

## Capítulo 8

# Integração Numérica

### 8.1 Introdução <sup>1</sup>

Este capítulo trata de métodos numéricos para o cálculo de integrais definidas. O Cálculo nos ensina que, para se obter

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

basta achar uma primitiva, isto é, uma função  $F(x)$  tal que  $F'(x) = f(x)$ , de forma que

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a).$$

Uma função  $f$  é, em geral, dada por uma “fórmula”, que nada mais é do que a combinação finita, *via* somas, multiplicações, divisões e composições de funções elementares. As funções elementares são as usuais: potências de  $x$  (negativas e positivas), funções trigonométricas e suas inversas, logaritmos e exponenciais.

Entretanto, no mundo abstrato de todas as funções possíveis, essas funções formam apenas uma minúscula parte. Em outras palavras, a grande maioria das funções não tem uma fórmula que as represente, embora nas aplicações do mundo real os modelos frequentemente conduzam a funções descritas por meio de fórmulas.

Mesmo se nos restringirmos apenas às funções dadas por fórmulas, acabaremos por nos deparar com um fato matemático: *nem todas elas admitem uma primitiva que também seja escrita como combinação (finita) de funções elementares!*

É claro que existe o recurso de se escrever a primitiva  $F$  como uma combinação infinita de funções elementares, por exemplo através de uma série de potências

$$F(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k.$$

Isto é possível (em muitos casos de forma até razoavelmente fácil), mas com dois inconvenientes: primeiro, quando formos avaliar  $F(a)$  e  $F(b)$  através da série (ou da fórmula infinita) pode ser necessária uma quantidade tão grande de termos (ou operações) que inviabilize ou torne muito lento o cálculo. Além disso, nem sempre séries de potência convergem para todos os valores de  $x$ , o que exigiria uma análise criteriosa do alcance dessa convergência, em cada caso.

---

<sup>1</sup>Adaptado de Asano & Coli 2009

De outra parte, é preciso também dispor de instrumentos para estimar integrais a partir de dados experimentais. As aplicações mais óbvias se encontram no cálculo de comprimentos, áreas, volumes, massa, centro de massa, distância percorrida, tempo decorrido, etc. No que segue, discutiremos alguns exemplos onde a integração numérica se faz necessária, ora por se tratar de medida experimental ora porque não há primitiva elementar da função que se quer integrar.

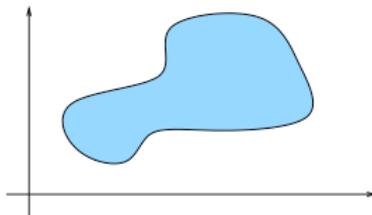
Neste capítulo estudaremos métodos para a integração numérica de funções conhecidas que não possuem primitivas convenientemente representáveis, ou de funções desconhecidas, das quais apenas um conjunto de pontos é conhecido.

Em linhas gerais, os métodos que utilizaremos baseiam-se em somar o valor do integrando para uma sequência de valores da abscissa dentro dos limites da integração. O objetivo é determinar a integral tão acuradamente quanto possível com o menor número de avaliações da função.

No que segue listamos alguns exemplos de problemas que só podem ser resolvidos usando-se um método numérico de de integração

### 8.1.1 Cálculo de áreas

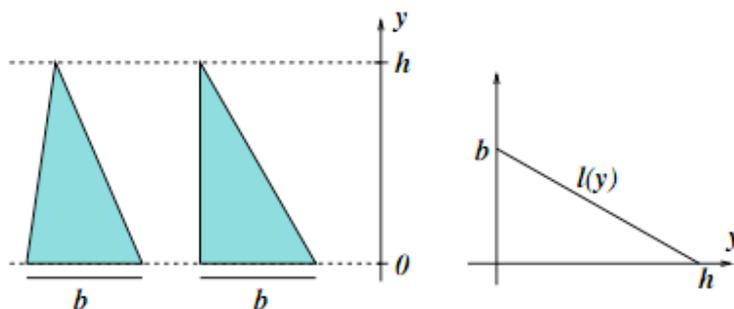
Gostaríamos de um método sistemático para estimar a área de figuras planas como a mostrada ao lado (poderia ser uma ilha, por exemplo). Para isso, vamos nos basear no Princípio de Cavalieri, que diz: *“dados dois conjuntos A e B, se houver uma linha L tal que toda perpendicular a L cruze A e B em intervalos de tamanhos iguais, então A e B têm a mesma área.”*



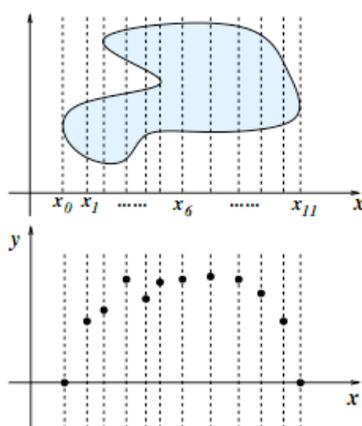
Por exemplo, os triângulos da figura abaixo (à esquerda) têm áreas iguais, pois cada reta  $R$  horizontal, à altura  $y$ , cruza os triângulos em segmentos de tamanho igual a  $l(y)$ . Para entender porque  $l(y)$  é igual para os dois triângulos, observe que em ambos  $l(y)$  varia como uma função afim (“linearmente”), em  $y = 0$  tem-se  $l(0) = b$  (os triângulos têm bases de igual tamanho) e em  $y = h$  tem-se  $l(h) = 0$  (os triângulos têm alturas iguais). Portanto a função  $l(y)$  tem o aspecto mostrado à direita, na figura.

Isso explica porque todos os triângulos com base e altura iguais têm a mesma área, que pode ser obtida de um deles, por exemplo o da direita. Essa área vale  $\frac{1}{2}bh$ , e o leitor pode observar que essa também é a área sob o gráfico de  $l(y)$  (observação que será importante logo adiante).

O Princípio de Cavalieri tem uma formulação análoga para volumes. Dois sólidos  $S$  e  $T$  terão mesmo volume se houver uma linha  $L$  tal que todo *plano* perpendicular a  $L$  cruze  $S$  e  $T$  em regiões de áreas iguais. Para o leitor que ainda não acreditou nesse princípio, imagine uma pilha de cartas com um arame passando no meio, e então incline e retorça o arame, de forma que a pilha fique desalinhada. As duas pilhas continuam tendo a mesma altura, a área de cada corte é a mesma, e o volume (que é a soma dos volumes “infinitesimais” das cartas) se mantém.



O que podemos fazer com uma figura plana em geral é criar uma segunda figura com a mesma área apoiada no eixo horizontal. Na prática, temos que fazer isso para um número discreto de cortes verticais: medimos o comprimento do corte e transferimos esse valor para a segunda figura. Assim, a segunda figura é um esboço do gráfico “Comprimento do corte vs. Posição do corte”, mais precisamente é a região compreendida entre esse gráfico e a linha horizontal. Quando o corte ocorrer em dois intervalos separados a altura do gráfico será igual à soma dos comprimentos das duas intersecções.



Ao final, teremos uma sequência de pontos  $x_0, x_1, \dots, x_n$ , que fornecem a posição de cada corte, e valores correspondentes  $y_0, y_1, \dots, y_n$ , que são os respectivos comprimentos de cada corte. Esses dados é que serão usados para se fazer a integração.

O curioso é que o mesmo tipo de “coleta de dados” será feito para a integração de uma função  $f(x)$  dada por uma fórmula. Se a integração se der no intervalo  $[a, b]$ , então deve-se dividir o intervalo por um partição

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$$

e tomar os valores da função nos extremos dos intervalos da partição:

$$y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), \dots, y_n = f(x_n)$$

(que podem até ser negativos). A partir desses dados, a maneira de se proceder será a mesma, tanto no caso 'experimental' como no caso 'teórico'. A única diferença é que no caso 'teórico' nós teremos, na maioria dos casos, uma maneira de delimitar o erro cometido na integração.

O volume de um lago ou de uma montanha também é passível de ser estimado usando esse tipo de dados. Pode-se fazer isso em duas etapas. Primeiramente, escolhe-se uma

direção ( $x$ , por exemplo) onde se posicionarão, perpendicularmente, as retas dos “cortes”. Para cada corte do lago, posicionado em  $x_i$ , estima-se sua área  $A(x_i)$ , usando dados  $(y_i, z_i)$ . Depois estima-se a integral da função “área do corte”, usando-se os dados  $(x_i, A(x_i))$ , que resulta no volume.

### 8.1.2 Comprimento de curvas e gráficos

Considere o seguinte problema: “calcular o comprimento do gráfico da função  $f$  entre  $a$  e  $b$ ”. Se a função  $f$  for diferenciável, esse problema remete a uma integral.

Para entender melhor, tentemos aproximar a curva por pequenos segmentos de reta e seu comprimento pela soma dos tamanhos desses segmentos. Como sempre dividimos o intervalo  $[a, b]$  com uma partição  $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$  e em cada intervalo  $[x_i, x_{i+1}]$  ( $i = 0, \dots, n-1$ ) aproximamos a função pelo segmento de reta que unes os pontos  $(x_i, f(x_i))$  e  $(x_{i+1}, f(x_{i+1}))$ . Pelo Teorema de Pitágoras, esse segmento tem tamanho igual a

$$\sqrt{(x_{i+1} - x_i)^2 + (f(x_{i+1}) - f(x_i))^2}$$

Para simplificar um pouco, podemos supor que todos os intervalos tenham o mesmo tamanho  $\Delta x$ . Além disso, aproximamos a diferença  $f(x_{i+1}) - f(x_i)$  por  $f'(x_i)\Delta x$ , de forma que somando para todos os segmentos obtemos, aproximadamente,

$$\sum_{i=0}^{n-1} \Delta x \sqrt{1 + f'(x_i)^2}$$

Fazendo  $\Delta x$  ir a zero estaremos, por um lado, fazendo com que a soma dos comprimentos dos segmentos esteja cada vez mais próxima do comprimento verdadeiro da curva e, por outro lado, fazendo com que a aproximação pela derivada seja cada vez mais fidedigna. No limite, teremos um número que é ao mesmo tempo o comprimento da curva e também a integral

$$\int_a^b \sqrt{1 + f'(x)^2} dx$$

O gráfico de  $f$  entre  $a$  e  $b$  é um caso particular de curva no plano. Cada ponto dessa curva pode ser obtido tomando-se  $t$  no intervalo  $[a, b]$  e então o ponto  $(t, f(t))$ . Podemos imaginar esse processo como uma função com domínio  $[a, b]$  e contradomínio  $R^2$ , que leva  $t$  em  $(t, f(t))$ .

## 8.2 Fórmulas clássicas para abcissas igualmente espaçadas

Alguns dos métodos que usaremos abaixo originam-se das chamadas *fórmulas clássicas de quadratura* (quadratura é sinônimo de cálculo de uma integral). Essas fórmulas procuravam aproximar integral a partir de alguns poucos pontos do integrando (muito úteis se as contas são feitas todas com lápis e papel!). Hoje boa parte destas fórmulas são peças de museu, e têm pouca utilidade prática. Exceções são a regra do trapézio e a regra de Simpson.

### 8.2.1 Regra do trapézio

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = h \left[ \frac{1}{2} f(x_0) + \frac{1}{2} f(x_1) \right] - \frac{h^3}{12} f''(\xi), \quad (8.1)$$

onde  $h = x_1 - x_0$  e  $\xi$  é um número no intervalo  $[x_0, x_1]$ . O termo à direita permite estimar o erro cometido na estimativa da integral. Como não se sabe o  $\xi$  para o qual se deve avaliar a segunda derivada, o termo é na verdade desconhecido e por esse motivo é frequentemente escrito como

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = h \left[ \frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_1) \right] + \mathcal{O}(h^3 f''), \quad (8.2)$$

onde o símbolo  $\mathcal{O}$  — *ordem* — é comumente empregado em matemática para se referir à ordem de grandeza de um termo em uma equação.

A figura abaixo ilustra a regra do trapézio. Sendo uma fórmula com dois pontos, ela é exata para polinômios de ordem 1. Pelo termo do erro na Eq. (8.1) vemos que se a função tem uma concavidade para cima (o que significa que  $f'' > 0$  no intervalo de integração), então o erro tem um valor negativo e a regra do trapézio superestima a integral.

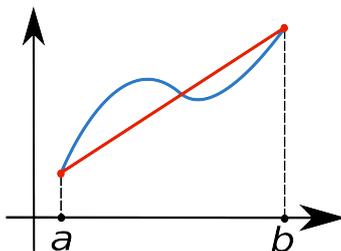


Figura 8.1: Regra do trapézio (fonte [a]).

### Estimativa do erro da regra do trapézio

Avaliaremos agora o cálculo do erro da regra do trapézio. Pelo Teorema Fundamental do Cálculo, existe uma função  $F$  tal que  $F'(x) = f(x)$ . Seja  $I$  o valor correto da integral de  $f(x)$  em  $[x_0, x_1]$  e  $T$  o valor da estimativa pela regra do trapézio. O erro na Regra do Trapézio será dado por

$$I - T = \int_{x_0}^{x_1} F'(x)dx - \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] \quad (8.3)$$

$$= F(x_1) - F(x_0) - \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] \quad (8.4)$$

$$= F(x_0 + h) - F(x_0) - \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_0 + h)]. \quad (8.5)$$

Vamos usar a expansão em séries de Taylor

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \dots$$

para expandir o primeiro e o último termo da Eq. (8.5). Obtemos

$$F(x_0 + h) = F(x_0) + hf(x_0) + \frac{h^2}{2}f'(x_0) + \frac{h^3}{6}f''(x_0) + \dots$$

e

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \dots$$

Substituindo as duas expressões acima em Eq. (8.5) obtemos

$$I - T = -\frac{h^3}{12}f''(x_0) + \mathcal{O}(h^4). \quad (8.6)$$

Obtemos assim o termo da Eq. (8.1).

### 8.2.2 Regra de Simpson

A regra de Simpson usa três pontos do intervalo  $[x_0, x_2]$  separados por uma distância  $h$ :

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = h \left[ \frac{1}{3}f(x_0) + \frac{4}{3}f(x_1) + \frac{1}{3}f(x_2) \right] + \mathcal{O}(h^5 f^{(4)}), \quad (8.7)$$

onde  $f^{(4)}$  é a quarta derivada da função  $f$  calculada em um ponto desconhecido do intervalo. Apesar de ser uma fórmula com 3 pontos, que deveria em princípio ser exata para polinômios de ordem 2, a regra de Simpson é exata para qualquer polinômio de ordem 3 (ou menos). Isso é fácil de ser verificado pelo termo do erro, que depende da quarta derivada da função: a quarta derivada de um polinômio de ordem 3 ou menos é zero.

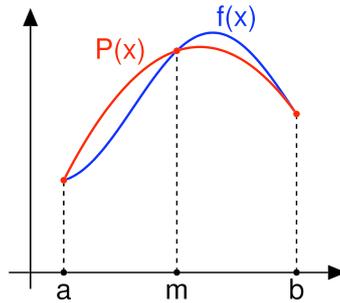


Figura 8.2: Regra de Simpson (fonte [a]).

A Regra de Simpson é fácil de ser derivada, apesar de ser um pouco trabalhosa algebricamente. Matematicamente, ela se origina do *ajuste* da função  $f(x)$  por um polinômio de ordem 2 ( $P(x)$  na Figura 8.2).

Para se obter a fórmula de Simpson, pode-se usar a fórmula de Lagrange para interpolação polinomial (ver Capítulo 6).

#### Derivação do erro da regra de Simpson

É possível mostrar, usando-se o mesmo procedimento usado acima para a regra do trapézio, que o erro de uma integral  $I$  estimada pelo método de Simpson,  $S$ , será dado por.

$$I - S = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(x_0) + \dots \quad (8.8)$$

Vamos demonstrar a expressão acima. Sabendo que  $F'(x) = f(x)$ :

$$\begin{aligned} I - S &= \int_a^b F'(x)dx - \frac{1}{3}h[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] \\ &= F(x_2) - F(x_0) - \frac{1}{3}h[f(x_0) + 4f(x_0 + h) + f(x_0 + 2h)] \\ &= F(x_0) + 2hf(x_0) + \frac{(2h)^2}{2}f'(x_0) + \frac{(2h)^3}{3!}f''(x_0) + \frac{(2h)^4}{4!}f'''(x_0) + \frac{(2h)^5}{5!}f^{(4)}(x_0) + \dots \\ &\quad - F(x_0) - \frac{h}{3}f(x_0) - \frac{4}{3}h[f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{3!}f'''(x_0) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x_0) + \dots] \\ &\quad - \frac{1}{3}h[f(x_0) + 2hf'(x_0) + \frac{(2h)^2}{2}f''(x_0) + \frac{(2h)^3}{3!}f'''(x_0) + \frac{(2h)^4}{4!}f^{(4)}(x_0) + \dots] \end{aligned}$$

Na expressão acima, os termos com  $f(x_0)$ ,  $f'(x_0)$ ,  $f''(x_0)$ , e  $f'''(x_0)$  se anulam, restando apenas termos que dependem de  $f^{(4)}$

$$I - S = \left[ \frac{(2h)^5}{5!} - \left( \frac{4h^5}{3 \cdot 4!} + \frac{16h^5}{3 \cdot 4!} \right) \right] f^{(4)}(x_0) + \dots = -\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(x_0) + \dots$$

Portanto, concluímos que o erro cometido pelo método de Simpson é  $\mathcal{O}(h^5)$ .

### 8.3 Métodos Numéricos de Integração

Queremos resolver o seguinte problema: dada uma função  $f: [a, b] \rightarrow R$ , achar a integral de  $f$  nesse intervalo, denotada por

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

#### 8.3.1 Integração por retângulos

A forma mais simples de estimarmos a integral de uma função  $f(x)$  no intervalo  $[x_0, x_n]$  é aproximarmos a integral por uma soma de retângulos. Vamos dividir o intervalo  $[x_0, x_n]$  em  $n$  intervalos iguais. Seja  $h = (x_n - x_0)/n$  o tamanho dos subintervalos. Temos

$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

A integral será dada por

$$I = \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i). \quad (8.9)$$

Essa expressão pode facilmente ser generalizada para um conjunto de  $n$  pontos não igualmente espaçados. Neste caso.

$$I = \sum_{i=0}^{n-1} h_i f(x_i), \quad (8.10)$$

onde  $h_i = x_i - x_{i-1}$ .

Note que a fórmula das Eqs. (8.9) e (8.10) é uma fórmula *semi-aberta*, ou seja, para computar a integral no intervalo  $[x_0, x_n]$  não foi usado o valor de  $f(x_n)$ . A maioria dos demais métodos que veremos abaixo usam fórmulas fechadas, em que são usados os valores da função nos extremos do intervalo. Existem também métodos que usam *fórmulas abertas* em que não se usam nenhum dos extremos de integração.

Fórmulas abertas ou semi-abertas têm uma propriedade importante: elas permitem calcular a integral no caso em que a função é mal-comportada em um ou ambos os intervalos de integração (por exemplo, no caso em que  $f$  vai para algum tipo de singularidade em um dos extremos).

Vamos estimar o erro que cometemos ao aproximar a integral por apenas um retângulo. Como antes, seja  $I_i$  o valor da integral no intervalo  $[x_i, x_{i+1}]$  e  $R_i$  o valor da aproximação por um retângulo. Vamos expandir a função em série de Taylor em torno do ponto  $x_i$ ,

$$f(x) = f(x_i) + (x - x_i)f'(x_i) + \dots,$$

e efetuar a integral explicitamente

$$I_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \quad (8.11)$$

$$= \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x_i) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i) f'(x_i) dx + \dots \quad (8.12)$$

$$= R_i + \frac{1}{2} f'(x_i) (x - x_i)^2 \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} + \dots \quad (8.13)$$

$$= R_i + \frac{1}{2} h^2 f'(x_i) + \dots \quad (8.14)$$

Assim, o erro na integral por um retângulo é

$$I_i - R_i \approx \mathcal{O}(h^2).$$

Vamos agora estimar o erro para uma integral efetuada pela soma de  $n$  retângulos. Nesse caso o erro total será aproximadamente a soma dos erros cometidos em cada subintervalo, ou seja

$$I - R \approx \sum_{i=0}^{n-1} \mathcal{O}(h^2) = \mathcal{O}(nh^2).$$

Como  $h = (x_n - x_0)/n$ , temos que o erro total será

$$I - R \approx \sum_{i=0}^{n-1} \mathcal{O} \left[ \frac{(x_n - x_0)^2}{n} \right].$$

Ou seja, o erro cai de forma linear à medida que aumentamos o número  $n$  de intervalos, e tende a 0 quando  $n \rightarrow \infty$ .

Um método de integração é dito de ordem  $m$  se o erro cai com o aumento do número de subintervalos como

$$\mathcal{O} \left( \frac{1}{n^m} \right).$$

O método dos retângulos é o de mais baixa ordem. A origem da ineficiência do método está no uso de retângulos para aproximar a função. Nos métodos que veremos adiante usaremos aproximações cada vez melhores para  $f(x)$ , o que resultará em métodos de ordem maior.

A vantagem do método dos retângulos está na grande facilidade em implementá-lo. Por exemplo, no código abaixo, `h` é o tamanho dos subintervalos e `func` é um array que armazena os valores da função  $f(x)$  para os  $n - 1$  valores da abscissa. Neste caso, a integral é calculada com apenas uma linha de código:

```
REAL, DIMENSION(N-1) :: func
REAL :: h, integral
...
integral = h*SUM(func)
...
```

No caso de abcissas não igualmente espaçadas, armazenamos os valores dos subintervalos em um array (digamos `harray`). Neste caso, a integral seria

```

REAL, DIMENSION(N-1) :: func, harray
REAL :: integral
...
integral = SUM(harray*func)
...

```

### 8.3.2 Regra do ponto médio

Este método corresponde a uma melhoria simples e eficiente do método dos retângulos. Consideremos um subintervalo  $[x_i, x_{i+1}]$  e seu ponto médio

$$\bar{x}_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}.$$

Neste caso, a integral da função  $f(x)$  neste subintervalo pode ser aproximada por

$$M_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = h_i f(\bar{x}_i),$$

e a integral no intervalo  $[x_0, x_n]$  será simplesmente

$$I \approx M = \sum_{i=1}^n M_i = \sum_{i=1}^n h_i f(\bar{x}_i). \quad (8.15)$$

Para avaliarmos o erro da regra do ponto médio vamos novamente considerar o erro cometido quando aproximamos a integral entre  $[x_i, x_{i+1}]$  com apenas um retângulo. Vamos expandir  $f(x)$  em série de Taylor em torno do ponto médio  $\bar{x}_i$

$$f(x) = f(\bar{x}_i) + (x - \bar{x}_i)f'(\bar{x}_i) + \frac{1}{2}(x - \bar{x}_i)^2 f''(\bar{x}_i) + \frac{1}{3!}(x - \bar{x}_i)^3 + \dots$$

Integrando a expressão acima entre  $[x_i, x_{i+1}]$  obtemos

$$\begin{aligned} I_i &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \\ &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(\bar{x}_i) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - \bar{x}_i) f'(\bar{x}_i) dx + \frac{1}{2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - \bar{x}_i)^2 f''(\bar{x}_i) dx + \\ &\quad \frac{1}{3!} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - \bar{x}_i)^3 f'''(\bar{x}_i) dx + \dots \end{aligned}$$

Note que

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - \bar{x}_i)^p dx = \begin{cases} h_i & \text{se } p = 0 \\ 0 & \text{se } p = 1 \\ h_i^3/12 & \text{se } p = 2 \\ 0 & \text{se } p = 3 \end{cases}$$

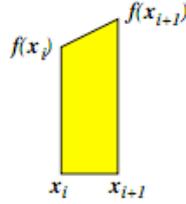
de forma que  $I_i$  reduz-se à

$$I_i = M_i + \frac{1}{24} h_i^3 f''(\bar{x}_i) + \dots$$

Vemos, assim, que o erro de  $I_i$  é  $\mathcal{O}(h^3)$ . Considerando-se a integral feita em  $n$  intervalos de tamanho  $h$ , concluímos que o método do ponto médio é de ordem 2.

Note que a regra do ponto médio é uma fórmula aberta, pois não se usam os valores da função nos extremos do intervalo.

### 8.3.3 O método dos trapézios



Vamos estender a regra dos trapézios (Eq. 8.1) para avaliarmos a integral de uma função calculada em  $n + 1$  pontos dentro do intervalo  $[x_0, x_n]$ . Inicialmente aplicamos a regra do trapézio ao subintervalo  $i$

$$T_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] - \frac{h^3}{12} f''(\xi),$$

e em seguida somamos para todos os subintervalos

$$I \approx T = \sum_{i=1}^n T_i = h \left[ \frac{1}{2} f(x_0) + f(x_1) + \dots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2} f(x_n) \right] + \mathcal{O} \left( \frac{(x_n - x_0)^3}{12n^2} f''(\xi) \right),$$

ou, em uma forma mais compacta

$$I = h \left[ \frac{1}{2} f(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{1}{2} f(x_n) \right] + \mathcal{O} \left( \frac{1}{n^2} \right).$$

Vemos que a regra do trapézio estendida tem a mesma ordem que o método do ponto médio.

**Exemplo:** Calcular a integral

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx$$

usando o Método do Trapézio tomando  $n = 2, 4, 8, 16$ . o valor da integral é 0.746824133, com precisão até 9 decimais.

Para  $n = 2, h = 0.5$ :

$$\int_0^1 f(x)dx = \frac{0.5}{2} [f(0) + 2f(0.5) + f(1)] = 0.7313702$$

Para  $n = 4, h = 0.25$ :

$$\int_0^1 f(x)dx = \frac{0.25}{2} [f(0) + 2f(0.25) + 2f(0.5) + 2f(0.75) + f(1)] = 0.7429840$$

Para  $n = 8, h = 0.125$ :

$$\int_0^1 f(x)dx = \frac{0.125}{2} [f(0) + 2f(0.125) + 2 \dots + f(1)] = 0.7458655$$

Para  $n = 16, h = 0.0625$ :

$$\int_0^1 f(x)dx = \frac{0.0625}{2} [f(0) + 2f(0.0625) + 2 \dots + f(1)] = 0.7465846$$

### 8.3.4 O método de Simpson

Como no caso dos trapézios, é muito simples estender a regra de Simpson para o caso de um intervalo subdividido em  $n$  subintervalos. Aplicamos a regra de Simpson ao par de subintervalos  $i$  e  $i + 1$  (note que a regra de Simpson usa três pontos)

$$S_i = \int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx = \frac{h}{3} [f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})] + \mathcal{O}(h^5 f^{(4)}),$$

e em seguida somamos para todos os subintervalos, obtendo

$$\begin{aligned} S &= \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) + f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4) + \dots \\ &\quad + f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)] + \mathcal{O}\left[\frac{(x_n - x_0)^5}{n^4}\right] \\ &= \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \dots \\ &\quad + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)] + \mathcal{O}\left[\frac{(x_n - x_0)^5}{n^4}\right]. \end{aligned}$$

Note que esta regra requer que  $n$  seja par. Em uma notação mais compacta, a regra de Simpson estendida fica

$$S = \frac{h}{3} \left[ f(x_1) + f(x_n) + 4 \sum_{j=1}^{n/2} f(x_{2j-1}) + 2 \sum_{j=1}^{n/2-1} f(x_{2j}) \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^4}\right). \quad (8.16)$$

A Eq. (8.16) mostra uma importantíssima propriedade da regra de Simpson: sendo um método de ordem 4, a precisão de integral aumenta com a *quarta potência de  $n$* !

**Exemplo:** calcular a integral

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx$$

usando o método de Simpson, para  $n = 2$  e  $n = 4$ .

Para  $n = 2, h = 0.5$ :

$$\int_0^1 f(x)dx = \frac{h}{3} [f_0 + 4f_1 + f_2] = \frac{h}{3} [f(0) + 4f(0.5) + f(1)] = 0.747180$$

$N = 4, h = 0.5$ :

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(x)dx &\approx \frac{h}{3} [f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + f_4] \\ &\approx \frac{h}{3} [f(0) + 4f(0.25) + 2f(0.5) + 4f(0.75) + f(1)] = 0.746855 \end{aligned}$$

### 8.3.5 Fórmulas de Newton-Cotes

Os métodos do trapézio e de Simpson são dois casos de uma série de fórmulas de integração chamados de Métodos de **Newton-Cotes**. Usando o método do trapézio aproximamos segmentos de curva  $f(x)$  por linhas retas que então definem trapezoides; no Método de Simpson aproximamos a função  $f(x)$  por parábolas. Para melhores aproximações podemos usar curvas cúbicas, quárticas e assim por diante e todos esses são Newton-Cotes.

- Trapézio → dois pontos, 1 intervalo, reta
- Simpson → três pontos, 2 intervalos, parábola, número ímpar de pontos.
- Aprox. cúbica → quatro pontos, 3 intervalos, cúbica (Simpson 3/8), número de pontos  $3n + 1$ : 4,7,10...

$$S_{3/8} = \frac{3}{8}h[f_1 + 3f_2 + 3f_3 + f_4]$$

Até aqui só apresentamos as fórmulas fechadas de Newton-Cotes (“*closed Newton-Cotes formulas*”) adequadas aos casos onde a função seja bem definida nas extremidades de  $[a, b]$ . Para os casos em que a função  $f(x)$  não é bem definida em  $x_0$  e/ou  $x_n$  (e.g. divergência  $\pm\infty$ ) existem outras fórmulas chamadas abertas (“*open Newton-Cotes formulas*”). Mais detalhes e as expressões destas fórmulas veja em *Numerical Recipes*.

### 8.3.6 Método de Romberg

Este método também é conhecido por “*Romberg Integration*” ou “*Romberg Extrapolation*”. Até aqui, vimos que o erro total para trapézios é da ordem de  $\mathcal{O}(h^2)$  (lembre-se que a ordem do erro cai em uma unidade quando consideramos o erro advindo de se aproximar a integral por uma soma de trapézios). Um exame mais detalhado, considerando os termos de ordem superior da série de Taylor, fornece

$$I - T(h) = Ah^2 + Bh^4 + \dots \quad (8.17)$$

Vamos comparar esse resultado com o obtido na iteração anterior

$$I - T(2h) = A(2h)^2 + B(2h)^4 + \dots \quad (8.18)$$

Multiplicando a Eq. (8.17) por 4 e subtraindo a Eq. (8.18), obtemos

$$\begin{aligned} 4I - 4T(h) &= 4Ah^2 + 4Bh^4 + \dots \\ -I + T(2h) &= -A(2h)^2 - 16Bh^4 + \dots \end{aligned}$$

---


$$\begin{aligned} 3I - [4T(h) - T(2h)] &= -12Bh^4 + \dots \\ I - \underbrace{[4T(h) - T(2h)]/3}_{\equiv S(h)} &= -12Bh^4 + \dots \end{aligned}$$

Esta aproximação

$$S(h) = \frac{4T(h) - T(2h)}{3} = T(h) + \frac{T(h) - T(2h)}{3}, \quad (8.19)$$

difere do valor exato da integral por um termo  $\mathcal{O}(h^4)$ , enquanto  $T(h)$  e  $T(2h)$  diferem por um termo  $\mathcal{O}(h^2)$ . Desta forma, a combinação de estimativas consecutivas da integral pelo método dos trapézios vai *cancelar os termos de ordem inferior do erro!* A ordem do termo remanescente  $[\mathcal{O}(h^4)]$  é a mesma que para a regra de Simpson estendida (Eq. 8.16). Na verdade, pode-se mostrar que Eq. (8.19) é *exatamente* a regra de Simpson estendida. Usar a Eq. (8.19) é a forma mais conveniente de se avaliar a regra de Simpson, usando-se, para isso, uma subrotina capaz de calcular, de forma geral, as sucessivas aproximações de uma integral pela regra do trapézio (ver exercício de programação 2).

Claramente, o processo empregado para obter a Eq. (8.19) pode ser repetido. Partimos de duas estimativas sequenciais para a integral

$$I - S(h) = -4Bh^4 + Ch^6 \quad (8.20)$$

e

$$I - S(2h) = -4B(2h)^4 + C(2h)^6. \quad (8.21)$$

Fazendo 16 vezes a Eq. (8.20) menos a Eq. (8.21):

$$\begin{aligned} 16I - 16S(h) &= -4B16h^4 + 16Ch^6 + \dots \\ -I - S(2h) &= 4B(2h)^4 - C(2h)^6 + \dots \\ \hline 15I - [16S(h) - S(2h)] &= -48Ch^6 + \dots \\ I - \underbrace{[16S(h) - S(2h)]/15}_{\equiv R_2(h)} &= -(48/15)Ch^6 + \dots \end{aligned}$$

Obtemos, assim, uma estimativa da função que difere do valor exato por um termo  $\mathcal{O}(h^6)$

$$R_2(h) = \frac{16S(h) - S(2h)}{15} = S(h) + \frac{S(h) - S(2h)}{15}. \quad (8.22)$$

Ou seja, este procedimento remove os erros de ordem até  $\mathcal{O}(h^4)$ .

É possível estender-se o método de Romberg para ordens superiores. De forma geral  $R_n$  é dado pela relação de recorrência

$$R_k(h) = R_{k-1}(h) + \frac{R_{k-1}(h) - R_{k-1}(2h)}{2^{2k} - 1}, \quad (8.23)$$

que é a fórmula de Romberg com erro proporcional a  $h^{2(k+1)+1}$  ou  $1/n^{2(k+1)}$ . O caso anterior [Eq. (8.19)] é justamente a fórmula de Romberg para  $k = 1$ .

**Exemplo:** calcular

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx$$

usando o método dos trapézios e o método de Romberg.

$h$	$T(h)$	$ \epsilon $	$R_1(h)$	$ \epsilon $	$R_2(h)$	$ \epsilon $
1	0.68393972	0.06				
0,5	0.73137025	0.01	0.74718043	0.0004		
0,25	0.74298410	0.004	0.74685538	$3 \times 10^{-5}$	0.74683371	$1 \times 10^{-5}$
0,125	0.74586561	0.001	0.74682612	$2 \times 10^{-6}$	0.74682417	$4 \times 10^{-8}$

Tabela 8.1: Estimativa da integral  $\int_0^1 e^{-x^2} dx$  usando o método do trapézio,  $T$ , e as relações de recorrência Eq. (8.19),  $R_1$ , e Eq. (8.22),  $R_2$ . Note que o  $|\epsilon|$  mostrado corresponde ao erro real cometido, ou seja, à diferença entre a estimativa e o valor exato da integral.

Vemos que o segundo valor de  $R_2$ , no qual foram utilizados 9 pontos do integrando, é preciso já para a 8ª casa decimal! Compare esta precisão com o valor obtido pelo método

do trapézio, que é preciso apenas até a 3ª casa decimal, apesar de usar as mesmas 9 avaliações da função.

Esse método de eliminar o termo dominante do erro é devido à Richardson (1927) e é frequentemente usado para melhorar a precisão ou taxa que o método converge. Depende de se conhecer a forma do erro, mas, mais importante, de que exista uma expansão do erro em termos de  $h$ . A expressão  $I - T(h) = Ah^2 + Bh^4 + \dots$  nem sempre é válida. Por exemplo na integral

$$\int_0^1 \sqrt{x} \log x dx,$$

o integrando não tem uma derivada finita em  $x = 0$  e é possível mostrar que

$$I - T(h) = Ah^{3/2} \log h + Bh^{3/2} + Ch^2 + Dh^4 + \dots$$

**Exercício:** usando valores de  $h = 1, 1/2, 1/4, 1/8$ , calcule um valor acurado para  $I$  eliminando os termos principais na expressão acima.

## 8.4 Quadratura de Gauss

As fórmulas de integração desenvolvidas anteriormente (e.g. Newton-Cotes) são do tipo

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i),$$

com  $n + 1$  valores de  $w_i$  (peso ou “weight”) e  $n + 1$  valores  $f(x_i)$ .

Assim, se  $x_i$  forem igualmente espaçados, temos  $n + 1$  parâmetros a serem determinados ( $w_i$ ). Se  $x_i$  não são determinados a priori, temos  $2n + 2$  parâmetros indeterminados. Isso quer dizer que temos duas vezes o número de graus de liberdade à nossa disposição para encontrar métodos de ordem mais elevada.

A Quadratura de Gauss também tem a forma descrita acima (ou seja, somatória de um conjunto de valores da função no intervalo, multiplicados por um peso) mas os pontos não são equidistantes, mas escolhidos *de forma que a soma ponderada forneça exatamente a integral se  $f(x)$  é um polinômio de grau  $2n + 1$  ou menos*. Antes de iniciar o desenvolvimento de Gauss, vamos estudar os polinômios ortogonais de Legendre.

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$$

Tal que

$$P_n(x) = \frac{2n-1}{n} x P_{n-1}(x) - \frac{n-1}{n} P_{n-2}(x),$$

que tem propriedades de ortogonalidade

$$\int_{-1}^{+1} P_n(x)P_m(x)dx = 0, \quad n \neq m,$$

$$\int_{-1}^{+1} [P_n(x)]^2 dx = C(n) \neq 0,$$

onde  $C$  é uma constante que depende de  $n$ .

Um polinômio de ordem arbitrária

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i,$$

pode ser representado como combinação linear dos polinômios ortogonais.

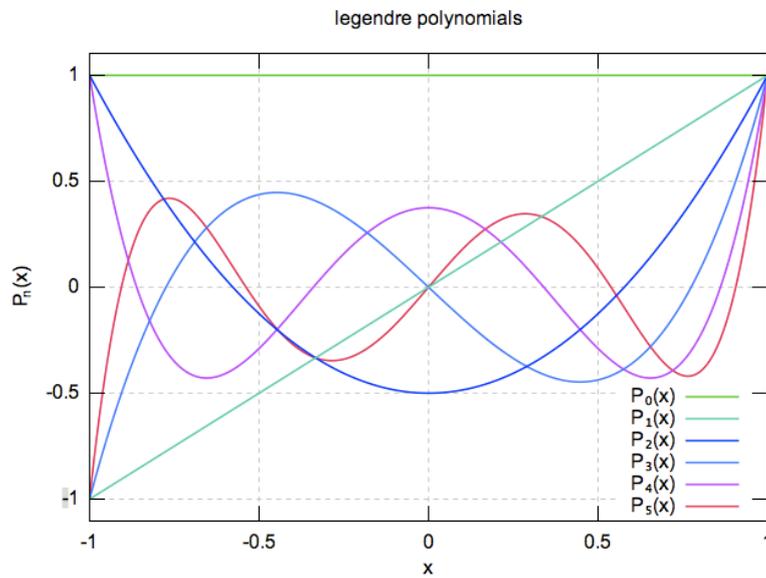


Figura 8.3: Polinômios de Legendre (fonte [a]).

**Exemplo:** vamos expandir um polinômio de quarta ordem  $p_4(x)$  em termos de um polinômio de Legendre.

$$\begin{aligned} p_4(x) &= a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 \\ &= b_0P_0(x) + b_1P_1(x) + b_2P_2(x) + b_3P_3(x) + b_4P_4(x) \\ &= b_0 \cdot 1 + b_1x + b_2 \left( \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} \right) + b_3 \left( \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x \right) + b_4 \left( \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8} \right) \end{aligned}$$

Igualando os termos de mesma potência

$$\begin{aligned} b_4 &= \frac{8}{35}a_4 \\ b_3 &= \frac{2}{5}a_3 \\ b_2 &= \frac{2}{3}\left(a_2 + \frac{15}{4}b_4\right) = \frac{2}{3}\left(a_2 + \frac{6}{7}a_4\right) \\ b_1 &= a_1 + \frac{3}{2}b_3 = a_1 + \frac{3}{5}a_3 \\ b_0 &= a_0 + \frac{1}{2}b_2 - \frac{3}{8}b_4 = a_0 + \frac{1}{3}a_3 - \frac{1}{5}a_4. \end{aligned}$$

**Exercício:** mostre que  $p_4(x) = x^4 + 3x^3 - 2x^2 + 2x - 1$  é equivalente a

$$p_4(x) = -\frac{22}{15}P_0(x) + \frac{19}{5}P_1(x) - \frac{16}{21}P_2(x) + \frac{6}{5}P_3(x) + \frac{8}{35}P_4(x),$$

### 8.4.1 Quadratura de Gauss-Legendre

A integral

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

pode ser colocada na forma

$$\int_{-1}^1 f(z)dz,$$

através de uma mudança de variável

$$z = \frac{2x - (a + b)}{b - a}, \quad -1 \leq z \leq 1.$$

Sem perda de generalidade, vamos estudar as integrais do tipo

$$\int_{-1}^1 f(x)dx.$$

Como anteriormente (Capítulo 6), vamos aproximar  $f(x)$  por um polinômio interpolante e integrar como se segue

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \int_{-1}^1 P_n(x)dx + \int_{-1}^1 R_n(x)dx$$

onde  $R_n(x)$  é o erro do polinômio interpolante.

Como os pontos  $x_i$  ainda não foram determinados podemos escrever o polinômio interpolante na forma de Lagrange

$$\begin{aligned} f(x) &= P_n(x) + R_n(x) \\ &= \sum_{i=0}^n L_i(x)f(x_i) + \underbrace{\left[ \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right]}_{\text{erro do polinômio interpolante}} \frac{f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!} \end{aligned}$$

com  $x \neq x_i$ , onde

$$L_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \left( \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right).$$

Se  $f(x)$  for assumido um polinômio de grau  $2n + 1$  então o termo  $\frac{f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!}$  dever ser um polinômio de grau  $n$ . Definimos

$$q_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!}, x \leq x_i,$$

de forma que

$$f(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x) f(x_i) + \left[ \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right] q_n(x).$$

Integrando temos

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 f(x) dx &= \int_{-1}^1 \sum_{i=0}^n L_i(x) f(x_i) dx + \int_{-1}^1 \left[ \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right] q_n(x) dx \\ &= \sum_{i=0}^n \underbrace{\left[ \int_{-1}^1 L_i(x) dx \right]}_{\equiv w_i} f(x_i) + \int_{-1}^1 \left[ \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right] q_n(x) dx \\ &= \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) + \underbrace{\int_{-1}^1 \left[ \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right] q_n(x) dx}_{\text{erro}}, \end{aligned}$$

onde

$$w_i = \int_{-1}^1 L_i(x) dx = \int_{-1}^1 \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx, i \neq j. \quad (8.24)$$

O objetivo agora é selecionar  $x_i$  de forma que o termo do erro desapareça!

Vamos expandir  $q_n(x)$  e  $\prod_{i=0}^n (x - x_i)$  em termos dos polinômios de Legendre.

$$\begin{aligned} \prod_{i=0}^n (x - x_i) &= b_0 P_0(x) + b_1 P_1(x) + \dots + b_{n+1} P_{n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n+1} b_i P_i(x) \\ q_n(x) &= c_0 P_0(x) + c_1 P_1(x) + \dots + c_n P_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i P_i(x). \end{aligned}$$

Efetuando o produto e integrando

$$\int_{-1}^1 q_n(x) \prod_{i=0}^n (x - x_i) dx = \int_{-1}^1 \left[ \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n b_i c_j P_i(x) P_j(x) + b_{n+1} \sum_{i=0}^n c_i P_i(x) P_{n+1}(x) \right] dx.$$

No primeiro termo do integrando, todos os termos  $i \neq j$  deverão desaparecer devido à ortogonalidade. Já a integral do segundo termo é zero pois  $i \neq n + 1$ . Dessa forma

$$\int_{-1}^1 q_n(x) \prod_{i=0}^n (x - x_i) dx = \int_{-1}^1 \sum_{i=0}^n b_i c_i [P_i(x)]^2 dx$$

Uma maneira de fazer esta expressão ser zero é que todos os  $b_i$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$  sejam zero. Mas para tanto, olhando para a expressão  $\prod_{i=0}^n (x - x_i)$  em polinômios de Legendre devermos ter

$$\prod_{i=0}^n (x - x_i) = b_{n+1} P_{n+1}(x). \quad (8.25)$$

Mas, para que isto ocorra,  $x_i$  devem ser as raízes do polinômio  $P_{n+1}(x)$ .

Chegamos, assim ao que buscávamos. Para uma dada ordem  $n$  da quadratura de Gauss-Legendre, temos que

1. calcular a função em  $n + 1$  pontos dados pela raiz de  $P_{n+1}(x)$  (Eq. 8.25);
2. calcular os pesos de cada  $n + 1$  termo usando Eq. (8.24).

### Raízes de $P_{n+1}(x)$ e pesos $w_i$

ordem	Raízes	Pesos
$n = 0$ (1 ponto)	0	2
$n = 1$ (2 pontos)	$\pm\sqrt{\frac{1}{3}}$	1
$n = 2$ (3 pontos)	0 $\pm\sqrt{\frac{3}{5}}$	8/9 5/9
$n = 3$ (4 pontos)	$\pm\sqrt{(3 - 2\sqrt{6/5})/7}$ $\pm\sqrt{(3 + 2\sqrt{6/5})/7}$	$\frac{18+\sqrt{30}}{36}$ $\frac{18-\sqrt{30}}{36}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Existe uma rotina no *Numerical Recipes* (`gauleg.f`) que calcula as raízes  $x_i$  e os pesos  $w_i$  para um dado  $n$ .

**Exemplo:** calcule

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$$

usando quadratura de Gauss-Legendre com três pontos. Inicialmente devemos fazer uma mudança de variáveis, de forma que a integral esteja entre  $-1$  e  $1$ .

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \int_0^2 \frac{\frac{1}{2}dx}{1+(\frac{x}{2})^2} = \int_{-1}^1 \frac{\frac{1}{2}dx}{1+(\frac{x+1}{2})^2} = \int_{-1}^1 \frac{2dx}{4+(x+1)^2}.$$

Agora aplicamos a quadratura de Gauss-Legendre usando os pesos e raízes para  $n = 2$  na tabela acima

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i),$$

onde  $f(x) = 2/[4 + (x + 1)^2]$ . Temos

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} \approx \frac{5}{9} \frac{2}{4 + \left(-\sqrt{\frac{3}{5}} + 1\right)^2} + \frac{8}{9} \frac{2}{4 + (0+1)^2} + \frac{5}{9} \frac{2}{4 + \left(\sqrt{\frac{3}{5}} + 1\right)^2}$$

$$\approx 0.274293789 + 0.355555555 + 0.155417689$$

$$\approx 0.785267033$$

O valor correto da integral é  $\pi/4 = 0.785398163$ . Vemos que com apenas 3 avaliações da integral chegamos a um erro de 0.00013. Para efeitos de comparação, se usarmos o método de Simpson para os mesmos do intervalo obteremos o resultado 0.78333336, cujo erro é de 0.002.

**Exercício:** calcule novamente o valor da integral para  $n = 4$  (5 pontos) e compare com o resultado para o método de Simpson estendido para 5 pontos.

### 8.4.2 Generalização para outros tipos de Integral

De forma geral os polinômios ortogonais satisfazem as relações

$$\int_a^b W(x)g_n(x)g_m(x)dx = 0, n \neq m$$

$$\int_a^b W(x)[g_n(x)]^2 dx = C(n) \neq 0$$

onde  $W(x)$  é uma função peso. Se

$$W(x) = 1 \quad \text{temos polinômios de Legendre} \quad P_n(x), a = -1, b = 1$$

$$W(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \quad \text{temos polinômios de Chebishev} \quad T_n(x), a = -1, b = 1$$

$$W(x) = e^{-x} \quad \text{temos polinômios de Laguerre} \quad \mathcal{L}_n(x), a = 0, b = \infty$$

$$W(x) = e^{-x^2} \quad \text{temos polinômios de Hermite} \quad H_n(x), a = -\infty, b = \infty$$

Integral tipo	$x_i$ (raízes do polinômio)	$w_i$
$\int_{-1}^1 f(x)dx$	Legendre, $P_n(x)$	$\int_{-1}^1 L_i(x)dx$
$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)dx$	Chebichev, $T_n(x)$	$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} L_i(x)dx$
$\int_0^\infty e^{-x} f(x)dx$	Laguerre, $\mathcal{L}_n(x)$	$\int_0^\infty e^{-x} L_i(x)dx$
$\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} f(x)dx$	Hermite, $H_n(x)$	$\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} L_i(x)dx$

Exercício: Calcule  $\int_0^\infty e^{-x} \sin x dx$  usando 3 pontos com Quadratura de Gauss-Legendre (valor exato da integral =  $\frac{1}{2}$ ).

$n = 2$	raízes ( $w_i$ )	$w_i$
3 pontos	0.4157745567	0.7110930099
Polinômio	2.2942803602	0.2785177335
de Laguerre	6.2899450829	0.0103892565

Solução:  $I = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$ , onde  $f(x) = \sin x$ .

$$\begin{aligned} I \approx & 0.7110930099. \sin(0.4157745567) = 0.29565438 \\ & +0.2785177335. \sin(2.2942803602) = 0.208750114 \\ & +0.0103892565. \sin(6.2899450829) = \underline{0.000070228} \\ & = 0.504474722 \end{aligned}$$

que está em bom acordo com o valor exato  $\frac{1}{2}$  usando apenas 3 pontos.

### 8.4.3 Erros na Quadratura de Gauss

$$\begin{aligned} \text{Legendre} \quad E_n &= \frac{2^{2n+3} [(n+1)!]^4}{(2n+3) [(2n+2)!]^3} f^{(2n+2)}(\xi) \quad \xi \text{ em } (-1, 1) \\ \text{Chebishev} \quad E_n &= \frac{2\pi}{2^{2n+2} (2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi) \quad \xi \text{ em } (-1, 1) \\ \text{Laguerre} \quad E_n &= \frac{[(n+1)!]^2}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi) \quad \xi \text{ em } (0, \infty) \\ \text{Hermite} \quad E_n &= \frac{(n+1)! \sqrt{\pi}}{2^{2n+1} (2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi) \quad \xi \text{ em } (-\infty, \infty) \end{aligned}$$

## 8.5 Integração pelo Método de Monte Carlo

### REVISAR

Métodos de Monte Carlo (MC) são aqueles que se utilizam de números aleatórios (ou pseudo-aleatórios) na sua composição. Eles tem larga aplicação em modelos físicos, como por exemplo na mecânica estatística e simulações de sistemas de muitos corpos (“*many body*”).

Uma lista de aplicações:

- Modelo de Ising- algoritmo de Metrópolis
- “*Salesman problem*”
- “*Random walk*”
- *DMC* - “*Diffusion M.C. Method*”, cálculo do estado fundamental de sistemas de muitos corpos
- *QDMC* - “*Quantum Determinant M.C.*”, modelo de Hubbard
- *PIMC* - “*Path Integral M.C.*”
- Física de reações (colisões)
- Integrais Multidimensionais,  $\int dx dy dz dp_x dp_y dp_z f(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$

Nesse curso introdutório vamos apenas considerar a aplicação de números aleatórios para o cálculo da integral de uma função.

### 8.5.1 Geração de números aleatórios

A geração de números aleatórios (“*random number generators*” - RNG) é uma arte por si só. Atualmente é possível adquirir geradores de números realmente aleatórios (“*true random number generators*”) que digitalizam o ruído gerado em uma junção semi-condutora ao ser atravessado por uma corrente. Entretanto, a taxa de geração é limitada. Em geral, usam-se operações aritméticas para geração de números aleatórios (ou pseudo-aleatórios).

Um dos algoritmos aritméticos mais conhecidos é o devido à Lehmer (1951) e chamado de (“*Linear Congruential Generator*” - LCG). Ele é expresso na forma

$$Z_{i+1} = (aZ_i + b) \bmod m = \text{resto de } \frac{aZ_i + b}{m}$$

$m \rightarrow$  módulo

$0 \leq a < m \rightarrow$  multiplicador

$0 < b < m \rightarrow$  incremento

$0 \leq Z_0 < m \rightarrow$  semente “*seed*” ou valor inicial “*start value*”

Se  $a$ ,  $b$ ,  $m$  são propriamente escolhidos, então o período será máximo. Nesse caso, todos os inteiros entre 0 e  $m - 1$  ocorrerão em algum ponto de forma que a semente inicial  $Z_0$  é tão boa como qualquer outra.

Exemplo: Seja  $a = 4$ ,  $b = 1$ ,  $m = 9$ ,  $Z_0 = 3$ .

$$Z_{i+1} = (4Z_i + 1) \bmod 9$$

$$Z_0 = 3$$

$$Z_1 = (4 \times 3 + 1) \bmod 9 = 13 \bmod 9 = \text{resto } \frac{13}{9} = 4$$

$$Z_2 = (4 \times 4 + 1) \bmod 9 = 17 \bmod 9 = \text{resto } \frac{17}{9} = 8$$

$$Z_3 = (4 \times 8 + 1) \bmod 9 = 33 \bmod 9 = \text{resto } \frac{33}{9} = 6$$

$\vdots$

7, 2, 0, 1, 5, 3  $\leftarrow$  ciclo de tamanho  $m$

Para termos uma longa sequência,  $m$  deve ser um número grande, mas não tão grande que  $a \times m$  cause *overflow*.

Se obtivermos  $m$  números aleatórios entre 0 e  $m - 1$  ( $Z_{i+1}$ ), podemos obter uma distribuição uniforme entre  $[0,1)$  ( $U_{i+1}$ ) pela divisão:

$$U_{i+1} = \frac{Z_{i+1}}{m}$$

### 8.5.2 Park & Miller (LCG b=0)

$$a = 7^5 = 16807$$

$$b = 0$$

$$m = 2^{31} - 1 = 2147483647$$

Ciclo de  $2^{31} - 2$  números aleatórios, com  $Z_0 \neq 0$ .

### 8.5.3 Integração por Monte-Carlo simples

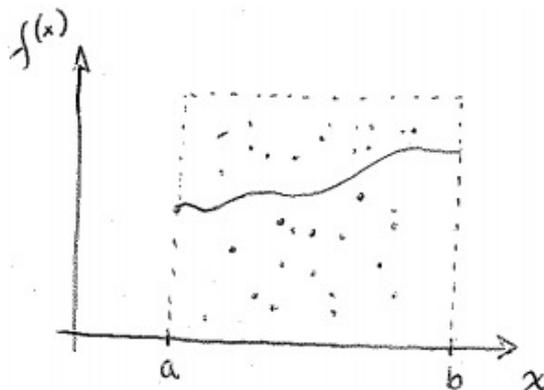


Figura 8.4: Distribuição de pontos sob a área avaliada, e a curva da função correspondente.

Suponha que desejemos saber a área sob a curva que liga  $a$  e  $b$ . Jogamos então aleatoriamente pontos no retângulo que contém a área de integração. Dividindo o número de pontos sob a curva pelo total de pontos jogados, e multiplicando pela área do retângulo, teremos uma aproximação da área (ou  $\int_a^b f(x)dx$ ) sob a curva.

$$\int_a^b f(x)dx = \text{Área sob a curva} \approx A \frac{\text{no. de pontos sob a curva}}{\text{no. total de pontos}}$$

onde  $A$  é a área do retângulo.

Exemplo: Cálculo da área de um círculo.

$$\text{Área do círculo} \approx A \frac{\text{no. de pontos dentro do círculo}}{\text{no. total de pontos jogados}}$$

onde  $A$  é a área do quadrado circunscrito.

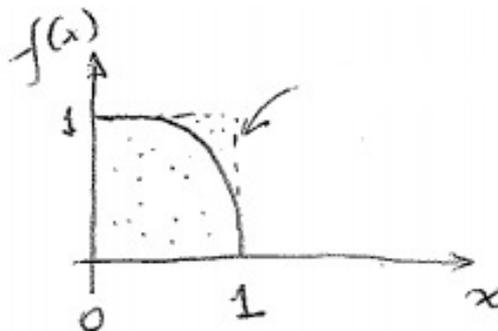


Figura 8.5: Curva  $x^2 + y^2 = 1$ , ou  $y = \sqrt{1 - x^2}$  considerada para o cálculo da área do círculo.

Considerando apenas o 1º quadrante:

$$\int_0^1 f(x)dx = \int_0^1 \sqrt{1 - x^2}dx = \frac{1}{4} \text{área do círculo} = \frac{\pi}{4}$$

$$\approx \frac{\text{no. de pontos sob a curva (dentro)}}{\text{no. de pontos total}}$$

Usando um *linear congruential generator* na forma  $Z_{i+1} = aZ_i \bmod m$ ,  $a = 16807$ ,  $m = 2^{31} - 1$  obtivemos a seguinte tabela para 10 pontos ( $Z_0 = 1$ ):

$x$	$y$	$x^2 + y^2$
$7.8263693 \times 10^{-6}$	0.1315378	$1.7302191 \times 10^{-2}$
0.75560533	0.4586501	0.7812994
0.5327672	0.2189592	0.3317840
$4.7044616 \times 10^{-2}$	0.6788647	0.4630705
0.6792964	0.9346929	1.335094( fora)
0.3835021	0.5194164	0.4168672
0.8309653	$3.457211 \times 10^{-2}$	0.6916987
$5.3461634 \times 10^{-2}$	0.5297002	0.2834404
0.6711494	$7.6981862 \times 10^{-3}$	0.4505008
0.3834156	$6.6842236 \times 10^{-3}$	0.1514754

$$\pi = 4 \frac{\text{no. pontos dentro}}{\text{no. total de pontos}} = 4 \frac{9}{10} \simeq 3.6$$

Este é um resultado grosseiro, pois poucos pontos foram utilizados.

Pontos	$\pi$
10	$\frac{4 \times 9}{10} \approx 3.6$
20	$\frac{4 \times 17}{20} \approx 3.2$
$\vdots$	$\vdots$
100	$\frac{4 \times 71}{100} \approx 2.8$
$\vdots$	$\vdots$
1000	$\frac{4 \times 792}{1000} \approx 3.16$