrável e podemos utilizar a mesma abordagem do caso anterior.