

Interpolação Polinomial e Quadratura Numérica

Teorema de Weierstrass: se $f(x)$ é uma função contínua em um intervalo fechado $[a, b]$, então para cada $\varepsilon > 0$, existe um polinômio de grau $n(\varepsilon)$ tal que:

$$|f(x) - p_n(x)| < \varepsilon \quad \forall x \in [a, b]$$

Embora seja um teorema motivador para usar polinômios, o valor de $n(\varepsilon)$ geralmente não é conhecido, principalmente quando $f(x)$ não é dada explicitamente. Outro motivo para usar polinômios na aproximação de funções é que suas derivadas e integrais são fáceis de determinar e também são polinômios.

Como a aproximação polinomial obtida por expansão em série de Taylor concentra a sua precisão próxima ao ponto em torno do qual a função foi expandida (x_0), a mesma não é adequada para a maioria das aplicações práticas em que, geralmente, se deseja uma boa aproximação em um amplo intervalo de definição da função $f(x)$. Contudo, o polinômio obtido pela expansão de Taylor é de grande utilidade na análise numérica para estimativas de erros de técnicas numéricas. Portanto, neste capítulo são abordados polinômios que utilizam dados em vários pontos do intervalo, chamados de **polinômios interpoladores**.

Dados $n+1$ pares de valores $\{x_i, f(x_i)\}$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$, existe um e somente um polinômio $p_n(x)$ de grau $\leq n$ no qual

$$f(x_i) = p_n(x_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, n.$$

Portanto, embora existam várias fórmulas de interpolação polinomial, se elas utilizarem as mesmas informações nos **pontos nodais** $\{x_0, x_1, x_2, \dots, x_n\}$, então os polinômios obtidos serão os mesmos.

Naturalmente, se $f(x)$ for um polinômio de grau $\leq n$, então a aproximação também será exata $\forall x \neq x_i$.

Expressando o polinômio interpolador na forma: $p_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i x^i$

os coeficientes c_i são soluções do sistema abaixo de $n+1$ equações algébricas lineares:

$$\begin{cases} c_0 + c_1 x_0 + c_2 x_0^2 + \dots + c_n x_0^n = f(x_0) \\ c_0 + c_1 x_1 + c_2 x_1^2 + \dots + c_n x_1^n = f(x_1) \\ \vdots \\ c_0 + c_1 x_n + c_2 x_n^2 + \dots + c_n x_n^n = f(x_n) \end{cases}$$

cujo determinante da matriz dos coeficientes:

$$V = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{vmatrix}$$

é chamado de determinante de Vandermonde, sendo não-nulo se $x_i \neq x_j \forall i \neq j$.

O problema desta técnica de determinação dos coeficientes é a sua tendência de propagar os erros de arredondamento à medida que os pontos nodais se aproximam uns dos outros, pois o determinante de Vandermonde tende a zero nestas situações, gerando um sistema de equações mal condicionado.

Exercício: Implementar o código abaixo no MATLAB ou SCILAB para interpolar a função

$$y = f(x) = \frac{\sinh(\Phi x)}{x \sinh(\Phi)}$$

que é a solução analítica do problema de reação com difusão em um partícula catalítica esférica isotérmica com reação de primeira ordem (x é o raio adimensional e y é a concentração adimensional). Utilizar como pontos nodais, pontos igualmente espaçados entre 0,1 e 0,9, com espaçamento uniforme de 0,1 para o caso (a) e de 0,04 para o caso (b). Após obter o polinômio, interpolar a função nos valores de 0 a 1 em intervalos de 0,01. Note que entre 0 e 0,1 e entre 0,9 e 1 os valores serão extrapolados. Comparar os dois casos.

```

dx=0.1; % para o caso (a)
dx=0.04; % para o caso (b)

x=[0.1:dx:0.9]'; % pontos nodais

phi=5;
y=sinh(phi*x)./(x*sinh(phi)); % valor da função nos pontos nodais

n=length(x); % número de pontos

xc=[0:0.01:1]'; % pontos para interpolação
m=length(xc);
yc(1)=phi/sinh(phi);
yc(2:m)=sinh(phi*xc(2:m))./(xc(2:m)*sinh(phi));
% formação da matriz de Vandermonde
Um=ones(n,1); % vetor de tamanho n x 1 com todos elementos iguais a 1
M=Um;
for i=1:n-1
    M=[M x.^i];
end

C=inv(M)*y; % coeficientes polinomiais (inversão sem pivotamento)
% C=M\y; % coeficientes polinomiais (inversão com pivotamento parcial)

pnl=C'*(Um*xc').^([0:n-1]'*ones(1,m)); % valores interpolados

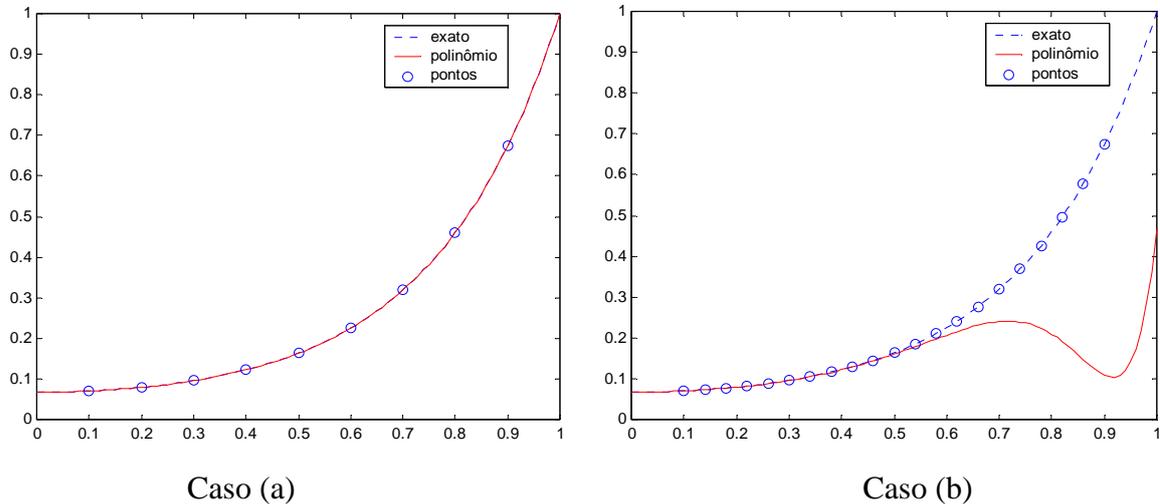
%
% forma alternativa calcular os valores interpolados
%
%for i=1:m
%    pnl(i)=C(n);
%    for j=n-1:-1:1
%        pnl(i)=pnl(i)*xc(i)+C(j);
%    end
%end

condM=cond(M) % número de condicionamento da matriz dos coeficientes

plot(xc,yc,'b:',xc,pnl,'r',x,y,'o');
legend('exato','polinômio','pontos');

```

O resultado do exercício acima é mostrado na figura abaixo, em que se observa no caso (b) o efeito dos erros de arredondamento devido à inversão matricial sem pivotamento do sistema de Vandermonde que neste caso é mal condicionado. Este problema não ocorreria se fosse realizada a inversão matricial com pivotamento (parcial ou total).



Para mostrar que o mau comportamento da interpolação polinomial de grau elevado [Caso (b) da Figura acima] é decorrente do procedimento numérico empregado na resolução do sistema algébrico linear, o mesmo problema será resolvido aplicando-se outro procedimento numérico na resolução do sistema algébrico linear. O procedimento é p “*lsolve*” encontrado no MATHCAD e cujo trecho do programa é mostrado a seguir.

$$\Phi := 5 \quad c := \sinh(\Phi) \quad f(x) := \text{if} \left(x = 0, \frac{\Phi}{c}, \frac{\sinh(\Phi \cdot x)}{x \cdot c} \right)$$

```

Coef(Δx) :=
  n ← .8 / Δx
  for i ∈ 0..n
    x ← .1 + i · Δx
    pot ← 1
    bi ← f(x)
    for j ∈ 0..n
      Ai,j ← pot
      pot ← pot · x
    c ← lsolve(A, b)

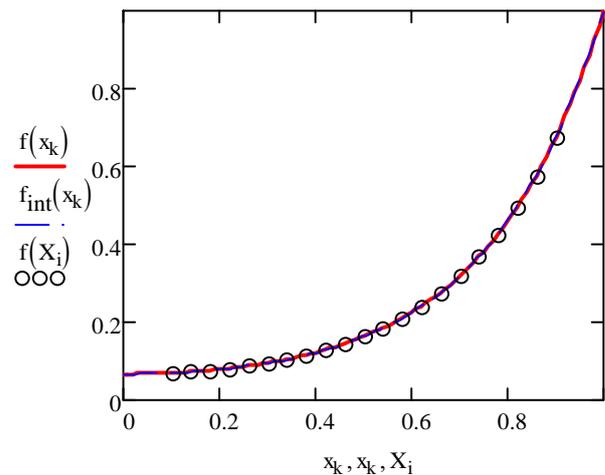
Pint(x, c) :=
  n ← last(c)
  y ← cn
  for i ∈ n - 1..0
    y ← y · x + ci
  y

```

$$\Delta x := .04 \quad c := \text{Coef}(\Delta x) \quad f_{\text{int}}(x) := p_{\text{int}}(x, c) \quad n := \text{last}(c) \quad i := 0..n \quad X_i := .1 + i \cdot \Delta x$$

$$k := 0..100 \quad x_k := \frac{k}{100}$$

Para o caso (b), o resultado obtido é mostrado na Figura seguinte.



Outro aspecto sobre a formulação $p_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i x^i$ é a sua forma ineficiente de cálculo de interpolação. A forma alternativa (aninhada):

$$p_n(x) = c_0 + x \cdot (c_1 + x \cdot (c_2 + \dots + x \cdot (c_{n-1} + x \cdot c_n) \dots))$$

requer um número bem menor de operações de multiplicação ($2n-1$ contra $n \cdot (n+1)/2$) e pode ser implementada conforme o algoritmo:

$$\begin{array}{l}
 p \leftarrow c_n \\
 \left| \text{Para } i = n-1, n-2, \dots, 2, 1, 0, \text{ faça} \right. \\
 \quad \left. p \leftarrow p \cdot x + c_i \right.
 \end{array}$$

Este algoritmo está implementado de forma comentada nos dois códigos anteriores.

As fórmulas de interpolação mais comumente usadas e que não fazem uso do determinante de Vandermonde são a fórmula interpoladora das diferenças divididas de Newton e os polinômios interpoladores de Lagrange.

0.1 Tabela de diferenças de Newton

Partindo do conceito de derivada:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_0} = f'(x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

a aproximação $\frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \equiv f[x, x_0]$ para $x \neq x_0$ é chamada de primeira diferença dividida ou diferença dividida de ordem 1 com relação a x e x_0 .

Aplicando o **teorema do valor médio diferencial**:

$$f'(\xi) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \quad \text{para } f(x) \in C^1[a, b] \text{ e algum } \xi \in [a, b], \text{ então:}$$

$$f[x, x_0] = f'(\xi) \quad \text{para algum } \xi \in [x, x_0],$$

ou seja, $f[x, x_0]$ está relacionada com a derivada primeira de $f(x)$.

Considerando o problema da interpolação linear passando pelos pontos $\{x_0, f(x_0)\}$ e $\{x_1, f(x_1)\}$, temos:

$$f(x) \cong p_1(x) = a_0 + a_1 \cdot (x - x_0)$$

como $f(x_0) = p_1(x_0) \rightarrow a_0 = f(x_0)$

$$f(x_1) = p_1(x_1) \rightarrow f(x_1) = f(x_0) + a_1 \cdot (x_1 - x_0)$$

e $a_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = f[x_1, x_0]$, ou seja, $p_1(x) = f(x_0) + f[x_1, x_0] \cdot (x - x_0)$.

Usando a definição de erro (ou resíduo) da aproximação:

$$f(x) = p_1(x) + R_1(x)$$

e sabendo que $R_1(x)$ deve se anular em x_0 e x_1 :

$$R_1(x) = g(x) \cdot (x - x_1)(x - x_0)$$

ou ainda $R_1(x) = f(x) - f(x_0) - f[x_1, x_0] \cdot (x - x_0) = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} (x - x_0) - f[x_1, x_0] \cdot (x - x_0)$

$$R_1(x) = (f[x, x_0] - f[x_1, x_0])(x - x_0) = \frac{f[x, x_0] - f[x_1, x_0]}{x - x_1} (x - x_1)(x - x_0)$$

em que $\frac{f[x, x_0] - f[x_1, x_0]}{x - x_1} \equiv f[x, x_1, x_0]$.

Definindo a função:

$$Q(t) = f(t) - p_1(t) - (t - x_1)(t - x_0)g(x)$$

ela se anula pelo menos em $t = x_1$, $t = x_0$ e $t = x$, logo $Q'(t)$ deve se anular pelo menos duas vezes no intervalo $[x, x_0]$ e $Q''(t)$ deve se anular pelo menos uma vez em um ponto $t = \xi \in [x, x_0]$:

$$Q''(\xi) = f''(\xi) - p_1''(\xi) - 2!g(x) = 0$$

como $p_1''(\xi) = 0$ (polinômio de grau 1) temos:

$$g(x) = \frac{f''(\xi)}{2!}$$

Agora, se mais um ponto $\{x_2, f(x_2)\}$ for incluído no conjunto de pontos nodais:

$$f(x) \cong p_2(x) = a_0 + a_1 \cdot (x - x_0) + a_2 \cdot (x - x_1)(x - x_0)$$

fica evidente pelo exposto acima que

$$a_2 = f[x_2, x_1, x_0]$$

podendo também ser tomado como uma boa aproximação para $R_1(x)$ se $f''(x)$ for uma função suave (que não muda bruscamente para diferentes valores de x). Isto mostra que as fórmulas das diferenças divididas de Newton podem ser usadas para determinar o grau apropriado do polinômio interpolador em função da qualidade desejada da aproximação.

Retomando a expressão: $f[x_2, x_1, x_0] = \frac{f[x_2, x_0] - f[x_1, x_0]}{x_2 - x_1}$

$$f[x_2, x_1, x_0] = \frac{\frac{f(x_2) - f(x_0)}{x_2 - x_0} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_1} = \frac{(x_1 - x_0)(f(x_2) - f(x_0)) - (x_2 - x_0)(f(x_1) - f(x_0))}{(x_2 - x_0)(x_1 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

$$f[x_2, x_1, x_0] = \frac{(x_1 - x_0)f(x_2) + (x_0 - x_2)f(x_1) + (x_2 - x_1)f(x_0)}{(x_2 - x_0)(x_1 - x_0)(x_2 - x_1)} \quad \text{ou ainda}$$

$$f[x_2, x_1, x_0] = \frac{(x_1 - x_0)f(x_2) - (x_1 - x_0)f(x_1) - (x_2 - x_1)f(x_1) + (x_2 - x_1)f(x_0)}{(x_2 - x_0)(x_1 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

$$f[x_2, x_1, x_0] = \frac{(x_1 - x_0)(f(x_2) - f(x_1)) - (x_2 - x_1)(f(x_1) - f(x_0))}{(x_2 - x_0)(x_1 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

$$f[x_2, x_1, x_0] = \frac{\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0} = \frac{f[x_2, x_1] - f[x_1, x_0]}{x_2 - x_0}$$

ou seja, $f[x_2, x_1, x_0] = f[x_1, x_2, x_0] = f[x_0, x_2, x_1] = f[x_0, x_1, x_2] = f[x_1, x_0, x_2] = f[x_2, x_0, x_1]$, a ordem dos argumentos das fórmulas das diferenças divididas é indiferente. Das expressões acima, podemos observar também que:

$$f[x_2, x_1, x_0] = \frac{f(x_2)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} + \frac{f(x_1)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}$$

Generalizando para n pontos nodais, com a inclusão da diferença dividida de ordem zero:

$$f[x_i] \equiv f(x_i)$$

temos para a **diferença dividida de ordem k** :

$$f[x_k, x_{k-1}, \dots, x_2, x_1, x_0] = \frac{f[x_k, x_{k-1}, \dots, x_2, x_1] - f[x_{k-1}, x_{k-2}, \dots, x_1, x_0]}{x_k - x_0}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, n$$

e $f[x, x_{k-1}, \dots, x_2, x_1, x_0] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$, $\xi \in [x, x_0]$.

O erro da interpolação por um polinômio de grau n é:

$$R_n(x) = f[x, x_n, x_{n-1}, \dots, x_2, x_1, x_0] \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

ou

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

sendo que a segunda forma é útil somente quando a função $f(x)$ for dada explicitamente.

Exemplo: obter o polinômio interpolador de grau 3 usando as fórmulas das diferenças divididas de Newton para os dados abaixo:

i	x_i	y_i	Δ_1	Δ_2	Δ_3
0	0	-5			
			6		
1	1	1		2	
			12		1
2	3	25		6	
			30		
3	4	55			

$$p_3(x) = f[x_0] + f[x_1, x_0] \cdot (x - x_0) + f[x_2, x_1, x_0] \cdot (x - x_1)(x - x_0) + f[x_3, x_2, x_1, x_0] \cdot (x - x_2)(x - x_1)(x - x_0)$$

$$p_3(x) = -5 + 6 \cdot (x - 0) + 2 \cdot (x - 1)(x - 0) + 1 \cdot (x - 3)(x - 1)(x - 0) = x^3 - 2x^2 + 7x - 5$$

A tabela das diferenças divididas de Newton é construída da seguinte maneira:

i	x_i	y_i					
0	x_0	$f[x_0]$					
			$f[x_1, x_0]$				
1	x_1	$f[x_1]$		$f[x_2, x_1, x_0]$			
					$f[x_3, x_2, x_1, x_0]$		
2	x_2	$f[x_2]$				$f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0]$	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	
					$f[x_n, x_{n-1}, x_{n-2}, x_{n-3}]$		
$n-1$	x_{n-1}	$f[x_{n-1}]$		$f[x_n, x_{n-1}, x_{n-2}]$			
			$f[x_n, x_{n-1}]$				
n	x_n	$f[x_n]$					

Para um x qualquer entre x_0 e x_n , a interpolação polinomial de grau n é obtida através das expressões:

$$f[x_0, x] = \frac{f(x_0) - f(x)}{x_0 - x} \Rightarrow f(x) = f(x_0) + (x - x_0) \cdot f[x_0, x], \text{ mas:}$$

$$f[x_1, x_0, x] = \frac{f[x_1, x_0] - f[x_0, x]}{x_1 - x} \Rightarrow f[x_0, x] = f[x_1, x_0] + (x - x_1) \cdot f[x_1, x_0, x], \text{ mas:}$$

$$f[x_2, x_1, x_0, x] = \frac{f[x_2, x_1, x_0] - f[x_1, x_0, x]}{x_2 - x} \Rightarrow f[x_1, x_0, x] = f[x_2, x_1, x_0] + (x - x_2) \cdot f[x_2, x_1, x_0, x]$$

⋮

$$f[x_{n-1}, \dots, x_1, x_0, x] = \frac{f[x_{n-1}, \dots, x_1, x_0] - f[x_{n-2}, \dots, x_0, x]}{x_{n-1} - x} \Rightarrow$$

$$f[x_{n-2}, \dots, x_0, x] = f[x_{n-1}, \dots, x_1, x_0] + (x - x_{n-1}) \cdot f[x_{n-1}, \dots, x_1, x_0, x]$$

e, finalmente:

$$f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0, x] = \frac{f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0] - f[x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_0, x]}{x_n - x} \Rightarrow$$

$$f[x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_0, x] = f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0] + (x - x_n) \cdot f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0, x]$$

em que o último termo: $f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0, x] \prod_{i=0}^n (x - x_i)$ é o erro da interpolação, que pode ser estimado com o uso de um ponto adicional $\{x_{n+1}, f(x_{n+1})\}$ próximo a x .

Exemplos:

a) A tabela abaixo contém os valores da viscosidade (em centipoise) de uma solução contendo 60% de sacarose a várias temperaturas. Construa a Tabela de Diferenças destes dados.

T (°C)	μ (centipoise)	Δ_1	Δ_2	Δ_3
10	113,9			
		-5,72		
20	56,7		0,17255	
		-2,269		-0,004088
30	34,01		0,0499	
		-1,271		
40	21,30			

b) Refaça a Tabela de Diferenças adotando $\ln(\mu)$ no lugar de μ :

T (°C)	$\ln(\mu)$	Δ_1	Δ_2	Δ_3
10	4,735321			
		-0,069755		

20	4,037774		0,000932	
		-0,051112		-0,000024
30	3,526655		0,000216	
		-0,046795		
40	3,058707			

Algoritmo: Interpolação polinomial de Newton

Dados $n+1$ pontos $\{x_i, y_i\}$, deseja-se interpolar a função em $x = x^*$

Para $i = 0, 1, 2, \dots, n$, faça

$A_{i,0} \leftarrow y_i$

Para $i = 1, 2, \dots, n$, faça

Para $j = 0, 1, 2, \dots, n-i$, faça

$$A_{j,i} \leftarrow \frac{A_{j+1,i-1} - A_{j,i-1}}{x_{i+j} - x_j}$$

$p \leftarrow 1$

$y^* \leftarrow A_{0,0}$

Para $i = 1, 2, \dots, n$, faça

$p \leftarrow (x^* - x_{i-1}) \cdot p$

$y^* \leftarrow y^* + p \cdot A_{0,i}$

Ao final do algoritmo y^* contém o valor interpolado de $f(x)$ em $x = x^*$.

0.2 Interpolação de Lagrange

Na derivação das fórmulas das diferenças divididas foi adotada a forma polinomial:

$$p_n(x) = a_0 + a_1 \cdot (x - x_0) + a_2 \cdot (x - x_1)(x - x_0) + \dots + a_n \cdot \prod_{i=0}^{n-1} (x - x_i)$$

para a determinação dos coeficientes a_i , $i = 0, 1, 2, \dots, n$. No caso da interpolação de Lagrange, a forma polinomial adotada é a seguinte:

$$p_n(x) = b_0 \cdot (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n) + b_1 \cdot (x - x_0)(x - x_2) \cdots (x - x_n) + \dots + b_i \cdot (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n) + \dots + b_n \cdot (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})$$

cujos coeficientes b_i , $i = 0, 1, 2, \dots, n$ são determinados diretamente pelas condições $p_n(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$, resultando em:

$$b_i = \frac{f(x_i)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n.$$

Definindo os **interpoladores de Lagrange**:

$$\ell_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$$

que são polinômios de grau n , temos:

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

Pela definição de $\ell_i(x)$, podemos observar que:

$$\ell_i(x_j) = \delta_{i,j} = \begin{cases} 0 & , i \neq j \\ 1 & , i = j \end{cases}$$

ou seja, $x_0, x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n$ são as n raízes de $\ell_i(x)$.

Se $f(x) = x^k$, então $x^k = \sum_{i=0}^n \ell_i(x) x_i^k$ para $k = 0, 1, 2, \dots, n$, pois a aproximação é exata se $f(x)$ for um polinômio de grau $\leq n$. Desta relação resulta para $k = 0$:

$$\sum_{i=0}^n \ell_i(x) = 1.$$

Definindo o **polinômio nodal**, que tem como raízes $x = x_i, i = 0, 1, 2, \dots, n$, logo de grau $n + 1$:

$$P_{n+1}(x) = a_{n+1} \cdot (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})(x - x_n) = a_{n+1} \cdot \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

e chamando de $q_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x - x_j)$ o numerador de $\ell_i(x)$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$, resulta que:

$$\ell_i(x) = \frac{q_i(x)}{q_i(x_i)} \quad \text{e} \quad a_{n+1} \cdot q_i(x) = \frac{P_{n+1}(x)}{x - x_i}.$$

Aplicando o limite para $x \rightarrow x_i$ na segunda expressão: $\lim_{x \rightarrow x_i} \frac{P_{n+1}(x)}{x - x_i} = P'_{n+1}(x_i)$, temos:

$$a_{n+1} \cdot q_i(x_i) = P'_{n+1}(x_i) \quad \text{e} \quad \ell_i(x) = \frac{P_{n+1}(x)}{(x - x_i) P'_{n+1}(x_i)}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n.$$

Sabendo que $f(x) = p_n(x) + R_n(x)$ e que $R_n(x)$ deve se anular em $x_i, i = 0, 1, 2, \dots, n$, então $R_n(x) = P_{n+1}(x) \cdot G(x)$, que procedendo de maneira análoga à seção anterior, a função:

$$Q(t) = f(t) - p_n(t) - P_{n+1}(t) \cdot G(x)$$

deve se anular em $t = x_i$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$ e em $t = x$, ou seja, em no mínimo $n + 2$ vezes dentro do intervalo $[x_0, x_n]$. Portanto, $Q^{(n+1)}(t)$ deve se anular em pelo menos um ponto neste intervalo, $t = \xi$:

$$Q^{(n+1)}(\xi) = 0 = f^{(n+1)}(\xi) - p_n^{(n+1)}(\xi) - P_{n+1}^{(n+1)}(\xi) \cdot G(x)$$

como $p_n^{(n+1)}(\xi) = 0$ (polinômio de grau n) e $P_{n+1}^{(n+1)}(\xi) = a_{n+1} \cdot (n+1)!$, temos:

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

Exemplo: obter o polinômio interpolador de Lagrange de grau 2 para os seguintes dados:

i	x_i	$y_i = f(x_i)$
0	0	-5
1	1	1
2	3	25

$$\ell_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{(x - 1)(x - 3)}{(0 - 1)(0 - 3)} = \frac{x^2 - 4x + 3}{3}$$

$$\ell_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = \frac{(x - 0)(x - 3)}{(1 - 0)(1 - 3)} = \frac{-x^2 + 3x}{2}$$

$$\ell_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{(x - 0)(x - 1)}{(3 - 0)(3 - 1)} = \frac{x^2 - x}{6}$$

$$p_2(x) = \sum_{i=0}^2 \ell_i(x) f(x_i) = -5 \cdot \ell_0(x) + \ell_1(x) + 25 \cdot \ell_2(x) = 2x^2 + 4x - 5$$

Comparando com as diferenças divididas de Newton, a interpolação de Lagrange tem como desvantagens a sua dificuldade em obter uma estimativa do erro e a necessidade de reconstruir todos os interpoladores de Lagrange com a adição de novos pontos. Ou seja, não é um método adequado quando o grau do polinômio não é conhecido a priori. Além disto, demanda uma quantidade maior de cálculos quando várias interpolações precisam ser obtidas com o mesmo conjunto de pontos nodais. Uma maneira de construir os polinômios de Lagrange de maneira recursiva para a inclusão gradual de novos pontos até uma precisão desejada é através do uso do método de Neville (não abordado aqui, mas pode ser encontrado em Burden e Faires, 2003).

Algoritmo: Interpolação polinomial de Lagrange

Dados $n+1$ pontos $\{x_i, y_i\}$, deseja-se interpolar a função em $x = x^*$

Para $i = 0, 1, 2, \dots, n$, faça

$p_i \leftarrow 1$

Para $j = 0, 1, 2, \dots, n$, faça

$$\text{Se } i \neq j: p_i \leftarrow \left(\frac{x^* - x_j}{x_i - x_j} \right) \cdot p_i$$

$$y^* \leftarrow 0$$

$$\left| \begin{array}{l} \text{Para } i = 0, 1, 2, \dots, n, \text{ faça} \\ y^* \leftarrow y^* + p_i \cdot y_i \end{array} \right.$$

Ao final do algoritmo y^* contém o valor interpolado de $f(x)$ em $x = x^*$.

0.3 Análise de erros

Ao aproximarmos uma função $f(x)$ pelo polinômio de Taylor de grau n , vimos que o erro de truncamento da aproximação é dado por:

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

Contudo, como o valor de $f^{(n+1)}[\xi(x)]$ não pode, geralmente, ser calculado por não conhecermos a função $\xi(x)$, podemos apenas estabelecer um limite superior para o erro da aproximação, tomando o valor máximo de $|f^{(n+1)}(x)|$ no intervalo $[a, b]$.

No caso da interpolação polinomial, vimos que o erro da aproximação é dado por:

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

e os mesmos comentários acima se aplicam, com o agravante que neste caso, geralmente, a função $f(x)$ não é conhecida para podermos encontrar o valor máximo de $|f^{(n+1)}(x)|$. Neste caso podemos recorrer ao uso da tabela de diferenças divididas de Newton para encontrarmos o valor máximo de $|f^{(n+1)}(x)|$, usando a relação:

$$\frac{f^{(n+1)}[\xi(x)]}{(n+1)!} = f[x, x_n, x_{n-1}, \dots, x_2, x_1, x_0]$$

Naturalmente, se $f(x)$ for conhecida, então $R_n(x)$ também pode ser obtida diretamente de:

$$R_n(x) = f(x) - p_n(x)$$

Neste caso, uma informação útil é o erro médio quadrático (MSE, *Mean Square Error*) da aproximação no intervalo $[a, b]$:

$$MSE = \frac{1}{b-a} \int_a^b R_n^2(x) dx$$

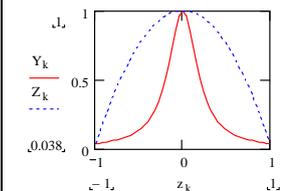
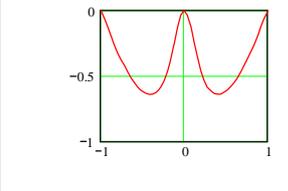
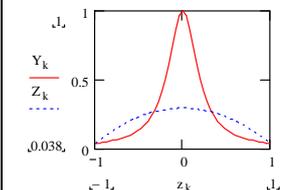
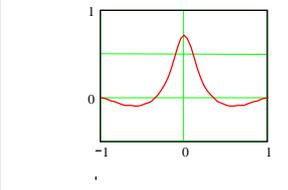
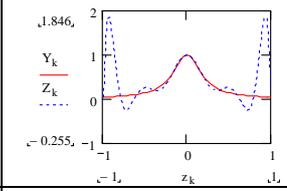
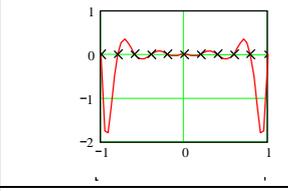
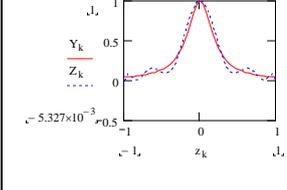
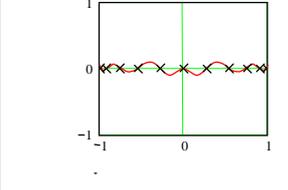
ou normalizando x para o intervalo $[0, 1]$:

$$y = \frac{x-a}{b-a} \quad \rightarrow \quad dx = (b-a) dy, \quad \text{resulta em:}$$

$$MSE = \int_0^1 R_n^2(y) dy$$

que pode ser usado para determinar a melhor aproximação para $f(x)$ dentre várias alternativas.

Exemplo: construir os gráficos das aproximações de $f(x) = \frac{1}{1+25x^2}$ usando interpolações polinomiais de 2ª, 3ª e 10ª graus com pontos igualmente espaçados no intervalo $[-1, 1]$, os gráficos dos erros da interpolação e calcular o MSE.

Interpolação	Comparação da Função Real com a Interpolada	Erro da Interpolação	$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} R_n(x)^2 \cdot dx$
Interpolação Polinomial de Segundo Grau com Pontos Igualmente Espaçados			0,207
Interpolação Polinomial de Terceiro Grau com Pontos Igualmente Espaçados			0,0595
Interpolação Polinomial de Décimo Grau com Pontos Igualmente Espaçados			0,337
Interpolação Polinomial de Décimo Grau com Pontos a Raízes do 11º Polinômio de Chebyshev			$3,23 \cdot 10^{-3}$

Neste exemplo foram usados pontos igualmente espaçados para construir os polinômios interpoladores. Porém, é possível determinar os pontos nodais que geram um polinômio interpolador com o menor resíduo possível entre polinômios de mesmo grau. Para determinar estes pontos nodais ótimos, partimos da expressão do erro:

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

em que $P_{n+1}(x)$ é o polinômio nodal com $a_{n+1} = 1$. Reescrevendo $P_{n+1}(x)$ na forma:

$$P_{n+1}(x) = x^{n+1} + \sum_{i=0}^n c_i x^i$$

os $n+1$ coeficientes c_i podem ser determinados de maneira a minimizar o MSE:

$$\mathbf{c} = \arg \min_{c_0, c_1, \dots, c_n} MSE(\mathbf{c})$$

sendo

$$MSE(\mathbf{c}) = \int_0^1 R_n^2(x; \mathbf{c}) dx = \int_0^1 \left\{ \frac{f^{(n+1)}[\xi(x)]}{(n+1)!} \left(x^{n+1} + \sum_{i=0}^n c_i x^i \right) \right\}^2 dx$$

Aplicando o teorema do valor médio:

$$MSE(\mathbf{c}) = \left\{ \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \right\}^2 \int_0^1 \left(x^{n+1} + \sum_{i=0}^n c_i x^i \right)^2 dx$$

Como o mínimo do $MSE(\mathbf{c})$ ocorre quando $\nabla_{\mathbf{c}} MSE = 0$, temos:

$$\frac{\partial MSE(\mathbf{c})}{\partial c_k} = 2 \left\{ \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \right\}^2 \int_0^1 x^k P_{n+1}(x) dx = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots, n$$

ou seja,

$$\int_0^1 x^k P_{n+1}(x) dx = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots, n$$

Concluindo-se que $P_{n+1}(x)$ é um polinômio ortogonal no intervalo $[0, 1]$ em relação à função peso $w(x) = 1$. O polinômio que satisfaz esta condição de ortogonalidade é o polinômio de Jacobi, $P_{n+1}^{(\alpha, \beta)}(x)$, com $\alpha = 0$ e $\beta = 0$. Portanto, os pontos nodais que minimizam o MSE são as raízes do polinômio de Jacobi $P_{n+1}^{(0,0)}(x)$. Se o intervalo utilizado fosse $[-1, 1]$, então teríamos o polinômio de Legendre.

0.4 Critério de minimização do erro máximo

Até o momento utilizamos as condições:

$$f(x_i) = p_n(x_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$$

para determinarmos os coeficientes de $p_n(x)$. Um outro critério que pode ser utilizado é a minimização do erro absoluto máximo da aproximação nos pontos dados:

$$\min_{c_0, c_1, \dots, c_n} \max_i |f(x_i) - p_n(x_i)|$$

ou para o caso de $f(x)$ ser conhecida:

$$\min_{c_0, c_1, \dots, c_n} \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - p_n(x)|$$

Este critério é conhecido como **princípio minimax** de Chebyshev e o polinômio obtido é chamado de polinômio ótimo ou minimax.

Normalizando $z \in [a, b]$ para o intervalo $[-1, 1]$:

$$x = \frac{2z - b - a}{b - a}$$

é possível observar que os monômios $1, x, x^2, \dots, x^n$ de $p_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i x^i$ possuem magnitude máxima em $x = \pm 1$ e mínima em $x = 0$, não havendo uma distribuição uniforme dos erros. Logo, se for possível encontrar um polinômio que distribua os erros de forma mais uniforme, a minimização do erro máximo resultará na melhor aproximação possível. Os polinômios que apresentam esta propriedade são os polinômios de Chebyshev:

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_2(x) = 2x^2 - 1$$

$$T_3(x) = 4x^3 - 3x$$

$$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$$

$$T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$$

$$T_6(x) = 32x^6 - 48x^4 + 18x^2 - 1$$

$$T_7(x) = 64x^7 - 112x^5 + 56x^3 - 7x$$

$$T_8(x) = 128x^8 - 256x^6 + 160x^4 - 32x^2 + 1$$

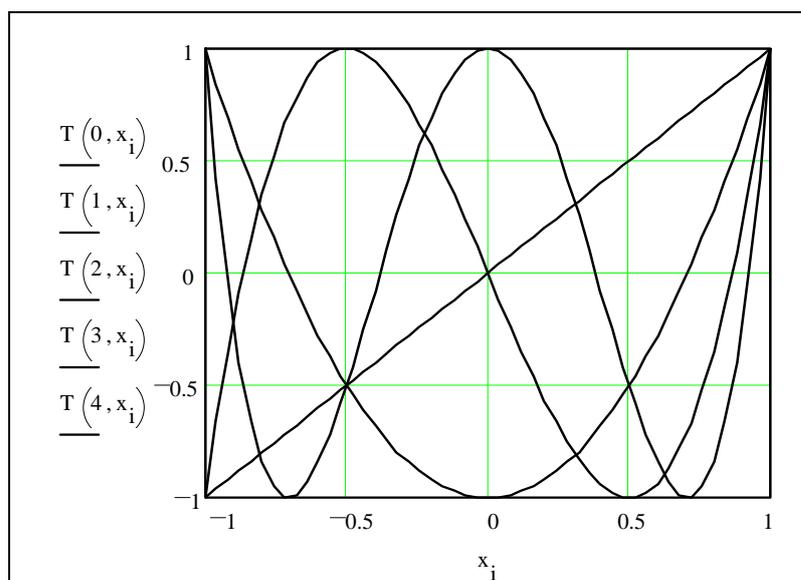
$$T_9(x) = 256x^9 - 576x^7 + 432x^5 - 120x^3 + 9x$$

Fórmula de Recorrência:

$$T_{n+1}(x) = 2 \cdot x \cdot T_n(x) - T_{n-1}(x) \quad \text{para } n = 1, 2, \dots$$

$$\text{com } T_0(x) = 1 \text{ e } T_1(x) = x$$

Gráfico dos 5 primeiros polinômios de Chebyshev



Os polinômios de Chebyshev são ortogonais em $x \in [-1, 1]$ com respeito a função peso $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, ou seja:

$$\int_{-1}^1 \frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \begin{cases} 0, & n \neq m \\ \frac{\pi}{2} = \|T_n(x)\|^2, & n = m \end{cases}$$

Estes polinômios originaram das funções trigonométricas $\cos \theta, \cos 2\theta, \cos 3\theta, \dots, \cos n\theta$ que distribuem seus máximos e mínimos de maneira uniforme no intervalo $[0, \pi]$. Ao aplicar a mudança de variável: $x = \cos \theta \rightarrow x \in [-1, 1]$ e a propriedade: $\cos n\theta = 2 \cos \theta \cos[(n-1)\theta] - \cos[(n-2)\theta]$, resulta nos polinômios de Chebyshev.

Pela condição de ortogonalidade, os coeficientes da aproximação:

$$f(x) \cong \sum_{i=0}^n a_i T_i(x)$$

podem ser determinados por: $a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx$ e $a_k = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{f(x)T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx, k = 1, 2, \dots, n.$

Como $d\theta = \frac{-dx}{\sqrt{1-x^2}}$, então $a_0 = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi f(\cos \theta) d\theta$ e $a_k = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi f(\cos \theta) \cos(k\theta) d\theta, k = 1, 2, \dots, n.$

As n raízes de $T_n(x)$ são reais (característica de um polinômio ortogonal), ocorrem no intervalo $[-1, 1]$ e são dadas por:

$$r_k = \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2n} \right], k = 1, 2, \dots, n.$$

Representando os monômios x^k por: $x^k = \sum_{i=0}^k a_i T_i(x)$, é possível construir a tabela:

Potências de x em função dos polinômios de Chebyshev:

$$1 = T_0(x)$$

$$x = T_1(x)$$

$$x^2 = [T_2(x) + T_0(x)]/2$$

$$x^3 = [T_3(x) + 3T_1(x)]/4$$

$$x^4 = [T_4(x) + 4T_2(x) + 3T_0(x)]/8$$

$$x^5 = [T_5(x) + 5T_3(x) + 10T_1(x)]/16$$

$$x^6 = [T_6(x) + 6T_4(x) + 15T_2(x) + 10T_0(x)]/32$$

$$x^7 = [T_7(x) + 7T_5(x) + 21T_3(x) + 35T_1(x)]/64$$

$$x^8 = [T_8(x) + 8T_6(x) + 28T_4(x) + 56T_2(x) + 35T_0(x)]/128$$

$$x^9 = [T_9(x) + 9T_7(x) + 36T_5(x) + 84T_3(x) + 126T_1(x)]/256$$

que tem utilidade na telescopagem de séries.

Normalizando os polinômios de Chebyshev de tal forma que o coeficiente de maior grau seja igual 1, obtém-se os **polinômios de Chebyshev mônicos**:

$$\bar{T}_n(x) = \frac{T_n(x)}{2^{n-1}}$$

Que possui a propriedade de um polinômio miminal:

$$\frac{1}{2^{n-1}} = \max_{x \in [-1,1]} |\bar{T}_n(x)| \leq \max_{x \in [-1,1]} |P_n(x)| \quad \forall P_n(x)$$

E se $\max_{x \in [-1,1]} |P_n(x)| = \max_{x \in [-1,1]} |\bar{T}_n(x)|$, então $P_n(x) = \bar{T}_n(x)$.

0.5 Telescopagem de séries

A telescopagem de séries de potências ou economia de Chebyshev consiste em expressar os monômios da série em termos dos polinômios de Chebyshev, coletar os coeficientes de cada polinômio $T_i(x)$ e truncar a série nos monômios de Chebyshev de alta ordem sabendo que seu coeficiente representa o erro máximo da aproximação, pois $|T_i(x)| \leq 1$. A série truncada pode então ser re-expressa em termos dos monômios de x . Este procedimento é equivalente a fazer sucessivas reduções de grau do polinômio até a precisão desejada usando o polinômio Chebyshev mônico:

$$p_{n-1}(x) = p_n(x) - a_n \bar{T}_n(x), \quad \text{com } |p_n(x) - p_{n-1}(x)| = |a_n \bar{T}_n(x)| \leq \frac{|a_n|}{2^{n-1}}$$

em que a_n é o coeficiente de x_n de $p_n(x)$.

Exemplo: reduzir o grau do seguinte polinômio que aproxima a função $f(x) = e^x$:

$$p_4(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} \cong e^x \quad x \in [-1, 1]$$

Mantendo um erro máximo inferior a 0,05.

O erro da aproximação por $p_4(x)$ é: $R_4(x) = \frac{f^{(5)}(\xi) x^5}{5!} \rightarrow |R_4(x)| \leq \frac{e}{5!} \cong 0,023$

Reduzindo o grau da aproximação para $p_3(x)$:

Caso 1) Sem telescopagem: $p_3(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6}$, temos:

$$R_3(x) = \frac{f^{(4)}(\xi) x^4}{4!} \rightarrow |R_3(x)| \leq \frac{e}{4!} \cong 0,113, \text{ que está acima de } 0,05.$$

Caso 2) Com telescopagem:

$$p_4(x) = 1 + T_1(x) + \frac{T_2(x) + T_0(x)}{2 \cdot 2} + \frac{T_3(x) + 3T_1(x)}{4 \cdot 6} + \frac{T_4(x) + 4T_2(x) + 3T_0(x)}{8 \cdot 24}$$

Que após coletar os termos comuns de $T_i(x)$, resulta em:

$$p_4(x) = 1 + \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{64}\right)T_0(x) + \left(1 + \frac{1}{8}\right)T_1(x) + \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{48}\right)T_2(x) + \frac{T_3(x)}{24} + \frac{T_4(x)}{192}$$

Truncando no termo de grau 3:

$$p_3(x) = 1 + \frac{17}{64}T_0(x) + \frac{9}{8}T_1(x) + \frac{13}{48}T_2(x) + \frac{T_3(x)}{24}, \text{ o erro entre as duas aproximações é:}$$

$$|p_4(x) - p_3(x)| = \left| \frac{T_4(x)}{192} \right| \leq \frac{1}{192} \cong 0,0052$$

Portanto, o erro máximo ao aproximar $f(x)$ por $p_3(x)$ é: $0,023 + 0,0052 = 0,0282 < 0,05$.

Reescrevendo o polinômio em termos das potências de x :

$$p_3(x) = 1 + \frac{17}{64} \cdot 1 + \frac{9}{8} \cdot x + \frac{13}{48} \cdot (2x^2 - 1) + \frac{4x^3 - 3x}{24} = \frac{191}{192} + x + \frac{13}{24}x^2 + \frac{x^3}{6}$$

com $|R_3(x)| \leq 0,0282$.

Ou de maneira similar: $p_3(x) = p_4(x) - a_4 \bar{T}_4(x)$, isto é:

$$p_3(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} - \frac{1}{24} \left(x^4 - x^2 + \frac{1}{8} \right), \text{ pois } a_4 = 1/24, \text{ que após rearranjo dos termos}$$

resulta em:

$$p_3(x) = \frac{191}{192} + x + \frac{13}{24}x^2 + \frac{x^3}{6}.$$

Reduzindo mais um grau na aproximação: $p_2(x) = p_3(x) - a_3 \bar{T}_3(x)$, temos:

$$p_2(x) = \frac{191}{192} + x + \frac{13}{24}x^2 + \frac{x^3}{6} - \frac{1}{6} \left(x^3 - \frac{3}{4}x \right), \text{ levando a:}$$

$$p_2(x) = \frac{191}{192} + \frac{9}{8}x + \frac{13}{24}x^2, \text{ com } |p_3(x) - p_2(x)| = \left| \frac{\bar{T}_3(x)}{6} \right| \leq \frac{1}{6 \cdot 2} \cong 0,042.$$

Portanto, o erro máximo ao aproximar $f(x)$ por $p_2(x)$ é: $0,0282 + 0,042 = 0,0702 > 0,05$.

1-) TELESCOPAGEM DE SÉRIES

Exponencial de x – com x no intervalo $-1 \leq x \leq +1$ com erro inferior a 10^{-3}

e^x

$$1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} + \frac{x^5}{120} + \frac{x^6}{720} + \frac{x^7}{5040} + \frac{x^8}{40320} + \frac{x^9}{362880}$$

Expansão em série feita simbolicamente pelo MATHCAD até a nona potência de x

$$1 = T_0(x)$$

$$x = T_1(x)$$

$$x^2 = [T_2(x) + T_0(x)]/2$$

$$x^3 = [T_3(x) + 3T_1(x)]/4$$

$$x^4 = [T_4(x) + 4T_2(x) + 3T_0(x)]/8$$

$$x^5 = [T_5(x) + 5T_3(x) + 10T_1(x)]/16$$

$$x^6 = [T_6(x) + 6T_4(x) + 15T_2(x) + 10T_0(x)]/32$$

$$x^7 = [T_7(x) + 7T_5(x) + 21T_3(x) + 35T_1(x)]/64$$

$$x^8 = [T_8(x) + 8T_6(x) + 28T_4(x) + 56T_2(x) + 35T_0(x)]/128$$

$$x^9 = [T_9(x) + 9T_7(x) + 36T_5(x) + 84T_3(x) + 126T_1(x)]/256$$

Aproximação da exponencial por um polinômio de terceiro grau: $\frac{1}{24} \cdot \frac{1}{8} = 5.21 \times 10^{-3}$

Erro da aproximação do primeiro termo após x^3

Como apenas este termo excede 10^{-3} o Erro total será então superior a 10^{-3}

Aproximação da exponencial por um polinômio de quarto grau: $\frac{1}{120} \cdot \frac{1}{16} = 5.21 \times 10^{-4}$

Erro da aproximação do primeiro termo após x^4

Erro inferior a 10^{-3}

Cálculo do Erro Máximo (em módulo) Total:

$$E_{\max} = \frac{1}{120} \cdot \frac{1}{16} + \frac{1}{720} \cdot \left(\frac{1+6}{32}\right) + \frac{1}{5040} \cdot \left(\frac{1+7}{64}\right) + \frac{1}{40320} \cdot \left(\frac{1+8}{128}\right) + \frac{1}{362880} \cdot \left(\frac{1+9+36}{256}\right) + \frac{e}{10!} = 8.52 \times 10^{-4}$$

Erro máximo inferior a 10^{-3}

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_2(x) = 2x^2 - 1$$

$$T_3(x) = 4x^3 - 3x$$

$$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$$

2-)TELESCOPAGEM DE SÉRIES

Cosseno de x – com x no intervalo $-1 \leq x \leq +1$ com erro inferior a 10^{-3}

$\cos(x)$

$$1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} - \frac{x^6}{720} + \frac{x^8}{40320} \quad \text{Expansão em série feita simbolicamente pelo MATHCAD até a oitava potência de } x$$

Apresenta um erro de truncamento máximo (em módulo) de: $E_{10} := \frac{1}{10!} = 2.76 \times 10^{-7}$

Aproximação da exponencial por um polinômio de segundo grau: $\frac{1}{24} \cdot \frac{1}{8} = 5.21 \times 10^{-3}$

Erro da aproximação do termo em x^4

Como apenas este termo excede 10^{-3} o Erro total será então superior a 10^{-3}

Aproximação da exponencial por um polinômio de quarto grau: $\frac{1}{720} \cdot \frac{1}{32} = 4.34 \times 10^{-5}$

Erro da aproximação do termo de x^6

Erro inferior a 10^{-3}

Cálculo do Erro Máximo (em módulo) Total:

$$E_{\max} := \frac{1}{720} \left(\frac{1}{32} \right) + \frac{1}{40320} \left(\frac{1+8}{128} \right) + \frac{1}{10!} = 4.54 \times 10^{-5}$$

Erro máximo inferior a 10^{-3}

$$1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} - \frac{6 \cdot (8 \cdot x^4 - 8 \cdot x^2 + 1) + 15 \cdot (2 \cdot x^2 - 1) + 10}{720 \cdot 32} + \frac{28 \cdot (8 \cdot x^4 - 8 \cdot x^2 + 1) + 56 \cdot (2 \cdot x^2 - 1) + 35}{40320 \cdot 128}$$

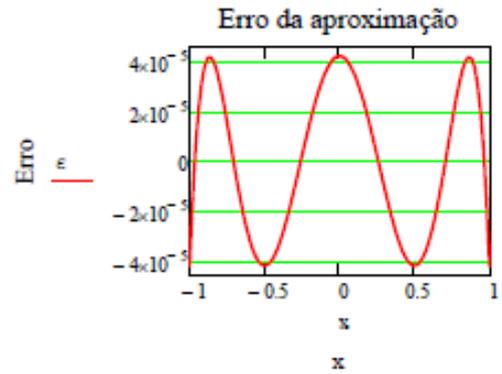
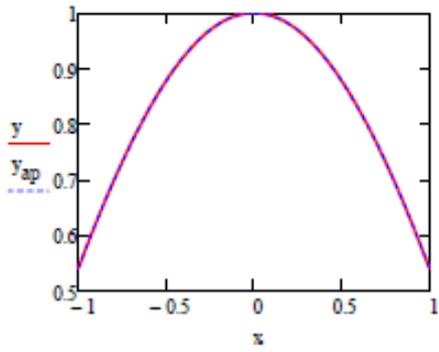
$$\begin{pmatrix} 737249 \\ 737280 \\ 0 \\ 4601 \\ 9216 \\ 0 \\ 913 \\ 23040 \end{pmatrix}$$

Coefficientes calculados simbolicamente pelo MATHCAD

$$C := \begin{pmatrix} 737249 \\ 737280 \\ 4601 \\ 9216 \\ 913 \\ 23040 \end{pmatrix}$$

$$f_{\text{ap}}(x) := \sum_{i=0}^2 (C_i \cdot x^{2-i}) \quad E(x) := \cos(x) - f_{\text{ap}}(x)$$

$$k := 0..100 \quad x_k := -1 + \frac{k}{50} \quad y_k := \cos(x_k) \quad y_{\text{ap}_k} := f_{\text{ap}}(x_k) \quad \epsilon_k := E(x_k)$$



$$c_0 := 1 \quad i := 1..2 \quad c_i := \frac{c_{i-1}}{2 \cdot i \cdot (2 \cdot i - 1)}$$

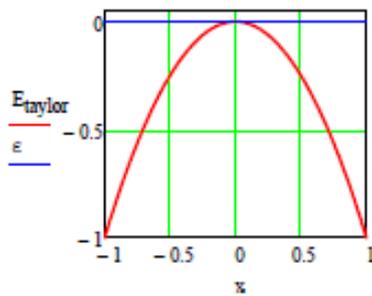
$$c^T = (1 \quad 0.5 \quad 0.041666666666666666 \quad 0.166666666666666666 \quad 0.041666666666666666)$$

$$E_{\text{taylor}_k} := y_k - \sum_{i=0}^2 [c_i (x_k)^{2 \cdot i}]$$

Coefficientes resultantes do simples truncamento da série de Taylor após o termo em x^4

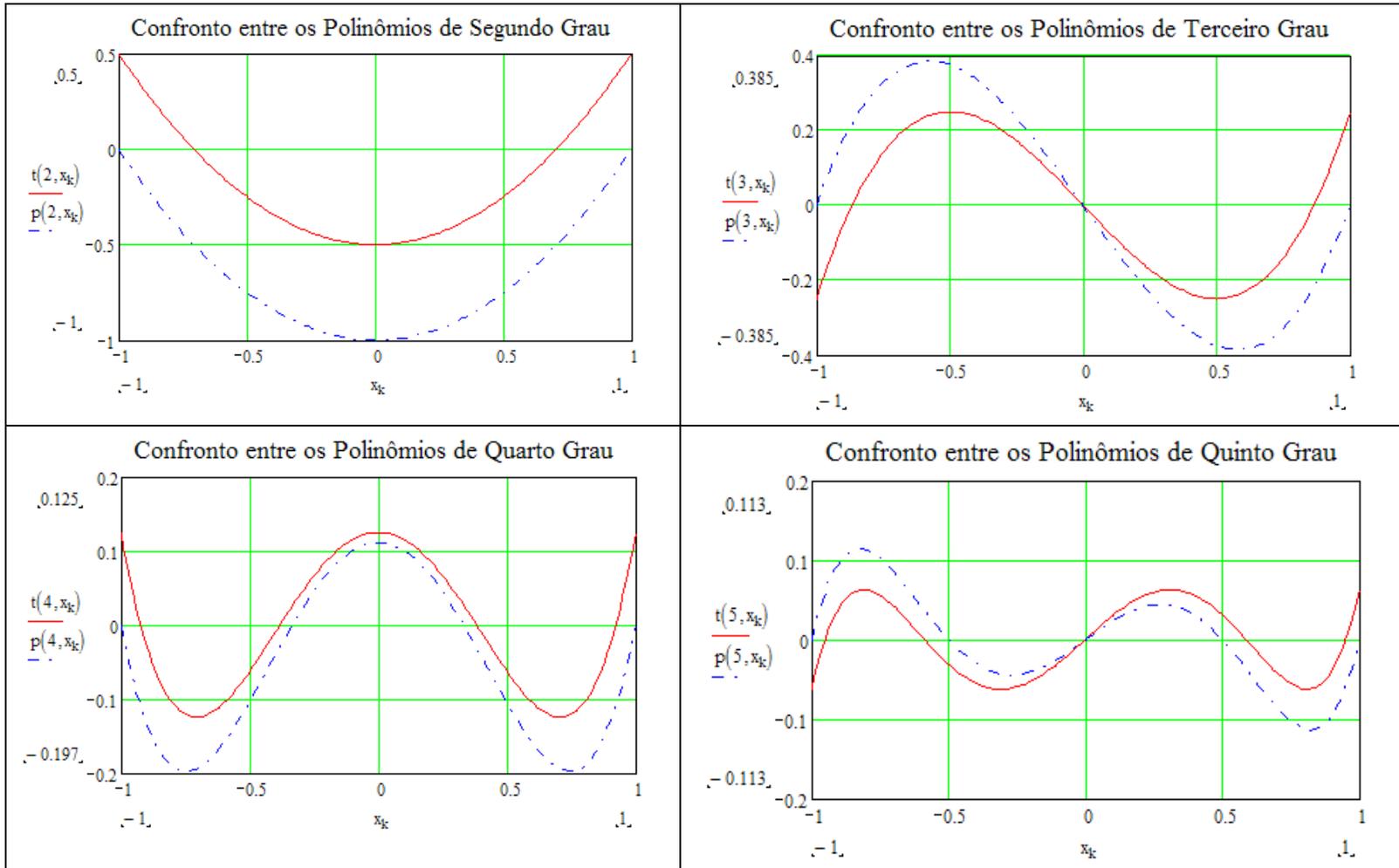
$$c^T = (0.9999579535590277 \quad -0.4992404513888889 \quad 0.03962673611111111)$$

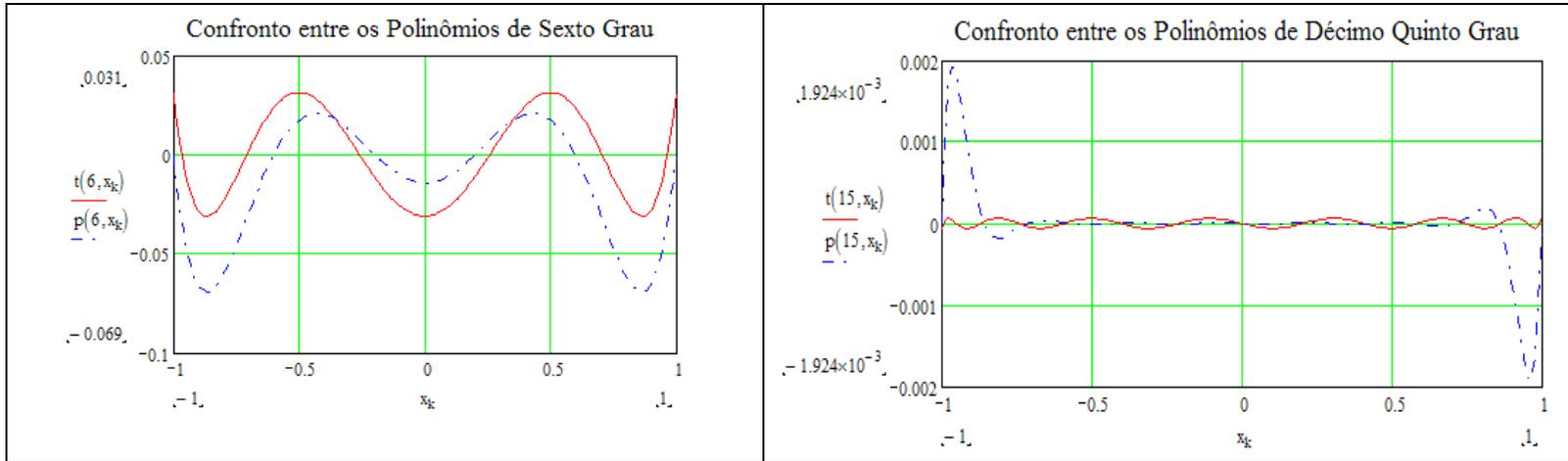
Coefficientes resultantes da telescopagem da série de Taylor



Comparação entre o erro resultante do simples truncamento da série após o termo em x^4 (curva em vermelho) e o erro resultante da série telescopada usando Chebishev (curva em azul)

Nas figuras a seguir são comparados os valores dos polinômios nodais com pontos igualmente espaçados com os polinômios nodais construídos a partir do polinômio de Chebyshev normalizados $[t_n(x) = \frac{T_n(x)}{2^{n-1}}$ para $n \geq 1$]. Note que: $|t_n(x)| \leq \frac{1}{2^{n-1}}$ para $n \geq 1$.





Integração Numérica

Na apresentação das formas de interpolação polinomial, argumentou-se que o uso de polinômios na aproximação de funções está relacionado à facilidade de cálculos de derivadas e integrais. A seguir, 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**.

0.6 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:

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

em que $a_i = \int_a^b \ell_i(x) dx$ 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:

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

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 $j = 0, 1, \dots, n$

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

A maneira mais simples de gerar os coeficientes do método de Newton-Coates é a partir do cômputo de integrais do tipo: $I_k = \int_0^1 x^k \cdot dx$ para $k = 0, 1, \dots, n$. O valor exato desta integral

é: $I_k = \frac{1}{k+1}$, a mesma integral calculada pelo método de Newton-Coates seria:

$$\int_0^1 x^k \cdot dx = \sum_{j=0}^n \omega_j^{(n)} \cdot (x_j^k) = \sum_{j=0}^n \omega_j^{(n)} \cdot \left(\frac{j}{n}\right)^k, \text{ em que } \omega_j^{(n)} = \frac{NC_j^{(n)}}{N}.$$

Resultando assim no sistema algébrico linear: $\sum_{j=0}^n \omega_j^{(n)} \cdot \left(\frac{j}{n}\right)^k = \frac{1}{k+1}$ para $k = 0, 1, \dots, n$, ou,

em forma matricial:
$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 1/n & 2/n & \dots & 1 \\ 0 & (1/n)^2 & (2/n)^2 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & (1/n)^n & (2/n)^n & \dots & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \omega_0^{(n)} \\ \omega_1^{(n)} \\ \omega_2^{(n)} \\ \vdots \\ \omega_n^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1/2 \\ 1/3 \\ \vdots \\ 1/(n+1) \end{bmatrix}.$$

Abaixo, o programa de determinação dos pesos e erros do método de Newton-Coates é reproduzido.

```

Newton_Cotes (n) := for k ∈ 0..n
                    b_k ← 1/(k+1)
                    for i ∈ 0..n
                      A_{k,i} ← (i/n)^k
                    W ← lsolve(A, b)

P_nodal(n, x) := p ← x
                 k ← 1
                 for i ∈ 1..n
                   k ← k + 1
                   p ← p/k * (x - i/n)
                 m ← floor(n/2)
                 if m + m = n
                   k ← k + 1
                   p ← p/k * (x - 1/2)
                 p

```

$$\text{Erro}(n) := \int_0^1 P_{\text{nodal}}(n, x) dx$$

$$n := 1 \quad \text{Newton_Cotes}(n)^T \rightarrow \left(\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2}\right) \quad \text{Erro}(n) = -0.083$$

$$n := 2 \quad \text{Newton_Cotes}(n)^T \rightarrow \left(\frac{1}{6} \quad \frac{2}{3} \quad \frac{1}{6}\right) \quad \text{Erro}(n) = -3.472 \times 10^{-4}$$

$$n := 3 \quad \text{Newton_Cotes}(n)^T \rightarrow \left(\frac{1}{8} \quad \frac{3}{8} \quad \frac{3}{8} \quad \frac{1}{8}\right) \quad \text{Erro}(n) = -1.543 \times 10^{-4}$$

$$n := 4 \quad \text{Newton_Cotes}(n)^T \rightarrow \left(\frac{7}{90} \quad \frac{16}{45} \quad \frac{2}{15} \quad \frac{16}{45} \quad \frac{7}{90}\right) \quad \text{Erro}(n) = -5.167 \times 10^{-7}$$

$$n := 5 \quad \text{Newton_Cotes}(n)^T \rightarrow \left(\frac{19}{288} \quad \frac{25}{96} \quad \frac{25}{144} \quad \frac{25}{144} \quad \frac{25}{96} \quad \frac{19}{288}\right) \quad \text{Erro}(n) = -2.91 \times 10^{-7}$$

$$n := 6 \quad \text{Newton_Cotes}(n)^T \rightarrow \left(\frac{41}{840} \quad \frac{9}{35} \quad \frac{9}{280} \quad \frac{34}{105} \quad \frac{9}{280} \quad \frac{9}{35} \quad \frac{41}{840}\right) \quad \text{Erro}(n) = -6.379 \times 10^{-10}$$

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

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

Da tabela:

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

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

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:

$$\text{Erro}_0 = \frac{1}{1!} \int_a^b f'[\xi(x)](x - x_0) dx = h^2 \int_{-1}^1 f'[\xi(x_0 + \alpha h)] \alpha d\alpha, \text{ mas como } \int_{-1}^1 \alpha d\alpha = 0 \text{ é necessário}$$

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**):

$$\text{Erro}_0 = \frac{1}{2!} \int_a^b f''[\xi(x)](x - x_0)(x - x_1) dx = \frac{h^3}{2} \int_{-1}^1 f''[\xi(x_0 + \alpha h)] \alpha(\alpha - 1) d\alpha = \frac{h^3 f''(\xi)}{2} \int_{-1}^1 \alpha(\alpha - 1) d\alpha$$

$$\text{Erro}_0 = \frac{h^3 f''(\xi)}{3} \cong 0,333 h^3 f''(\xi), \quad \text{com } \xi \in (a, b).$$

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:

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

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

Ilustração do método de Simpson recursivo

Cômputo de $\int_0^{1,2} f(x) \cdot dx$ 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 $m = 4$: $I = \frac{16 I_{N_2} - I_{N_1}}{15}$.

0.7 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:

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

em que $f(x) = w(x) \cdot g(x)$, 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.

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:

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

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

0.8 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 $k = 0, 1, \dots, 2 \cdot M$.

0.9 Integrais impróprias

Integrais impróprias são aquelas em que 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:

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

em que $p_n(x)$ 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: $Erro = -1,0122 \cdot 10^{-6}$.

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

Aplicando a mudança de variável $t = x^{-1}$: $I = -\int_{t=1}^0 t^{-1/2} \text{sen}(t) dt = \int_0^1 \frac{\text{sen}(t)}{\sqrt{t}} dt$, 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: $\text{Erro} = -7,8632 \cdot 10^{-7}$.

Lista de exercícios

1. Busque uma expressão de segundo grau e outra de terceiro grau que *melhor* aproximam a função x^4 no intervalo $2 \leq x \leq 8$. Analise e discuta seus resultados confrontando-os graficamente.
2. Aproxime a função e^x no intervalo: $0 \leq x \leq +2$ por um polinômio de menor grau em x , em que se assegura que o módulo do erro seja menor do que 10^{-2} .
3. *Hougen & Watson* sugerem a expressão empírica abaixo para o cálculo do calor específico molar do gás nitrogênio: $C_p = 6,3 + 1,82 \cdot 10^{-3} \cdot T - 0,345 \cdot 10^{-6} \cdot T^2$ em que: C_p : cal/gmol/K e T : Kelvin. Na faixa de 300 a 2100 K, o erro máximo do calor específico calculado por esta expressão é de 1,2 %.
 - a) determine a aproximação linear de C_p que minimiza o máximo do erro adicional na faixa de 1000 a 2000 K;
 - b) Calcule o erro percentual máximo da aproximação proposta em a).

4. A variação do coeficiente de expansão térmica do alumínio na faixa de 0 a 100° C é dada por:

$$k(T) = 0,22 \cdot 10^{-4} \cdot T + 0,009 \cdot 10^{-6} \cdot T^2 \quad \text{com } T : ^\circ\text{C}.$$

- a) aproxime $k(T)$ por uma constante, na mesma faixa de 0 a 100° C, de modo que o valor do erro máximo seja mínimo;

- b) Calcule o valor médio de $k(T)$ $\left[\bar{k} = \frac{1}{100} \int_0^{100} k(T) \cdot dT \right]$ e sua média aritmética (na mesma

faixa de temperatura) e compare e discuta todos estes valores sugerindo que valor é o mais adequado!

5. Nas Tabelas abaixo, apresentam-se os valores da condutividade térmica do CO₂ e da viscosidade do etileno glicol líquido a várias temperaturas:

T (°F)	k (BTU/hr/ft/°F)
32	0,0085
212	0,0133
392	0,0181
572	0,0228

T (°F)	μ (lb/ft/hr)
0	242,00
50	82,10
100	30,50
150	12,60
200	5,57

Determine, em cada caso, o polinômio interpolador de menor grau possível que assegure um erro relativo inferior a 1,00 % na faixa tabelada de T .

Observação: a dependência polinomial de μ com T é mais adequadamente expressa por $\ln(\mu)$.

6. A tabela abaixo mostra a dependência da pressão parcial do vapor de amônia com a temperatura a diferentes concentrações:

Concentração percentual molal da amônia

Temperatura (°F)	0	10	20	25	30	35
60	0,26	1,42	3,51	5,55	8,65	13,22
80	0,51	2,43	5,85	9,06	13,86	20,61
100	0,95	4,05	9,34	14,22	21,32	31,16
140	2,89	9,98	21,49	31,54	45,73	64,78
180	7,51	21,65	44,02	62,68	88,17	121,68
220	17,19	42,47	81,91	113,81	156,41	211,24
250	29,83	66,67	124,08	169,48	229,62	305,60

por interpolação linear nas duas variáveis independentes [temperatura e concentração] calcule as pressões parciais da amônia nos seguintes casos:

$T [^{\circ} \text{C}]$	126,5	126,5	126,5	60,0	237,5	237,5
Concentração Molal [%]	28,8	6,7	25,0	0,00	17,6	35,0

7. 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

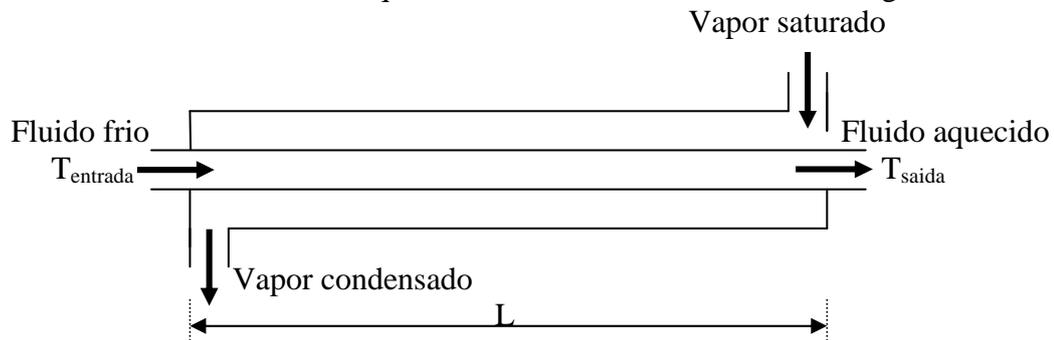
k : constante de Boltzmann $= 1,38054 \cdot 10^{-16}$ erg /K

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 em que: $\lambda_1 = 3933,666$ Angstrom e $\lambda_2 = 5895,923$ Angstrom às temperaturas de 2000 e 6000 K.

8. 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 abaixo:



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
$T_{\text{saída}}$ (°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 abaixo

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

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:

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