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, $i = 0, 1, ..., n$, 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:

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

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	$NC_o^{(n)}$	$NC_1^{(n)}$	$NC_2^{(n)}$	$NC_3^{(n)}$	$NC_4^{(n)}$	$NC_5^{(n)}$	$NC_6^{(n)}$	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	$-6{,}379\cdot 10^{-10}\cdot(b-a)^9\cdot f^{VIII}(\xi)$	$-0{,}00643\cdot h^9\cdot f^{VIII}(\xi)$

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

Sendo $h = \dfrac{b-a}{n}$ e $x_j = a + j \cdot h$ para $j =$ 0, 1, $\cdots$, 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: $h = \dfrac{1{,}2}{6} = 0{,}2$ 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:

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

Valor exato: $\displaystyle\int_0^{1{,}2} e^x \cdot dx = e^{1{,}2} - 1 = 2{,}320116923$ [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 $x_i = x_0 + h \cdot i$ ($i = 0, 1, ..., n$ 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 $\alpha \equiv \dfrac{x - x_0}{h}$:

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

O erro desta aproximação é dado por:

$Erro_0 = \dfrac{1}{1!} \displaystyle\int_a^b f'[\xi(x)](x - x_0)\, dx = h^2 \int_{-1}^{1} f'[\xi(x_0 + \alpha\, h)]\, \alpha\, d\alpha$, mas como $\displaystyle\int_{-1}^{1} \alpha\, d\alpha = 0$ 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 quanto n for par**):

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

$Erro_0 = \dfrac{h^3 f''(\xi)}{3} \cong 0{,}333 h^3 f''(\xi)$, 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):

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

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

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

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

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

ETAPA 2: Processo Recursivo:

Faça

$$I_{velho} \leftarrow I$$

$$N \leftarrow N + N$$

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

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

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

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

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:

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

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

Ilustração do método de Simpson recursivo

Cômputo de $\boxed{\int_0^{1,2} f(x)\cdot dx}$ 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	$S_{ímpar}$	S_{par}	I_{velho}	I	$\mid I - I_{velho} \mid$
2	0,3	3,809462	1,822119	2,32022022		
4	0,15	7,704798	5,631581	2,320220220	2,320123431	$9,68\cdot10^{-5}$
8	0,075	15,452955	13,336378	2,320123431	2,320117330	$6,10\cdot10^{-6}$
16	0,0375	30,927643	28,789333	2,320117330	2,320116948	$3,82\cdot10^{-7}$

$I_{exato} = 2,320116923 \Rightarrow I_{exato} - I = -2,55\cdot10^{-8}$

Extrapolação de Richardson:

$$I_{extrapolado} = \frac{16\cdot I - I_{velho}}{15} = 2,320116923 \Rightarrow I_{exato} - I_{extrapolado} = -1,36\cdot10^{-11}$$

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:

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

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}:

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

Resultando na fórmula de extrapolação de Richardson:

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

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

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

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	$\frac{1}{3}$	$\omega_1 \cdot x_1^2 + \omega_2 \cdot x^2$
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:

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

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

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

$x_1^2 - b \cdot x_1 + c = 0$ e $x_2^2 - b \cdot x_2 + c = 0$, 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:

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

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:

$$\int_0^1 w(x)\cdot x^k \cdot p_n\left(x\right)\cdot dx = 0 \qquad k = 0, 1, 2, ..., n-1$$

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 $2\,n$, 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 $2\,n + 2$; 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 $2\,n + 1$.

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:

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

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

<u>Exemplo</u>: 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:

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

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

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

$Erro = \frac{\pi}{4320}\frac{d^4 f(t)}{dt^4}\Bigg|_{t=\xi}$, $\frac{d^4 f(t)}{dt^4} = -4\pi^4 e^{-\pi t}\,\text{sen}(\pi t)$, cujo maio valor absoluto ocorre em $t = \text{arctg}(1)/\pi = 1/4$, isto é: $|Erro| \le \left| -\frac{4\pi^5}{4320} e^{-\frac{\pi}{4}}\,\text{sen}\left(\frac{\pi}{4}\right)\right| = 0{,}091352.$

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:

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

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

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:

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

e $f(x) = \dfrac{g(x)}{(x-a)^p}$, 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:

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

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

<u>Exemplo</u>: Calcular a integral $I = \int_0^1 \dfrac{e^x}{\sqrt{x}} dx$ 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: $G(x) = \begin{cases} \dfrac{e^x - p_4(x)}{\sqrt{x}} & \text{se } 0 < x \le 1 \\ 0 & \text{se } x = 0 \end{cases}$

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

$h = \frac{b-a}{2 \cdot N} = \frac{1}{4}$ 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: $| Erro | \le 1,0122 \cdot 10^{-6}$.

Quando a integral imprópria envolve limite infinito: $I = \int_a^\infty f(x)dx$, aplica-se a mudança de variável $t = x^{-1}$ → $x = t^{-1}$ 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.

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

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

Neste caso $g(t) = \operatorname{sen}(t)$ 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: $G(t) = \begin{cases} \dfrac{\text{sen}(t) - p_4(t)}{\sqrt{t}} & \text{se } 0 < t \leq 1 \\ 0 & \text{se } t = 0 \end{cases}$

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

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

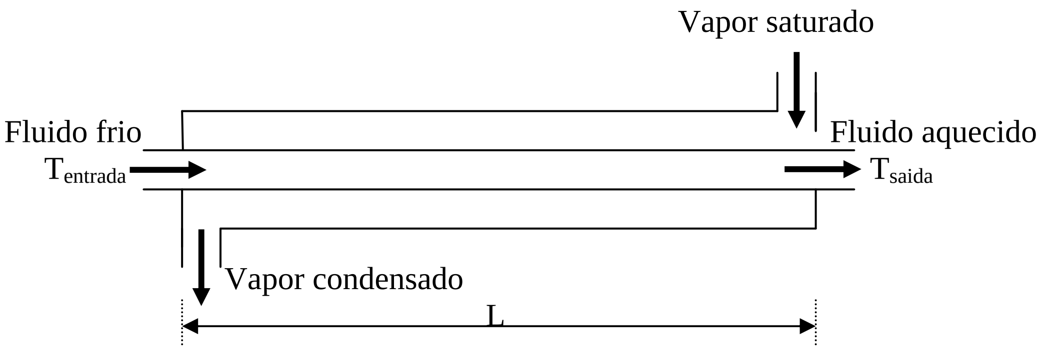
1. O fluxo, $q(\lambda,T)d\lambda$, com que a energia radiante é emitida da superfície de um corpo negro com comprimento de onda entre λ e $\lambda+d\lambda$ é dada pela equação de Planck:

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

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/cm^2/s] de um corpo negro entre os comprimentos de onde: λ_1 = 3933,666 Angstrom e λ_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 escoa 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} (^oF)	60	0
T_{saida} (^oF)	280 e 500	90 e 180
T_{vapor} (^oF)	550	250
D (polegadas)	0,495	1,032
c_P[BTU/lb_m/^oF]	$0,251+3,46 \cdot 10^{-5} \cdot T - 14400/(T+460)^2$	$0,53+0,00065 \cdot T$
k[BTU/h/ft/^oF]	$0,0085(32^o F)$ $0,0181(392^o F)$ $0,0133(212^o F)$ $0,02228(572^o F)$	0,153 (constante)
μ [lb_m/ft/h]	$0,0332\left(\frac{T+460}{460}\right)^{0,935}$	$242(0^o F)$ $30,5(100^o F)$ $5,57(200^o F)$ $82,1(50^o F)$ $12,6(150^o F)$

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/s²)	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:

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

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

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

Calcule a constante *a* e a ordem do resíduo $\Re$.

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 α = -0,1.

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

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

Calcule o valor da constante $\underline{\alpha}$ 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:

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

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

18. A função $Si(x)$ é definida por: $Si(x) = \int_0^{x} \left(\frac{\operatorname{sen}(\xi)}{\xi} \right) \cdot d\xi$. Calcule, com quatro algarismos significativos, a integral: $\int_0^{1} \left(\frac{Si(x) - \operatorname{sen}(x)}{x^3} \right) \cdot dx$.

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 $a \le x \le b \Rightarrow 0 \le f(x) < f_{\max}$) 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: $\int_0^1 \mathrm{e}^{-x^2} \cdot dx$, compare o valor obtido com o valor *exato* da integral que é: $\int_0^1 \mathrm{e}^{-x^2} \cdot dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \operatorname{erf}(1)$ [erf é a função erro].

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

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