

Capítulo 6

Integração Numérica

Vimos nos capítulos 2 e 3 que entre os motivos para o uso de polinômios na aproximação de funções está a facilidade de cálculos de derivadas e integrais. Neste capítulo aplicaremos as aproximações polinomiais para a integração numérica de funções, ou seja:

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

Esta aproximação, quando escrita na forma:

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=0}^n a_i f(x_i)$$

é chamada de **quadratura numérica**.

6.1 Método tipo Newton-Coates

Adotando o polinômio interpolador de Lagrange para representar $p_n(x)$:

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n \ell_i(x) f(x_i)$$

E sabendo que o erro de truncamento da aproximação de $f(x) = p_n(x) + R_n(x)$ é dado por:

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i) \quad \text{com } \xi \in [x_0, x_n].$$

Então a integral de $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ pode ser escrita da seguinte forma:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b \sum_{i=0}^n \ell_i(x) f(x_i) dx + \int_a^b \frac{f^{(n+1)}[\xi(x)]}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i) dx$$

E uma aproximação para o cálculo desta integral é:

$$I = \int_a^b f(x) dx \cong \sum_{i=0}^n \left(\int_a^b \ell_i(x) dx \right) f(x_i) = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i)$$

onde $a_i = \int_a^b \ell_i(x) dx$ e o erro desta aproximação da integral é:

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

Quando os pontos x_i , $i = 0, 1, \dots, n$, estão igualmente espaçados, ou seja, $x_i = x_0 + h \cdot i$, temos as **fórmulas de Newton-Coates**. Estas fórmulas são ditas fechadas quando $x_0 = a$ e $x_n = b$, com $h = (b - a) / n$, e abertas quando x_0 e x_n estão dentro do intervalo $[a, b]$, com $h = (b - a) / (n + 2)$.

As fórmulas fechadas para $n = 1$ e $n = 2$ também são conhecidas como **regra do trapézio** e **regra de Simpson**, respectivamente.

Para $n = 1$ temos $x_0 = a$, $x_1 = b$, $h = b - a$ e o polinômio interpolador $p_1(x)$:

$$p_1(x) = \frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)} f(x_0) + \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)} f(x_1)$$

Aplicando a mudança de variável: $\alpha \equiv \frac{x - x_0}{h} \rightarrow \frac{x - x_1}{h} = \alpha + \frac{x_0 - x_1}{h} = \alpha - 1$, pois $x_1 - x_0 = h$ e podemos escrever $p_1(x)$ em termos de α :

$$p_1(\alpha) = (1 - \alpha)f(x_0) + \alpha f(x_1)$$

Como $x = a$ equivale a $\alpha = 0$ e para $x = b$ temos $\alpha = 1$, a integração de $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ em termos desta nova variável resulta em:

$$I = \int_a^b f(x) dx = h \int_0^1 f(x_0 + \alpha h) d\alpha \cong h \int_0^1 p_1(\alpha) d\alpha = h \frac{[f(x_0) + f(x_1)]}{2}$$

que é igual à área do trapézio de base h e altura média $[f(x_0) + f(x_1)] / 2$. O erro desta aproximação é dado por:

$$Erro_1 = \frac{1}{2!} \int_a^b f''[\xi(x)](x - x_0)(x - x_1) dx = \frac{h^3}{2} \int_0^1 f''[\xi(x_0 + \alpha h)] \alpha(\alpha - 1) d\alpha$$

Como $\alpha(\alpha - 1)$ não muda de sinal no intervalo $(0, 1)$, o teorema do valor médio da integral pode ser aplicado:

$$Erro_1 = \frac{h^3 f''(\xi)}{2} \int_0^1 \alpha(\alpha - 1) d\alpha = -\frac{h^3 f''(\xi)}{12} \cong -0,083 h^3 f''(\xi) \quad , \quad \text{com } \xi \in (a, b).$$

Para $n = 2$ temos $x_0 = a$, $x_1 = a + h$, $x_2 = b$, $h = (b - a) / 2$ e o polinômio interpolador $p_2(x)$:

$$p_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2)$$

Em termos da variável α :

$$p_2(\alpha) = \frac{(\alpha-1)(\alpha-2)}{2} f(x_0) - \alpha(\alpha-2)f(x_1) + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2} f(x_2)$$

Neste caso, $x = a$ equivale a $\alpha = 0$ e $x = b$ equivale a $\alpha = 2$ e a integração de $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ resulta em:

$$I = \int_a^b f(x)dx = h \int_0^2 f(x_0 + \alpha h)d\alpha \cong h \int_0^2 p_2(\alpha)d\alpha = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$$

que é a regra de Simpson para o cálculo de integrais.

O erro desta aproximação é dado por:

$$Erro_2 = \frac{1}{3!} \int_a^b f'''[\xi(x)](x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) dx = \frac{h^4}{6} \int_0^2 f'''[\xi(x_0 + \alpha h)]\alpha(\alpha-1)(\alpha-2) d\alpha,$$

porém como $\int_0^2 \alpha(\alpha-1)(\alpha-2) d\alpha = 0$, é necessário utilizar o próximo termo do resíduo da aproximação de $f(x)$ para o cálculo do erro (**este efeito ocorre sempre quanto n for par**):

$$Erro_2 = \frac{1}{4!} \int_a^b f^{(4)}[\xi(x)] \prod_{i=1}^3 (x-x_i) dx = \frac{h^5}{4!} \int_0^2 f^{(4)}[\xi(x_0 + \alpha h)]\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)(\alpha-3) d\alpha$$

Observe que neste caso $\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)(\alpha-3)$ muda de sinal no intervalo $(0, 1)$, então o teorema do valor médio da integral não poderia ser aplicado. Contudo, pode-se mostrar que aproximando $f(x)$ por série de Taylor em torno de x_1 até o termo de quarta ordem e integrando no mesmo intervalo $[a, b]$, obtém-se resultado equivalente a:

$$Erro_2 = \frac{h^5 f^{(4)}(\xi)}{4!} \int_0^2 \alpha(\alpha-1)(\alpha-2)(\alpha-3) d\alpha = -\frac{h^5 f^{(4)}(\xi)}{90} \cong -0,011h^5 f^{(4)}(\xi)$$

A tabela abaixo mostra as fórmulas fechadas de integração de Newton-Coates para diferentes ordens.

n	N	NC ₀ ⁽ⁿ⁾	NC ₁ ⁽ⁿ⁾	NC ₂ ⁽ⁿ⁾	NC ₃ ⁽ⁿ⁾	NC ₄ ⁽ⁿ⁾	NC ₅ ⁽ⁿ⁾	NC ₆ ⁽ⁿ⁾	Erro da Integração	Erro da Integração
1	2	1	1	Trapézio					$-0,083 \cdot (b-a)^3 \cdot f''(\xi)$	$-0,083 \cdot h^3 \cdot f''(\xi)$
2	6	1	4	1	Simpson				$-3,472 \cdot 10^{-4} \cdot (b-a)^5 \cdot f^{IV}(\xi)$	$-0,011 \cdot h^5 \cdot f^{IV}(\xi)$
3	8	1	3	3	1				$-1,543 \cdot 10^{-4} \cdot (b-a)^5 \cdot f^{IV}(\xi)$	$-0,037 \cdot h^5 \cdot f^{IV}(\xi)$
4	90	7	32	12	32	7			$-5,167 \cdot 10^{-7} \cdot (b-a)^7 \cdot f^{VI}(\xi)$	$-0,0085 \cdot h^7 \cdot f^{VI}(\xi)$
5	288	19	75	50	50	75	19		$-2,91 \cdot 10^{-7} \cdot (b-a)^7 \cdot f^{VI}(\xi)$	$-0,023 \cdot h^7 \cdot f^{VI}(\xi)$
6	840	41	216	27	272	27	216	41	$-6,379 \cdot 10^{-10} \cdot (b-a)^9 \cdot f^{VIII}(\xi)$	$-0,00643 \cdot h^9 \cdot f^{VIII}(\xi)$

$$\int_a^b f(x) \cdot dx \cong \frac{n \cdot h}{N} \cdot \sum_{j=0}^n NC_j^{(n)} \cdot f(x_j) = \frac{b-a}{N} \cdot \sum_{j=0}^n NC_j^{(n)} \cdot f(x_j)$$

Sendo $h = \frac{b-a}{n}$ e $x_j = a + j \cdot h$ para $j = 0, 1, \dots, n$

$$\frac{n}{N} NC_j^{(n)} = \frac{(-1)^{n-j}}{j!(n-j)!} \int_0^n \prod_{i=0, i \neq j}^n (\alpha - i) d\alpha$$

Exemplo: $a = 0; b = 1,2, n = 6$ e $f(x) = e^x$

Assim: $h = \frac{1,2}{6} = 0,2$ e $x_j = 0,2 \cdot j$ para $j = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ resultando em: $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 0,0 \\ 0,2 \\ 0,4 \\ 0,6 \\ 0,8 \\ 1,0 \\ 1,2 \end{pmatrix}$

Da tabela:

$$\int_0^{1,2} e^x \cdot dx \cong \frac{6 \cdot 0,2}{840} \cdot (41 \cdot e^0 + 216 \cdot e^{0,2} + 27 \cdot e^{0,4} + 272 \cdot e^{0,6} + 27 \cdot e^{0,8} + 216 \cdot e^{1,0} + 41 \cdot e^{1,2}) = 2,320116929$$

Valor exato: $\int_0^{1,2} e^x \cdot dx = e^{1,2} - 1 = 2,320116923$ [ER(%) = $-2,61 \cdot 10^{-7}$ % , EA = $-6,055 \cdot 10^{-9}$]

A fórmula aberta para $n = 0$ é conhecida como **regra do ponto médio** (ou **regra do retângulo**). Neste caso, os pontos nodais $x_i = x_0 + h \cdot i$ ($i = 0, 1, \dots, n$ e $h = (b - a) / (n + 2)$), são internos ao intervalo $[a, b]$ e define-se $x_{-1} = a$ e $x_{n+1} = b$. Para $n = 0$, o polinômio interpolador $p_0(x) = f(x_0)$ e $h = (b - a) / 2$. Aplicando a mudança de variável $\alpha \equiv \frac{x - x_0}{h}$:

$$I = \int_a^b f(x) dx = h \int_{-1}^1 f(x_0 + \alpha h) d\alpha \cong h \int_{-1}^1 p_0(\alpha) d\alpha = 2h f(x_0)$$

O erro desta aproximação é dado por:

$$Erro_0 = \frac{1}{1!} \int_a^b f'[\xi(x)](x - x_0) dx = h^2 \int_{-1}^1 f'[\xi(x_0 + \alpha h)] \alpha d\alpha, \text{ mas como } \int_{-1}^1 \alpha d\alpha = 0 \text{ é necessário}$$

utilizar o próximo termo do resíduo da aproximação de $f(x)$ para o cálculo do erro (como nas fórmulas fechadas, **este efeito ocorre sempre quando n for par**):

$$Erro_0 = \frac{1}{2!} \int_a^b f''[\xi(x)](x - x_0)(x - x_1) dx = \frac{h^3}{2} \int_{-1}^1 f''[\xi(x_0 + \alpha h)] \alpha(\alpha - 1) d\alpha = \frac{h^3 f''(\xi)}{2} \int_{-1}^1 \alpha(\alpha - 1) d\alpha$$

$$Erro_0 = \frac{h^3 f''(\xi)}{3} \cong 0,333 h^3 f''(\xi), \quad \text{com } \xi \in (a, b).$$

Algoritmo do Método de Simpson em Subintervalos (Regra de Simpson Composta)

ETAPA 0: Especificação pelo usuário de a , b , N (número inicial de parábolas, $N > 0$), δ (critério de convergência) e ε (menor valor do passo de integração, h_{min}).

ETAPA 1: Cálculo da primeira integral numérica (com N parábolas):

$$S_0 \leftarrow f(a) + f(b)$$

$$h \leftarrow \frac{b-a}{2 \cdot N}$$

$$S_{impar} \leftarrow \sum_{j=1}^N f[a + (2j-1) \cdot h]$$

$$\text{Se } N > 1 \text{ então } S_{par} \leftarrow \sum_{j=1}^{N-1} f(a + 2j \cdot h), \text{ senão } S_{par} \leftarrow 0$$

$$I \leftarrow \frac{h}{3} \cdot (S_0 + 4 \cdot S_{impar} + 2 \cdot S_{par})$$

ETAPA 2: Processo Recursivo:

Faça

$$I_{velho} \leftarrow I$$

$$N \leftarrow N + N$$

$$h \leftarrow \frac{h}{2}$$

$$S_{par} \leftarrow S_{par} + S_{impar}$$

$$S_{impar} \leftarrow \sum_{j=1}^N f[a + (2j-1) \cdot h]$$

$$I \leftarrow \frac{h}{3} \cdot (S_0 + 4 \cdot S_{impar} + 2 \cdot S_{par})$$

Enquanto $|I - I_{velho}| > \delta$ e $|h| > \varepsilon$

ETAPA 3: Cálculo final da integral numérica (extrapolação de Richardson):

$$I \leftarrow \frac{16 \cdot I - I_{velho}}{15}$$

Imprima o valor de I .

FIM

Como o erro em cada subintervalo é dado por $Erro_2(i) = -\frac{h^5 f^{(4)}(\xi_i)}{90}$, o erro total é:

$$Erro_2 = -\frac{h^5}{90} \sum_{i=1}^N f^{(4)}(\xi_i) = -\frac{h^5}{90} N \cdot f^{(4)}(\xi) = -\frac{h^5 (b-a)}{90 \cdot 2h} f^{(4)}(\xi) = -\frac{(b-a)}{180} h^4 f^{(4)}(\xi)$$

com $\xi \in (a, b)$, segundo o teorema do valor intermediário.

Ilustração do método de Simpson recursivo

Cômputo de $\int_0^{1,2} f(x) \cdot dx$ com precisão de 10^{-6} . Assim $a = 0$; $b = 1,2$, $f(x) = e^x$ e $\delta = 10^{-6}$.

Começando com $N = 2$ (duas parábolas) e estabelecendo o $h_{min} = 10^{-6} \rightarrow \varepsilon = 10^{-6}$.

ETAPA 1: Calculam-se: $S_0 = f(a) + f(b) = e^0 + e^{1,2} = 1 + 3,320117 = 4,320117$ e

$h = (b - a) / (2 N) = 0,3$

Processo Recursivo

N	h	$S_{\text{ímpar}}$	S_{par}	I_{velho}	I	$ I - I_{\text{velho}} $
2	0,3	3,809462	1,822119	2,32022022		
4	0,15	7,704798	5,631581	2,320220220	2,320123431	$9,68 \cdot 10^{-5}$
8	0,075	15,452955	13,336378	2,320123431	2,320117330	$6,10 \cdot 10^{-6}$
16	0,0375	30,927643	28,789333	2,320117330	2,320116948	$3,82 \cdot 10^{-7}$

$I_{\text{exato}} = 2,320116923 \Rightarrow I_{\text{exato}} - I = -2,55 \cdot 10^{-8}$

Extrapolação de Richardson:

$$I_{\text{extrapolado}} = \frac{16 \cdot I - I_{\text{velho}}}{15} = 2,320116923 \Rightarrow I_{\text{exato}} - I_{\text{extrapolado}} = -1,36 \cdot 10^{-11}$$

Notas sobre a extrapolação de Richardson

Se I_N e E_N são, respectivamente, a integral numérica com N subintervalos e o seu erro, então o valor exato da integral é dado por:

$$I = I_{N_1} + E_{N_1} = I_{N_2} + E_{N_2}$$

Como $E_N \propto N^{-m} f^{(m)}(\xi)$, se considerarmos que $f^{(m)}(\xi_{N_1}) \cong f^{(m)}(\xi_{N_2})$, então:

$$E_{N_2} = (N_1/N_2)^m E_{N_1}$$

e, deste modo, pode-se obter uma boa estimativa para E_{N_1} em função das integrais numéricas I_{N_1} e I_{N_2} :

$$E_{N_1} = \frac{I_{N_2} - I_{N_1}}{1 - (N_1/N_2)^m}$$

Resultando na fórmula de extrapolação de Richardson:

$$I = I_{N_1} + \frac{I_{N_2} - I_{N_1}}{1 - (N_1/N_2)^m} = \frac{I_{N_2} - (N_1/N_2)^m I_{N_1}}{1 - (N_1/N_2)^m}$$

Por exemplo, para $N_2 = 2 N_1$ e $m = 4$: $I = \frac{16 I_{N_2} - I_{N_1}}{15}$.

6.2 Métodos tipo quadratura de Gauss

Método de quadratura de Gauss com 2 pontos internos

Considerando a integração: $I = \int_0^1 f(x) \cdot dx$ a ser computada *com a maior precisão possível*

por:
$$I_{num} = \omega_1 \cdot f(x_1) + \omega_2 \cdot f(x_2)$$

Esta expressão é a fórmula de quadratura de Gauss de I sendo ω_1 , ω_2 , x_1 e x_2 , respectivamente, os pesos e as abscissas do método de quadratura. Para calcular esses parâmetros, a *função teste*

$f(x) = x^k$ é utilizada, cujo valor exato da integral é: $I = \int_0^1 x^k \cdot dx = \frac{1}{k+1}$ e o

correspondente valor numérico é: $I_{num} = \omega_1 \cdot x_1^k + \omega_2 \cdot x_2^k$. Construindo-se a tabela:

k	I	I_{num}
0	1	$\omega_1 + \omega_2$
1	$\frac{1}{2}$	$\omega_1 \cdot x_1 + \omega_2 \cdot x_2$
2	$\frac{1}{3}$	$\omega_1 \cdot x_1^2 + \omega_2 \cdot x_2^2$
3	$\frac{1}{4}$	$\omega_1 \cdot x_1^3 + \omega_2 \cdot x_2^3$
4	$\frac{1}{5}$	$\omega_1 \cdot x_1^4 + \omega_2 \cdot x_2^4$

Para assegurar a maior precisão possível do método numérico proposto, impõem-se as equações:

$$\begin{cases} \omega_1 + \omega_2 = 1 & (1) \\ \omega_1 \cdot x_1 + \omega_2 \cdot x_2 = \frac{1}{2} & (2) \\ \omega_1 \cdot x_1^2 + \omega_2 \cdot x_2^2 = \frac{1}{3} & (3) \\ \omega_1 \cdot x_1^3 + \omega_2 \cdot x_2^3 = \frac{1}{4} & (4) \end{cases}$$

Para resolver o sistema algébrico não-linear acima se considera que as abscissas da quadratura $[x_1 < x_2]$ são as raízes do polinômio: $p_2(x) = (x - x_1) \cdot (x - x_2) = x^2 - b \cdot x + c$, assim:

$$b = x_1 + x_2, \quad c = x_1 \cdot x_2, \quad p_2(x_1) = x_1^2 - b \cdot x_1 + c = 0, \quad p_2(x_2) = x_2^2 - b \cdot x_2 + c = 0.$$

Subtraindo da equação (3) a equação (2) multiplicada por b e somando ao resultado a equação (1) multiplicada por c , obtém-se:

$$\omega_1 \cdot (x_1^2 - b \cdot x_1 + c) + \omega_2 \cdot (x_2^2 - b \cdot x_2 + c) = \frac{1}{3} - \frac{b}{2} + c, \text{ porém:}$$

$$x_1^2 - b \cdot x_1 + c = 0 \text{ e } x_2^2 - b \cdot x_2 + c = 0, \text{ assim: } \frac{1}{3} - \frac{b}{2} + c = 0 \Rightarrow \boxed{3 \cdot b - 6 \cdot c = 2}.$$

Subtraindo da equação (4) a equação (3) multiplicada por b e somando ao resultado a equação (2) multiplicada por c , obtém-se:

$$\omega_1 \cdot x_1 \cdot (x_1^2 - b \cdot x_1 + c) + \omega_2 \cdot x_2 \cdot (x_2^2 - b \cdot x_2 + c) = \frac{1}{4} - \frac{b}{3} + \frac{c}{2}, \text{ porém:}$$

$$x_1^2 - b \cdot x_1 + c = 0 \text{ e } x_2^2 - b \cdot x_2 + c = 0, \text{ assim: } \frac{1}{4} - \frac{b}{3} + \frac{c}{2} = 0 \Rightarrow \boxed{4 \cdot b - 6 \cdot c = 3}.$$

$$\text{Dando origem ao sistema algébrico linear: } \begin{cases} 3 \cdot b - 6 \cdot c = 2 \\ 4 \cdot b - 6 \cdot c = 3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} b = 1 \\ c = \frac{1}{6} \end{cases}, \text{ deste modo:}$$

$$\boxed{p_2(x) = x^2 - x + \frac{1}{6}}$$

Cujas raízes são:

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}} \right) = 0,211325 \\ x_2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{3}} \right) = 0,788675 \end{cases}.$$

Os valores de ω_1 e ω_2 são a seguir calculados de (1) e (2), assim:

$$\begin{cases} \omega_1 + \omega_2 = 1 \\ \omega_1 \cdot x_1 + \omega_2 \cdot x_2 = \frac{1}{2} \end{cases} \Rightarrow \omega_1 = \frac{x_2 - \frac{1}{2}}{x_2 - x_1} = \frac{1}{2} \text{ e } \omega_2 = \frac{1}{2}$$

Dando origem, finalmente, ao método de quadratura de Gauss com dois pontos internos:

$$\boxed{\int_0^1 f(x) \cdot dx \cong \frac{f(0,211325) + f(0,788675)}{2}}$$

Que é **exata** para funções polinomiais em x de grau não superior a 3. Em vista desta propriedade é também possível concluir que:

$$(i) \int_0^1 p_2(x) \cdot dx = \frac{p_2(x_1) + p_2(x_2)}{2} = 0; \quad (ii) \int_0^1 x \cdot p_2(x) \cdot dx = \frac{x_1 p_2(x_1) + x_2 p_2(x_2)}{2} = 0 \text{ e}$$

$$(iii) \int_0^1 x^2 \cdot p_2(x) \cdot dx = \int_0^1 \left(x^2 - x + \frac{1}{6} \right) \cdot p_2(x) \cdot dx = \int_0^1 [p_2(x)]^2 \cdot dx$$

$$\int_0^1 x^2 \cdot p_2(x) \cdot dx = \int_0^1 \left(x^4 - x^3 + \frac{x^2}{6} \right) \cdot dx = \frac{1}{5} - \frac{1}{4} + \frac{1}{18} = \frac{36 - 45 + 10}{180} = \frac{1}{180}$$

As propriedades (i) e (ii) revelam que o polinômio $p_2(x)$ é ortogonal no intervalo $[0, 1]$ com relação à função peso $w(x) = 1$, isto é:

$$\int_0^1 w(x) \cdot x^k \cdot p_n(x) \cdot dx = 0 \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

O polinômio que tem esta propriedade é o Polinômio de Jacobi, $P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$, que é ortogonal no intervalo $[0, 1]$ com relação à função peso $w(x) = (1-x)^\alpha x^\beta$. Neste caso $\alpha = \beta = 0$. Por exemplo, as raízes de $P_2^{(0,0)}(x)$ são $x_1 = 0,211325$ e $x_2 = 0,788675$, que são as raízes obtidas para $p_2(x)$ na quadratura de Gauss, por isto ela também é referenciada como quadratura de Gauss-Jacobi. Também existem as quadraturas de Gauss-Legendre, Gauss-Hermite, Gauss-Chebyshev, Gauss-Laguerre, etc., em função da escolha do intervalo de integração e da função peso para o cálculo da integral.

Quando a função peso é diferente de $w(x) = 1$, as fórmulas de quadratura devem ser aplicadas da seguinte forma:

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_a^b w(x) \cdot g(x) dx \cong \sum_{i=1}^n a_i g(x_i)$$

onde $f(x) = w(x) \cdot g(x)$, a_i são os pesos da quadratura e x_i são as raízes do polinômio ortogonal de grau n no intervalo $[a, b]$ e função peso $w(x)$. Os pesos da quadratura podem ser obtidos da forma como descrito na seção anterior, com o uso do polinômio interpolador de Lagrange

$p_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^n \ell_i(x) g(x_i)$, ou seja: $a_i = \int_a^b w(x) \ell_i(x) dx$. Porém, tanto os pesos da quadratura

quanto as raízes dos polinômios ortogonais encontram-se tabelados. Estas quadraturas são exatas quando $g(x)$ é um polinômio de grau inferior a $2n$, que é o número de parâmetros a determinar (pesos e abscissas) do método de quadratura.

Além disto, quando os dois pontos extremos do intervalo também são usados como abscissas, a quadratura é do tipo **Lobatto**:

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_a^b w(x) \cdot g(x) dx \cong a_0 g(a) + \sum_{i=1}^n a_i g(x_i) + a_{n+1} g(b)$$

sendo exata quando $g(x)$ é um polinômio de grau inferior a $2n+2$; e quando apenas um dos extremos, inferior ou superior, é usado como abscissa, a quadratura é do tipo **Radau**:

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_a^b w(x) \cdot g(x) dx \cong a_0 g(a) + \sum_{i=1}^n a_i g(x_i)$$

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_a^b w(x) \cdot g(x) dx \cong \sum_{i=1}^n a_i g(x_i) + a_{n+1} g(b)$$

sendo exata quando $g(x)$ é um polinômio de grau inferior a $2n+1$.

Cálculo da expressão do erro do método de quadratura de Gauss com 2 pontos

Como a integração é exata até a terceira potência em x , pode-se inferir o resíduo (para um intervalo de integração $h \neq 1$) no cômputo de uma função qualquer $f(t)$, no intervalo entre 0 e h , pelo cálculo da integral:

$$\int_0^h t^2 (t-t_1) \cdot (t-t_2) \cdot \left[\frac{1}{4!} \frac{d^4 f(t)}{dt^4} \Big|_{t=\xi} \right] \cdot dt = \frac{1}{4!} \frac{d^4 f(t)}{dt^4} \Big|_{t=\xi} \int_0^h t^2 (t-t_1) \cdot (t-t_2) \cdot dt$$

Expressando esta última integral em termos de $x = \frac{t}{h} \Rightarrow t = h \cdot x$, resulta:

$$\int_{t=0}^h t^2 (t-t_1) \cdot (t-t_2) \cdot dt = h^5 \cdot \int_{x=0}^1 x^2 (x-x_1) \cdot (x-x_2) \cdot dx = h^5 \cdot \int_{x=0}^1 x^2 \cdot p_2(x) \cdot dx = \frac{h^5}{180}.$$

Finalmente: $\boxed{Erro = \frac{h^5}{4320} \frac{d^4 f(t)}{dt^4} \Big|_{t=\xi}}$ Sendo: $Erro = \int_0^h f(t) \cdot dt - \frac{h}{2} \cdot [f(x_1 \cdot h) + f(x_2 \cdot h)]$.

Exemplo: Calcule a integral $I = \int_0^\pi e^{-x} \text{sen}(x) dx$ por quadratura de Gauss-Jacobi com dois pontos internos.

Aplicando a mudança de variável: $t = x / \pi$, $dx = \pi dt$, para normalizar o intervalo:

$$I = \pi \int_0^1 e^{-\pi t} \text{sen}(\pi t) dt \rightarrow f(t) = e^{-\pi t} \text{sen}(\pi t)$$

$$I = \pi [\omega_1 f(t_1) + \omega_2 f(t_2)] = \pi [0,5 \cdot f(0,211325) + 0,5 \cdot f(0,788675)] = 0,579563$$

$$I_{\text{exato}} = \frac{1}{2} (e^{-\pi} + 1) = 0,521607 \quad \rightarrow \quad Erro = 0,521607 - 0,579563 = -0,057956$$

$$Erro = \frac{\pi}{4320} \frac{d^4 f(t)}{dt^4} \Big|_{t=\xi}, \quad \frac{d^4 f(t)}{dt^4} = -4\pi^4 e^{-\pi t} \text{sen}(\pi t), \text{ cujo maior valor absoluto ocorre em}$$

$$t = \arctg(1) / \pi = 1 / 4, \text{ isto é: } |Erro| \leq \left| -\frac{4\pi^5}{4320} e^{-\frac{\pi}{4}} \text{sen}\left(\frac{\pi}{4}\right) \right| = 0,091352.$$

6.3 Integrais múltiplas

Método de Simpson para cômputo de integrais duplas

Considerando a integração: $I = \int_{x=a}^{x=b} \int_{y=c}^{y=d} f(x, y) \cdot dy \cdot dx$ o valor numérico desta integral é computado segundo o procedimento:

$$I_{num} = \frac{h_x \cdot h_y}{9} \cdot \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \left\{ \begin{aligned} & [f(x_{2i-2}, y_{2j-2}) + 4 \cdot f(x_{2i-1}, y_{2j-2}) + f(x_{2i}, y_{2j-2})] + \\ & + 4[f(x_{2i-2}, y_{2j-1}) + 4 \cdot f(x_{2i-1}, y_{2j-1}) + f(x_{2i}, y_{2j-1})] + \\ & [f(x_{2i-2}, y_{2j}) + 4 \cdot f(x_{2i-1}, y_{2j}) + f(x_{2i}, y_{2j})] \end{aligned} \right\}$$

Sendo: $h_x = \left(\frac{b-a}{2 \cdot N}\right)$; $h_y = \left(\frac{d-c}{2 \cdot M}\right)$; $x_k = a + k \cdot h_x$ para $k = 0, 1, \dots, 2 \cdot N$ e

$y_k = c + k \cdot h_y$, para $k = 0, 1, \dots, 2 \cdot M$.

6.4 Integrais impróprias

Integrais impróprias são aquelas onde a função não é limitada no intervalo de integração (apresenta singularidade), ou pelo menos um dos limites de integração é infinito.

No primeiro caso, quando a função não é limitada ao aproximar-se dos extremos do intervalo, por exemplo, se houver uma singularidade no extremo inferior:

$$\int_a^b \frac{dx}{(x-a)^p} = \frac{(b-a)^{1-p}}{1-p} \quad (0 < p < 1)$$

e $f(x) = \frac{g(x)}{(x-a)^p}$, com $g(x)$ analítica em $x = a$, então o cômputo da integral $I = \int_a^b f(x)dx$

pode ser realizado da seguinte forma:

$$\int_a^b \frac{g(x)}{(x-a)^p} dx = \int_a^b \frac{g(x) - p_n(x)}{(x-a)^p} dx + \int_a^b \frac{p_n(x)}{(x-a)^p} dx$$

onde $p_n(x)$ é o polinômio de Taylor de grau n resultante da expansão de $g(x)$ em torno do ponto $x = a$. A segunda integral do lado direito pode ser calculada exatamente, resultando em:

$$\int_a^b \frac{p_n(x)}{(x-a)^p} dx = \sum_{k=0}^n \frac{g^{(k)}(a)}{k!(k+1-p)} (b-a)^{k+1-p}$$

Para a primeira integral do lado direito, remove-se a singularidade definindo a função:

$$G(x) = \begin{cases} \frac{g(x) - p_n(x)}{(x-a)^p} & \text{se } a < x \leq b, \\ 0 & \text{se } x = a \end{cases}$$

Então o cômputo da integral $\int_a^b G(x)dx$ pode ser aproximado por quadratura.

Exemplo: Calcular a integral $I = \int_0^1 \frac{e^x}{\sqrt{x}} dx$ com a regra de Simpson Composta com $N = 2$ e um

polinômio de Taylor de grau 4.

Neste caso $g(x) = e^x$ e $a = 0$, cuja expansão em série de Taylor resulta em:

$$p_4(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24}$$

Portanto, $\int_0^1 \frac{p_4(x)}{\sqrt{x}} dx = \left[2\sqrt{x} + \frac{2}{3}\sqrt{x^3} + \frac{1}{5}\sqrt{x^5} + \frac{1}{21}\sqrt{x^7} + \frac{1}{108}\sqrt{x^9} \right]_0^1 \cong 2,9235450$

A função $G(x)$ é definida por: $G(x) = \begin{cases} \frac{e^x - p_4(x)}{\sqrt{x}} & \text{se } 0 < x \leq 1 \\ 0 & \text{se } x = 0 \end{cases}$

Que integrada pela regra de Simpson Composta com $N = 2$ resulta em:

$$h = \frac{b-a}{2 \cdot N} = \frac{1}{4} \text{ e } \int_0^1 G(x) dx \cong \frac{h}{3} [G(0) + 4G(0,25) + 2G(0,5) + 4G(0,75) + G(1)] = 0,0017691$$

Então, a integral $I = \int_0^1 \frac{e^x}{\sqrt{x}} dx \cong \int_0^1 G(x) dx + \int_0^1 \frac{p_4(x)}{\sqrt{x}} dx = 2,9253141$. O erro desta aproximação

está associado à primeira parcela e é dado por: $Erro = -\frac{(b-a)}{180} h^4 G^{(4)}(\xi)$. Como o maior valor de $G^{(4)}(x)$ ocorre em $x = 1$, cujo valor é 0,04664, temos: $|Erro| \leq 1,0122 \cdot 10^{-6}$.

Quando a integral imprópria envolve limite infinito: $I = \int_a^\infty f(x) dx$, aplica-se a mudança de variável $t = x^{-1} \rightarrow x = t^{-1}$ e $dx = -t^{-2} dt$, resultando na integral:

$I = \int_0^{1/a} t^{-2} f\left(\frac{1}{t}\right) dt$, que apresenta singularidade em $t = 0$, podendo ser tratado como no primeiro caso.

Exemplo: Calcular a integral $I = \int_1^\infty x^{-3/2} \text{sen}\left(\frac{1}{x}\right) dx$ com a regra de Simpson Composta com $N = 2$ e um polinômio de Taylor de grau 4.

Aplicando a mudança de variável $t = x^{-1}$: $I = -\int_{t=1}^0 t^{-1/2} \text{sen}(t) dt = \int_0^1 \frac{\text{sen}(t)}{\sqrt{t}} dt$, que apresenta singularidade em $t = 0$.

Neste caso $g(t) = \text{sen}(t)$ e $a = 0$, cuja expansão em série de Taylor resulta em:

$$p_4(t) = t - \frac{t^3}{6}$$

Portanto, $\int_0^1 \frac{p_4(t)}{\sqrt{t}} dt = \left[\frac{2}{3}\sqrt{t^3} - \frac{1}{21}\sqrt{t^7} \right]_0^1 \cong 0,61904761$

A função $G(t)$ é definida por:
$$G(t) = \begin{cases} \frac{\text{sen}(t) - p_4(t)}{\sqrt{t}} & \text{se } 0 < t \leq 1 \\ 0 & \text{se } t = 0 \end{cases}$$

Que integrada pela regra de Simpson Composta com $N = 2$ resulta em:

$$h = \frac{b-a}{2 \cdot N} = \frac{1}{4} \text{ e } \int_0^1 G(t) dx \cong \frac{h}{3} [G(0) + 4G(0,25) + 2G(0,5) + 4G(0,75) + G(1)] = 0,0014956$$

Então, a integral $I = \int_0^1 \frac{\text{sen}(t)}{\sqrt{t}} dt \cong \int_0^1 G(t) dt + \int_0^1 \frac{p_4(t)}{\sqrt{t}} dt = 0,6205432$. O erro desta

aproximação está associado à primeira parcela e é dado por: $\text{Erro} = -\frac{(b-a)}{180} h^4 G^{(4)}(\xi)$. Como o maior valor de $G^{(4)}(t)$ ocorre em $t = 1$, cujo valor é 0,03623, temos: $|\text{Erro}| \leq 7,8632 \cdot 10^{-7}$.

As integrais impróprias também podem ser calculadas por métodos tipo quadratura de Gauss, tais como a quadratura de Gauss-Hermite:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \cdot g(x) dx \cong \sum_{i=1}^n a_i g(x_i)$$

onde $f(x) = w(x) \cdot g(x)$, a_i são os pesos da quadratura e x_i são as raízes do polinômio ortogonal de Hermite de grau n no intervalo $(-\infty, \infty)$ e função peso $w(x) = e^{-x^2}$. Ou a quadratura de Gauss-Laguerre:

$$I = \int_0^{\infty} f(x) dx = \int_0^{\infty} e^{-x} \cdot g(x) dx \cong \sum_{i=1}^n a_i g(x_i)$$

onde $f(x) = w(x) \cdot g(x)$, a_i são os pesos da quadratura e x_i são as raízes do polinômio ortogonal de Laguerre de grau n no intervalo $[0, \infty)$ e função peso $w(x) = e^{-x}$.

Lista de exercícios

1. O fluxo, $q(\lambda, T) d\lambda$, com que a energia radiante é emitida da superfície de um corpo negro com comprimento de onda entre λ e $\lambda + d\lambda$ é dada pela equação de Planck:

$$q(\lambda, T) \cdot d\lambda = \frac{2 \cdot \pi \cdot h \cdot c^2}{\lambda^5 \cdot \left[\exp\left(\frac{h \cdot c}{k \cdot \lambda \cdot T}\right) - 1 \right]} \cdot d\lambda$$

Sendo: c : velocidade da luz: $= 2,997925 \cdot 10^{10}$ cm/s;

h : constante de Planck $= 6,6256 \cdot 10^{-27}$ erg. s

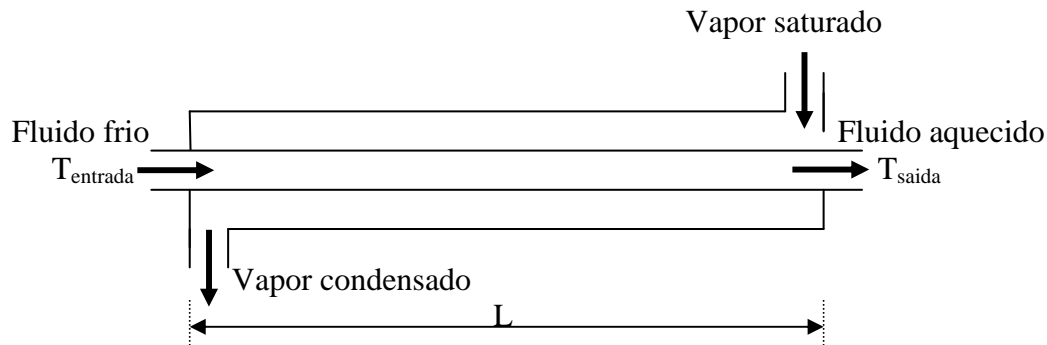
k : constante de Boltzmann $= 1,38054 \cdot 10^{-16}$ erg /K

T : temperatura [K];

λ : comprimento de onda [cm].

Calcule o fluxo total da energia emitida [em erg/cm²/s] de um corpo negro entre os comprimentos de onda: $\lambda_1 = 3933,666$ Angstrom e $\lambda_2 = 5895,923$ Angstrom às temperaturas de 2000 e 6000 K.

2. Em um trocador de calor de casco e tubo, vapor saturado é alimentado ao casco visando aquecer uma corrente de um fluido que escoo no tubo, de acordo com o diagrama a seguir:



O comprimento do trocador é obtido através da integração do balanço de energia do sistema dando origem a:

$$L = \frac{W}{\pi \cdot D} \int_{T_{\text{entrada}}}^{T_{\text{saida}}} \left[\frac{c_p(T)}{h(T) \cdot (T_{\text{vapor}} - T)} \right] \cdot dT$$

Sendo:

L : comprimento do trocador;

W : vazão mássica do fluido do tubo;

D : diâmetro do tubo;

c_p : calor específico do fluido do tubo;

h : coeficiente de transferência de calor entre o tubo e o casco.

O coeficiente h é dado através da correlação empírica:

$$h(T) = \frac{0,023 \cdot k(T)}{D} \cdot \left(\frac{4 \cdot W}{\pi \cdot D \cdot \mu(T)} \right)^{0,8} \cdot \left(\frac{\mu(T) \cdot c_p(T)}{k(T)} \right)^{0,4}$$

Sendo:

k : coeficiente de condutividade térmica do fluido do casco;

μ : viscosidade do fluido do casco.

Calcular o comprimento do trocador para cada um dos casos tabelados abaixo:

	CASO A	CASO B
Fluido	CO ₂ - em fase gasosa	Etileno glicol líquido
W (lb _m /h)	22,5	45000
T_{entrada} (°F)	60	0
T_{saida} (°F)	280 e 500	90 e 180
T_{vapor} (°F)	550	250
D (polegadas)	0,495	1,032
c_p [BTU/lb _m /°F]	$0,251 + 3,46 \cdot 10^{-5} \cdot T - 14400 / (T + 460)^2$	$0,53 + 0,00065 \cdot T$
k [BTU/h/ft/°F]	0,0085(32° F) 0,0181(392° F) 0,0133(212° F) 0,02228(572° F)	0,153 (constante)
μ [lb _m /ft/h]	$0,0332 \left(\frac{T + 460}{460} \right)^{0,935}$	242(0° F) 30,5(100° F) 5,57(200° F) 82,1(50° F) 12,6(150° F)

3. Um foguete é lançado do solo sendo sua aceleração registrada nos 80 primeiros segundos após seu lançamento. Estes valores estão tabelados a seguir

$t (s)$	0	10	20	30	40	50	60	70	80
$a (m/s^2)$	30,00	31,63	33,44	35,47	37,75	40,33	43,29	46,69	50,67

Baseado nos valores tabelados calcule a velocidade e a altura do foguete ao cabo dos 80 s.

4. Determine x_1 e x_2 de modo que a fórmula de quadratura abaixo apresente a maior ordem de precisão possível:

$$\int_{-1}^1 f(x) \cdot dx \cong \frac{1}{3} \cdot [f(-1) + 2 \cdot f(x_1) + 3 \cdot f(x_2)]$$

5. Deseja-se desenvolver uma fórmula de quadratura do tipo:

$$\int_0^h f(x) \cdot dx = \frac{h}{2} [f(0) + f(h)] + a \cdot h^2 [f'(0) - f'(h)] + \mathfrak{R}$$

Calcule a constante a e a ordem do resíduo \mathfrak{R} .

6. Determine as abscissas e pesos da fórmula de quadratura tipo Gauss:

$$\int_0^1 \sqrt{x} \cdot f(x) \cdot dx \cong \omega_1 \cdot f(x_1) + \omega_2 \cdot f(x_2)$$

7. Determine as abscissas e pesos da fórmula de quadratura tipo Gauss:

$$\int_0^1 \ln\left(\frac{1}{x}\right) \cdot f(x) \cdot dx \cong \omega_1 \cdot f(x_1) + \omega_2 \cdot f(x_2)$$

8. Determine os valores de ω_1 , ω_2 e ω_3 na fórmula de quadratura:

$$\int_{-1}^1 f(x) \cdot dx \cong \omega_1 \cdot f(-1) + \omega_2 \cdot f(1) + \omega_3 \cdot f(\alpha)$$

Sendo α um número entre -1 e $+1$.

Teste seu resultado para a função $f(x) = \sqrt{\frac{5 \cdot x + 13}{2}}$ e $\alpha = -0,1$.

9. Deseja-se desenvolver uma fórmula de quadratura do tipo Lobatto:

$$\int_{-1}^1 f(x) \cdot dx = \omega_1 \cdot [f(-1) + f(1)] + \omega_2 \cdot [f(-\alpha) + f(\alpha)] + \omega_3 \cdot f(0)$$

Calcule o valor da constante α e de ω_1 , ω_2 e ω_3 de modo que o método apresente a maior ordem de precisão possível.

10. Determine as abscissas e o peso da fórmula de quadratura tipo Chebyshev:

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} \cdot f(x) \cdot dx \cong \omega \cdot [f(x_1) + f(x_2) + f(x_3)]$$

11. Determine as abscissas e os pesos das fórmulas de quadratura tipo Radau:

$$(i) \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} \cdot f(x) \cdot dx \cong \omega_0 \cdot f(0) + \omega_1 \cdot f(x_1) + \omega_2 \cdot f(x_2)$$

$$(ii) \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} \cdot f(x) \cdot dx \cong \omega_1 \cdot f(x_1) + \omega_2 \cdot f(x_2) + \omega_3 \cdot f(1)$$

Confronte as precisões das fórmulas de quadratura dos exercícios 10 e 11.

12. Determine as abscissas e pesos da fórmula de quadratura tipo Gauss para o cômputo de integrais duplas:

$$\int_{x=0}^1 \int_{y=0}^1 f(x, y) \cdot dy \cdot dx \cong \omega_{1,1} \cdot f(x_1, y_1) + \omega_{1,2} \cdot f(x_1, y_2) + \omega_{2,1} \cdot f(x_2, y_1) + \omega_{2,2} \cdot f(x_2, y_2)$$

13. Calcule a integral imprópria: $\int_0^{\infty} \left(\frac{e^{-x^2}}{1+x^2} \right) \cdot dx$ com uma precisão de quatro algarismos significativos.

14. Calcule a integral imprópria: $\int_0^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{e^x + x}} \right) \cdot dx$ com uma precisão de quatro algarismos significativos.

15. Calcule a integral imprópria: $\int_0^{\infty} (e^{-x} \cdot \ln(x)) \cdot dx$ com uma precisão de cinco algarismos significativos.

16. Calcule numericamente as integrais impróprias: $\int_0^{\infty} \left[\frac{x}{e^x - 1} \right] \cdot dx$ e $\int_0^{\infty} \left[\frac{x}{e^x + 1} \right] \cdot dx$.

17. Calcule a integral imprópria: $\int_0^{\infty} e^{-\left(\frac{x+1}{x}\right)} \cdot dx$ com uma precisão de quatro algarismos significativos.

18. A função $Si(x)$ é definida por: $Si(x) = \int_0^x \left(\frac{\text{sen}(\xi)}{\xi} \right) \cdot d\xi$. Calcule, com quatro algarismos

significativos, a integral: $\int_0^1 \left(\frac{Si(x) - \text{sen}(x)}{x^3} \right) \cdot dx$.

19. O Método de Monte-Carlo pode ser aplicado para calcular integrais definidas. Tal método

aplicado ao cômputo de: $\int_a^b f(x) \cdot dx$ (sendo: para $a \leq x \leq b \Rightarrow 0 \leq f(x) < f_{\max}$) consiste

em *sortear simultaneamente* N pares de valores de x entre a e b e de y entre zero e f_{\max} . Após os sorteios calcula-se $f(x)$, se $f(x) > y$ faça $k \leftarrow k + 1$ (iniciando-se com $k \leftarrow 0$) e parta para novo sorteio; caso contrário, isto é: $f(x) < y$ nada faça e parta para novo

sorteio. Ao cabo dos N sorteios calcule: $\int_a^b f(x) \cdot dx \approx \left(\frac{k}{N} \right) \cdot (b - a) \cdot f_{\max}$. Aplique o

procedimento para o cálculo da integral: $\int_0^1 e^{-x^2} \cdot dx$, compare o valor obtido com o valor

exato da integral que é: $\int_0^1 e^{-x^2} \cdot dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \text{erf}(1)$ [erf é a função erro].

20. Calcule o valor da integral pelo método de Simpson e pela quadratura do exercício 12:

$$I = \int_{x=0}^1 \int_{y=0}^1 e^{-(x^2+y^2)} \cdot dy \cdot dx$$