

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

RELATÓRIO

PICME

Teoria, Implementação e Comparação de  
Métodos de Integração Numérica

*Aluno:*

Renan O. Domingues

*Orientador:*

Prof. Abel S. Siqueira

Curitiba

Agosto de 2016

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Fórmulas de Newton-Cotes</b>	<b>3</b>
2.1	Interpolação Polinomial . . . . .	4
2.2	Fórmulas de Newton-Cotes . . . . .	6
2.3	Erro nas Fórmulas de Newton-Cotes . . . . .	9
2.4	Fórmulas Repetidas de Newton-Cotes . . . . .	10
2.5	Erro nas Fórmulas Repetidas de Newton-Cotes . . . . .	12
2.6	Quadratura de Romberg . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Mudança do Intervalo de Integração</b>	<b>17</b>
3.1	Substituição de Variável em Integrais . . . . .	17
3.2	Integrais Impróprias . . . . .	20
<b>4</b>	<b>Quadratura Adaptativa</b>	<b>21</b>
4.1	O Método Adaptativo e sua Implementação . . . . .	22
4.2	Regra de Simpson Adaptativa . . . . .	23
<b>5</b>	<b>Mapeamento Polinomial de Integrais</b>	<b>25</b>
5.1	Forma geral . . . . .	26
5.2	Quadratura de Gauss-Legendre . . . . .	27
5.3	Quadratura Gaussiana . . . . .	30
5.4	Quadratura de Gauss-Lobatto . . . . .	31
5.5	Implementação de Quadraturas Gaussianas . . . . .	32
5.6	Quadratura de Clenshaw-Curtis . . . . .	34
<b>6</b>	<b>Quadratura Senh-Tgh</b>	<b>38</b>
6.1	Substituição Senh-Tgh . . . . .	39

6.2	Implementação da Substituição Senh-Tgh . . . . .	41
<b>7</b>	<b>Comparações</b>	<b>45</b>
7.1	Método Comparativo . . . . .	45
7.2	Resultados e Discussão . . . . .	47
<b>8</b>	<b>Conclusão</b>	<b>52</b>

# 1 Introdução

Partindo do teorema fundamental do cálculo, sabe-se que a integral definida de uma função  $f$  em um intervalo  $[a, b]$  pode ser obtida utilizando a relação

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

onde  $F$  é uma primitiva de  $f$ . No entanto, obter uma primitiva de uma função é, em geral, uma técnica complexa demais para ser implementada computacionalmente.

Com isso surge a necessidade de técnicas alternativas ao método analítico, que aproximem o valor de integrais definidas e possam ser executadas por meio de algoritmos computacionais de maneira eficiente. As técnicas clássicas de integração numérica são as fórmulas de Newton-Cotes, que consistem em aproximar a integral de uma função  $f$  em um intervalo  $[a, b]$  utilizando os valores da função nas abscissas  $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n \in [a, b]$ , igualmente espaçadas entre si.

Apesar das fórmulas clássicas de Newton-Cotes funcionarem bem para aproximar funções contínuas em intervalos finitos, elas não fornecem valores satisfatórios ao aproximar integrais impróprias. Integrais impróprias incluem aquelas definidas em intervalos infinitos e integrais de funções que possuem descontinuidade infinita em um intervalo finito.

Outra limitação das fórmulas clássicas é que exigem muito custo computacional para alta precisão. Existem métodos robustos de integração numéricas capazes de

fornecer alta precisão com baixo custo computacional e de aproximarem integrais impróprias. Dentre esses métodos se destaca a substituição Senh-Tgh.

Nesse trabalho foram desenvolvidas, implementadas e comparadas as fórmulas clássicas de integração numérica e métodos mais sofisticados, incluindo as Quadraturas Gaussiana e de Clenshaw-Curtis e o Método Senh-Tgh. A implementação foi feita na linguagem Julia com precisão arbitrária, com desenvolvimento de pacote de código livre e testes automatizados.

## 2 Fórmulas de Newton-Cotes

Uma ideia simples para aproximar integrais definidas é substituir a função por alguma outra cuja integral no mesmo intervalo fornece um valor próximo, que pode ser determinado numericamente. Polinômios são uma boa escolha para essa tarefa, já que a integração analítica de polinômios pode ser descrita por uma fórmula geral.

É preciso ter o cuidado de escolher um polinômio adequado, de forma que a integral obtida numericamente seja próxima da original. Existem diferentes maneiras de aproximar uma função através de um polinômio, mas a de maior relevância na integração numérica é a interpolação polinomial.

A família de fórmulas de integração numérica resultantes da aproximação da função integrada através de interpolação polinomial, em pontos igualmente espaçados entre si, são conhecidas como fórmulas de Newton-Cotes. Essas fórmulas clássicas são a base da integração numérica e, por esse motivo, serão apresentadas antes dos métodos mais robustos.



Onde a matriz  $A$  dos coeficientes é

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{pmatrix},$$

uma matriz de Vandermonde e, portanto, sendo  $x_0, x_1, \dots, x_n$  distintos, temos que  $\det(A) \neq 0$ . Sabemos com isso que sistema linear possui solução única e, portanto, que o polinômio interpolador de grau  $n$  para uma função  $f(x)$  em  $n + 1$  pontos distintos existe e é único.

O polinômio interpolador pode ser encontrado resolvendo o sistema linear, mas existem alternativas muito mais eficientes. Podemos, por exemplo, escrever o polinômio interpolador na forma

$$p_n(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + \dots + f(x_n)L_n(x),$$

onde  $L_k(x)$  são polinômios de grau máximo  $n$ . Para satisfazer a condição  $p_n(x_i) = f(x_i)$ , é preciso que  $L_k(x_i) = 0$  se  $k \neq i$  e  $L_k(x_i) = 1$  quando  $k = i$ . Com isso, os polinômios  $L_k(x)$  são definidos por

$$L_k(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\dots(x - x_n)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1)\dots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\dots(x_k - x_n)}.$$

A unicidade do polinômio interpolador de grau  $n$  para  $n + 1$  pontos nos garante que o polinômio escrito nessa forma é o mesmo obtido da determinação dos coeficientes pela solução do sistema de equações. Essa representação dos polinômios interpoladores é conhecida como Forma de Lagrange.

Utilizando do operador de diferenças divididas, que é descrito por

$$\begin{aligned}
 f[x_i] &= f(x_i) \\
 f[x_i, x_{i+1}] &= \frac{f[x_{i+1}] - f[x_i]}{x_{i+1} - x_i} \\
 f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] &= \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i} \\
 &\dots \\
 f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] &= \frac{f[x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] - f[x_i, \dots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i},
 \end{aligned}$$

podemos escrever os polinômios interpoladores na Forma de Newton:

$$\begin{aligned}
 p_n(x) &= f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots \\
 &\quad + f[x_0, x_1, x_2, \dots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}).
 \end{aligned}$$

Como o polinômio interpolador precisa coincidir com a função somente nos pontos  $x_i$ , existe uma função  $E_n(x)$  de erro associada à interpolação polinomial, de forma que

$$f(x) = p_n(x) + E_n(x).$$

A fórmula desse erro é

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

mas sua derivação não será demonstrada aqui. O valor  $\xi$  nessa fórmula corresponde a um ponto específico, porém desconhecido, que sempre pertence ao intervalo de integração.

## 2.2 Fórmulas de Newton-Cotes

Sabemos que existe um polinômio único de grau máximo  $n$  que interpola uma função qualquer em  $n + 1$  pontos, e que esse polinômio pode ser encontrado facilmente pela Forma de Lagrange ou pela Forma de Newton. Podemos então usar

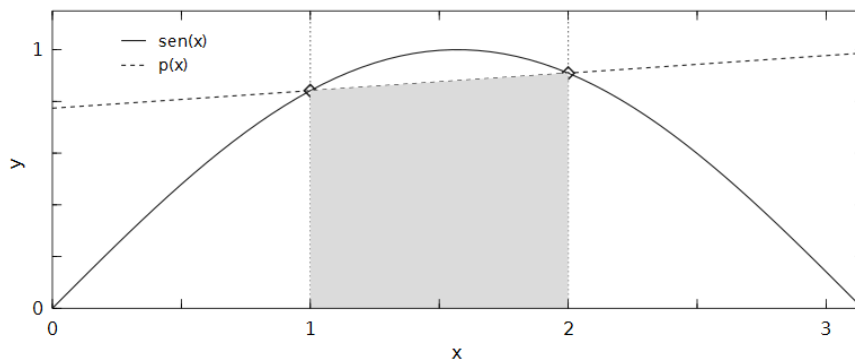
a integral desse polinômio no intervalo de integração como aproximação para a integral. Aproximando a função da integral por um polinômio linear temos

$$\begin{aligned}
 \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx &\approx \int_{x_0}^{x_1} \left[ f(x_0) \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f(x_1) \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \right] dx \\
 &\approx \int_{x_0}^{x_1} \left[ \left( \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \right) x - \frac{f(x_1)x_0 - f(x_0)x_1}{x_1 - x_0} \right] dx \\
 &\approx \left[ \left( \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \right) \frac{x^2}{2} - \left( \frac{f(x_1)x_0 - f(x_0)x_1}{x_1 - x_0} \right) x \right]_{x_0}^{x_1} \\
 &\approx \left( \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \right) \frac{(x_1 + x_0)(x_1 - x_0)}{2} - \frac{f(x_1)x_0 - f(x_0)x_1}{x_1 - x_0} (x_1 - x_0) \\
 &\approx \frac{(x_1 + x_0)(f(x_1) - f(x_0)) - 2(f(x_1)x_0 - f(x_0)x_1)}{2} \\
 &\quad \therefore \boxed{\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx \approx \frac{x_1 - x_0}{2} (f(x_1) + f(x_0))}.
 \end{aligned}$$

Essa fórmula é a Regra do Trapézio.

A Regra do Trapézio é conhecida dessa forma pois pode ser derivada intuitivamente como a área do trapézio formado pelos pontos  $(x_0, 0)$ ,  $(x_1, 0)$ ,  $(x_1, f(x_1))$  e  $(x_0, f(x_0))$ . De fato, a fórmula corresponde à área desse trapézio e essa é sua interpretação gráfica.

Abaixo, temos a representação gráfica da aproximação da integral definida da função  $\sin(x)$  em  $[1, 2]$ , de valor  $I = 0.956449\dots$ , pela regra do trapézio, que fornece a aproximação  $I \approx 0.5 \cdot (\sin(1) + \sin(2)) = 0.875384\dots$ .





Se aproximamos  $f(x)$  por um polinômio quadrático que a interpola em três pontos  $x_i$  com  $i = 0, 1, 2$ , igualmente espaçados entre si, temos

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \approx \int_{x_0}^{x_2} \left[ f(x_0) \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1) \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2) \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \right] dx,$$

onde  $x_2 - x_1 = x_1 - x_0 = \frac{x_2 - x_0}{2}$ . Simplificando essa integral, obtemos

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \approx \frac{x_2 - x_0}{3} (f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2))},$$

que é a Regra de Simpson. Aproximando o exemplo anterior com essa fórmula teremos

$$\int_1^2 \sin(x) dx = I \approx \frac{1}{3} \cdot (\sin(1) + 4 \cdot \sin(1.5) + \sin(2)) = 0.916087\dots$$

Integrando os polinômios interpoladores de grau 3 e 4 são derivadas a Regra de  $\frac{3}{8}$  de Simpson (4 pontos)

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x) dx \approx \frac{3(x_3 - x_0)}{8} (f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)),$$

e a Regra de Boole (5 pontos)

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x) dx \approx \frac{2(x_4 - x_0)}{45} (7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)),$$

respectivamente. Essas fórmulas fazem parte da família de fórmulas fechadas de Newton-Cotes.

Fórmulas fechadas de integração numérica são aquelas que usam os valores que a função assume nos extremos do intervalo de integração. As fórmulas que aproximam integrais sem usar esses valores são conhecidas como fórmulas abertas. Um exemplo de fórmula aberta é Regra do Ponto Médio, que consiste em aproximar uma integral de intervalo  $[x_0, x_1]$  pelo retângulo de base  $(x_1 - x_0)$  e altura igual ao valor da função no ponto médio do intervalo, ou seja,

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx \approx (x_1 - x_0) f\left(\frac{x_1 + x_0}{2}\right)}.$$

### 2.3 Erro nas Fórmulas de Newton-Cotes

Os polinômios interpoladores usados nas fórmulas de Newton-Cotes possuem um erro associado, definido pela função  $E_n(x)$ , de expressão conhecida. Considerando esse erro temos a igualdade

$$\int_{x_0}^{x_{n+1}} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_{n+1}} p_n(x) dx + \int_{x_0}^{x_{n+1}} E_n(x) dx,$$

onde o valor da segunda integral é o erro  $E$  da fórmula de Newton-Cotes de grau  $n$ , de valor

$$\begin{aligned} E &= \int_{x_0}^{x_{n+1}} E_n(x) dx \\ &= \int_{x_0}^{x_{n+1}} (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} dx. \end{aligned}$$

Assim, o erro  $E_t$  da Regra de Trapézio é

$$\begin{aligned} E_T &= \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1) \frac{f''(\xi)}{2} dx \\ &= \frac{f''(\xi)}{2} \int_{x_0}^{x_1} [x^2 - x(x_0 + x_1) + x_0x_1] dx \\ &= \frac{f''(\xi)}{2} \left[ \frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2}(x_0 + x_1) + x(x_0x_1) \right]_{x_0}^{x_1} \\ &= \frac{f''(\xi)}{12} [2(x_1 - x_0)(x_1^2 - x_0x_1 + x_0^2) - 3(x_1 - x_0)(x_1 + x_0)(x_1 + x_0) + 6(x_1 - x_0)x_0x_1] \\ &= \frac{f''(\xi)}{12} (x_1 - x_0)[2x_1^2 - 2x_1x_0 + 2x_0^2 - 3x_1^2 - 6x_0x_1 - 3x_0^2 + 6x_0x_1] \\ &= -\frac{f''(\xi)}{12} (x_1 - x_0)^3. \end{aligned}$$

O mesmo procedimento é feito para determinar o erro das demais fórmulas de Newton-Cotes. O erro  $E_S$  da Regra de Simpson é

$$\begin{aligned} E_S &= \int_{x_0}^{x_2} (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \frac{f^{iv}(\xi)}{6} dx \\ &= -\frac{f^{iv}(\xi)}{90} (x_1 - x_0)^5 \end{aligned}$$

O erro  $E_{(\frac{3}{8})_S}$  da Regra de  $\frac{3}{8}$  Simpson e  $E_B$  da Regra de Boole são

$$E_{(\frac{3}{8})_S} = -\frac{3f^{iv}(\xi)}{80}(x_1 - x_0)^5 \text{ e } E_B = -\frac{8f^{vi}(\xi)}{945}(x_1 - x_0)^7.$$

Observando as equações do erro fica claro que a aproximação pela Regra do Trapézio é exata ao aproximar polinômios lineares, enquanto a Regra de Simpson é exata para polinômios de grau máximo 3. Essa primeira informação já era esperada, afinal existe apenas um polinômio linear que passa por dois pontos  $(x_0, f(x_0))$  e  $(x_n, f(x_n))$  distintos.

Observando as fórmulas para os erros das fórmulas repetidas de Newton-Cotes notamos que ele depende de um termo  $(x_1 - x_0)^j$  contendo o espaçamento entre os pontos, onde  $j$  tende a aumentar com o aumento do grau da fórmula.

Como fórmulas de maior grau usam um maior número de pontos igualmente espaçados entre si no mesmo intervalo  $(x_n - x_0)$  de integração, o valor  $(x_1 - x_0)$ , e portanto o erro, diminui com o aumento do grau da fórmula de Newton-Cotes. Isso faz sentido, já que fórmulas de maior grau são derivadas com mais pontos e assim mais informação sobre a função no intervalo de integração.

Embora seja possível obter uma aproximação melhor usando uma fórmula de Newton-Cotes de grau maior, é preciso para isso derivar essas fórmulas, o que é uma tarefa trabalhosa.

## 2.4 Fórmulas Repetidas de Newton-Cotes

Uma maneira muito mais eficiente de aumentar a precisão é dividir o intervalo original de integração em subintervalos e aplicar a mesma fórmula separadamente em cada um deles.

O motivo pelo qual isso melhora a aproximação é que o erro para uma fórmula de Newton-Cotes de grau  $n$  pode ser escrito como

$$E_n = -\mathbb{k}(x_1 - x_0)^j,$$

onde podemos assumir que  $\mathbb{k}$  varia pouco ao longo do intervalo e  $j$  é sempre maior que 3. Assim, se dividirmos o intervalo de integração em dois, o espaçamento em cada intervalo será  $\frac{(x_1-x_0)}{2}$ . Assumindo que  $\mathbb{k}$  é constante, o erro total será aproximadamente a soma dos erros parciais, ou seja,

$$E_n^2 \approx -2 \cdot \mathbb{k} \cdot \left(\frac{x_1 - x_0}{2}\right)^j = -\mathbb{k} \cdot \frac{(x_1 - x_0)^j}{2^{j-1}}.$$

Ao dividir o intervalo de integração em dois subintervalos ao aplicar uma fórmula de Newton-Cotes, o erro será aproximadamente  $2^{j-1}$  menor que a aplicação direta. Esse aumento de precisão tem como custo um maior número de pontos no interior do intervalo de integração, mas ainda assim dividir usar uma fórmula repetida é, no geral, mais vantajoso que aumentar o grau da fórmula de Newton-Cotes.

Na prática, as Regras de  $\frac{3}{8}$  de Simpson e de Boole raramente são usadas. Já as fórmulas repetidas do Trapézio e de Simpson são recomendadas na aproximação de integrais definidas próprias de curva suave, além de serem essenciais em vários métodos mais sofisticados.

Em uma fórmula repetida de integração numérica o intervalo de integração  $[x_0, x_n]$  é dividido em  $N$  subintervalos, de forma que  $x_{i+1} - x_i = x_1 - x_0$  para todo  $i = 0, 1, \dots, n - 1$ . A Regra do Trapézio repetida é dada por

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &\approx \frac{x_1 - x_0}{2}(f(x_0) + f(x_1)) + \frac{x_2 - x_1}{2}(f(x_1) + f(x_2)) \\ &+ \dots + \frac{x_n - x_{n-1}}{2}(f(x_{n-1}) + f(x_n)) \\ &\approx \frac{x_1 - x_0}{2}(f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)) \\ &\approx \frac{x_1 - x_0}{2}(f(x_0) + f(x_n)) + (x_1 - x_0)(f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_{n-1})) \end{aligned}$$

$$\therefore \boxed{\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx \frac{x_1 - x_0}{2}(f(x_0) + f(x_n)) + (x_1 - x_0) \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)},$$

enquanto a Regra de Simpson repetida é dada por

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &\approx \frac{x_2 - x_0}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) + \frac{x_4 - x_2}{3}(f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)) \\ &+ \dots + \frac{x_n - x_{n-2}}{3}(f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)) \\ &\approx \frac{x_2 - x_0}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) \\ &+ \dots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)) \end{aligned}$$

$$\therefore \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx \frac{x_2 - x_0}{3} \left[ f(x_0) + f(x_n) + 2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} f(x_{2i-1}) \right].$$

É importante notar que a Regra de Simpson repetida pode ser usada somente com  $n$  par. Se for realmente desejado aplicar essa técnica para um número ímpar de subintervalos, uma alternativa usar Simpson repetida no intervalo  $[x_0, x_{n-1}]$  e aplicar a Regra do Trapézio em  $[x_{n-1}, x_n]$ .

A Regra do Ponto Médio também pode ser repetida, o que resulta na expressão

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx (x_1 - x_0) \sum_{i=0}^{n-1} f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right).$$

## 2.5 Erro nas Fórmulas Repetidas de Newton-Cotes

Em fórmulas repetidas a aproximação da integral é igual à soma das aproximações dos subintervalos. Da mesma forma, o erro é igual à soma dos erros dos subintervalos. Conseqüentemente, sendo  $E_T^N$  o erro da Regra do trapézio repetida com  $N$  subintervalos, temos

$$\begin{aligned} E_T^N &= -\frac{f''(\xi_0)}{12}(x_1 - x_0)^3 - \frac{f''(\xi_1)}{12}(x_2 - x_1)^3 \\ &\quad - \dots - \frac{f''(\xi_n)}{12}(x_n - x_{n-1})^3 \\ &= -\frac{(x_1 - x_0)^3}{12}(f''(\xi_0) + f''(\xi_1) + \dots + f''(\xi_{n-1})) \\ &= -\frac{(x_n - x_0)^3}{12N^3} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i). \end{aligned}$$

Cada ponto  $\xi_i$  é diferente pois pertence ao seu respectivo subintervalo  $[x_i, x_{i+1}]$ , o que justifica a distinção na expressão acima. Contudo, podemos definir  $\overline{f(\xi'')}$  como o valor médio da derivada segunda no intervalo  $[x_0, x_n]$ , conforme a expressão

$$\overline{f(\xi'')} = \frac{\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i)}{N}.$$

Então, a equação do erro da Regra do Trapézio repetida fica

$$Er_T = -\frac{(x_n - x_0)^3}{12N^2} \overline{f(\xi'')},$$

indicando que o erro decai proporcionalmente ao quadrado do número de subintervalos usados. Para o erro  $E_S^N$  da Regra de Simpson repetida, vale

$$\begin{aligned} Er_S &= -\frac{f^{iv}(\xi_0)}{90}(x_1 - x_0)^5 - \frac{f^{iv}(\xi_1)}{90}(x_1 - x_0)^5 \\ &\quad - \dots - \frac{f^{iv}(\xi_{\frac{n}{2}-1})}{90}(x_1 - x_0)^5 \\ &= -\frac{(x_1 - x_0)^5}{90}(f^{iv}(\xi_0) + f^{iv}(\xi_1) + \dots + f^{iv}(\xi_{\frac{n}{2}-1})) \\ &= -\frac{(x_n - x_0)^5}{90N^5} \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} f^{iv}(\xi_i) \\ &= -\frac{(x_n - x_0)^5}{180N^4} \overline{f_\xi^{iv}}. \end{aligned}$$

Verifica-se assim um declínio muito acentuado do erro com o aumento do número  $N$  de subintervalos.

Podemos determinar o número mínimo de subintervalos  $N$  necessário para garantir determinada precisão. Seja  $\tau$  o erro máximo a ser tolerado para a Regra de Simpson repetida, por exemplo, podemos escrever

$$\tau \leq \frac{(x_n - x_0)^5}{180N^4} \max_{x_0 \leq \xi \leq x_n} |f^{iv}(\xi)|.$$

Para obter o valor mínimo  $N$  nessa inequação é necessário determinar a derivada quarta da função  $f(x)$  integrada e, além disso, verificar seus máximos e mínimos no

intervalo de integração  $[x_0, x_n]$ . Essa aplicação é pouco útil na integração numérica, já que demanda o valor máximo da derivada quarta de uma função desconhecida no intervalo.

## 2.6 Quadratura de Romberg

Uma aplicação da equação do erro da Regra do Trapézio O erro da Regra do Trapézio repetida decai aproximadamente com o quadrado do número  $N$  de subintervalos, conforme a equação

$$Er_T = -\frac{(x_n - x_0)^3}{12N^2} \overline{f(\xi''')}.$$

Esse decaimento não é exato pois o valor de  $\overline{f(\xi''')}$  será diferente para cada valor de  $N$ , embora dificilmente ocorram variações muito significativas.

Representando a aproximação pela Regra do Trapézio repetida como  $Q_1^n$ , onde  $N$  é o número de subintervalos, temos

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = Q_1^n - \frac{(x_n - x_0)^3}{12N^2} \overline{f(\xi''')}.$$

Supondo que  $\mathbb{k} = \frac{(x_n - x_0)^3 \overline{f(\xi''')}}{12}$  seja uma constante que varia pouco para diferentes valores de  $N$ , pode-se simplificar para

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx Q_1^n - \frac{\mathbb{k}}{n^2}.$$

Portanto, para a Regra do Trapézio ( $N = 1$ ) escrevemos

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx Q_1^{N=1} - \frac{\mathbb{k}}{1^2} = Q_1^{N=1} - \mathbb{k}.$$

Já para sua forma repetida com  $N = 2$

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx Q_1^{N=2} - \frac{\mathbb{k}}{2^2} = Q_1^{N=2} - \frac{\mathbb{k}}{4},$$

e para  $N = 4$

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx Q_1^{N=4} - \frac{\mathbb{k}}{4^2} = Q_1^{N=4} - \frac{\mathbb{k}}{16}.$$

De forma geral, se dobramos  $N$  por  $i$  vezes,

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx Q_1^{N=2^i} - \frac{\mathbb{k}}{(2^i)^2} = Q_1^{N=2^i} - \frac{\mathbb{k}}{2^{2i}}.$$

Assim, subtraindo a equação do erro simplificada para Trapézio repetida com  $N = 1$  por 4 vezes a com  $N = 2$ , por exemplo, obtemos

$$\begin{aligned} -3 \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &\approx Q_1^{N=1} - 4Q_1^{N=2} - \mathbb{k} + 4\frac{\mathbb{k}}{4} \\ \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &\approx \frac{4Q_1^{N=2} - Q_1^{N=1}}{3} \\ \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &\approx Q_1^{N=2} + \frac{1}{3}(Q_1^{N=2} - Q_1^{N=1}) \end{aligned}$$

Essa nova aproximação é muito mais precisa que aquela fornecida somente pela Regra do Trapézio repetida, sendo que utiliza a mesma quantidade de pontos.

Aplicando o mesmo procedimento para a Regra do Trapézio repetida com  $N = 2$  e  $N = 4$ , obtemos

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx Q_1^{N=4} + \frac{1}{3}(Q_1^{N=4} - Q_1^{N=2}).$$

Essa aproximação é ainda melhor que a anterior, derivada por  $N = 1$  e  $N = 2$ , além de ser melhor que somente  $Q_1^{N=4}$ . Podemos escrever, de forma geral,

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx R_j^{k=1} = Q_1^{N=2^{\tilde{N}}} + \frac{1}{3}(Q_1^{N=2^{\tilde{N}}} - Q_1^{N=2^{\tilde{N}-1}}),$$

onde  $2^j = 2^{\tilde{N}}$  e  $k$  é definido como a ordem de extrapolação. Resumindo, faz-se duas aproximações com a Regra do Trapézio repetida, com  $\tilde{N}$  e  $2\tilde{N}$  subintervalos, e uma aproximação melhor é gerada somando um terço da diferença das duas naquela com  $2\tilde{N}$  subintervalos.



Temos então que

$$R_1^{k=1} = Q_1^{N=2} + \frac{1}{3}(Q_1^{N=2} - Q_1^{N=1}) \text{ e } R_2^{k=1} = Q_1^{N=4} + \frac{1}{3}(Q_1^{N=4} - Q_1^{N=2}).$$

Se utilizarmos as aproximações  $R_1^{k=1}$  e  $R_2^{k=1}$  podemos conseguir uma aproximação ainda mais precisa,  $R_1^{k=2}$ , mas para isso é preciso fazer

$$R_1^{k=2} \approx R_2^{k=1} + \frac{1}{15}(R_2^{k=1} - R_1^{k=1}).$$

A razão para a alteração no denominador é que, embora isso não seja aqui demonstrado, podemos escrever

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = Q_1^{N=\tilde{N}} - \frac{\mathbb{k}_1}{\tilde{N}^2} - \frac{\mathbb{k}_2}{\tilde{N}^4} - \frac{\mathbb{k}_3}{\tilde{N}^6} - \dots$$

Com isso, acabamos com um erro  $\frac{\mathbb{k}_i}{\tilde{N}^{2i}}$  associado à cada grau  $i - 1$  de extrapolação.

Para  $k = 1$ , por exemplo,

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx R_j^{k=1} = Q_1^{N=2\tilde{N}} + \frac{1}{3}(Q_1^{N=2\tilde{N}} - Q_1^{N=\tilde{N}}) - \frac{\mathbb{k}_2}{N^4}.$$

Por consequência, é preciso subtrair a equação de  $R_1^{k=1}$  por 16 vezes a equação  $R_2^{k=1}$ , a fim de eliminar o termo  $\mathbb{k}_2$ , o que altera o denominador para 15 nesse caso.

Com isso, a fórmula geral para obter  $R_j^{k=\tilde{k}}$  fica

$$R_j^{k=\tilde{k}} = R_{j+1}^{k=\tilde{k}-1} + \frac{R_{j+1}^{k=\tilde{k}-1} - R_j^{k=\tilde{k}-1}}{4^{k-1} - 1}.$$

A Quadratura de Romberg consiste em aproximar a integral pelo valor  $R_1^{k=\tilde{k}}$ , de ordem de extrapolação máxima possível, a partir de um conjunto de  $\tilde{k} + 1$  Regras do Trapézio. Isso pode ser visualizado melhor no esquema a seguir:

Abaixo temos um exemplo de implementação da Regra de Romberg, onde  $Q_1(2^i)$  representa a regra do trapézio com  $N = 2^i$  subintervalos.

$$\begin{array}{ccccccc}
Q_1^{N=1} & & & & & & \\
Q_1^{N=2} & R_1^{k=1} & & & & & \\
Q_1^{N=4} & R_2^{k=1} & R_1^{k=2} & & & & \\
Q_1^{N=8} & R_3^{k=1} & R_2^{k=2} & R_1^{k=3} & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\
Q_1^{N=2^{\tilde{k}}} & R_{\tilde{k}-1}^{k=1} & R_{\tilde{k}-2}^{k=2} & R_{\tilde{k}-3}^{k=3} & \dots & R_1^{\tilde{k}} & .
\end{array}$$

### 3 Mudança do Intervalo de Integração

Se a função de uma integral oscilar muito no intervalo de integração, pode ser necessário um número muito grande de subintervalos para atingir a precisão desejada com uma fórmula composta de Newton. Além disso, apesar das fórmulas clássicas de Newton-Cotes funcionarem bem para aproximar funções contínuas em intervalos finitos, elas não fornecem valores satisfatórios ao aproximar integrais impróprias. Uma solução para essas limitações é transformar a integral do problema inicial em uma nova integral, que seja contínua em todo o seu intervalo de integração.

Uma aplicação importante de mudanças no intervalo de integração em integrais é transformar um intervalo finito qualquer em um específico, o que é fundamental na generalização de vários métodos.

#### 3.1 Substituição de Variável em Integrais

É possível realizar uma mudança no intervalo de integração através de uma substituição de variável. Um exemplo disso é substituir a variável  $x$  de uma função

---

**Algorithm 1** Regra de Romberg

---

```
1: function ROMBERG( $f, a, b, N$ )
2:    $h \leftarrow \frac{b-a}{N}$ 
3:    $k \leftarrow 1 + \log(2, N)$   $\triangleright$  obtém grau de extrapolação
4:    $I \leftarrow [Q_1(2^i) \text{ for } i = 0 : k - 1]$   $\triangleright$  calcula aproximações por trapézio
5:   for  $i = 1 : k - 1$  do
6:      $I \leftarrow [I[j + 1] + \frac{(I[j+1]-I[j])}{(4^i-1)} \text{ for } j = 1 : k - i]$   $\triangleright$  calcula cada grau de extrapolação
7:   end for
8:   return  $I[1]$ 
9: end function
```

---

$f(x)$  por uma função  $x(t)$ .

Pela regra da cadeia, sabe-se que a derivada de uma função composta por  $\Psi$  e  $\gamma$  é dada pela relação a seguir:

$$(\Psi \circ \gamma)' = (\Psi' \circ \gamma)\gamma'.$$

Portanto, dada uma função composta  $F(x)$  onde  $x$  depende da variável  $t$ ,

$$\frac{dF(x)}{dt} = f(x(t)) \frac{dx}{dt},$$

o que implica na expressão

$$\int dF(x) = \int f(x(t)) \frac{dx}{dt} dt.$$

Considerando a integral

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

e fazendo  $a = x(c)$  e  $b = x(d)$ , obtemos

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

Por fim, a partir da regra da cadeia, temos a seguinte relação geral para mudanças de variáveis em integrais:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_c^d f(x(t)) \frac{dx}{dt} dt.$$

Uma mudança de variável muito utilizada altera um intervalo qualquer  $[a, b]$  para  $[-1, 1]$ . Para isso, basta considerar  $x$  uma função linear de  $t$ , isto é,  $x(t) = mt + n$  onde  $m$  e  $n$  são constantes, e solucionar o sistema abaixo.

$$\begin{cases} x = a \Rightarrow t = -1 \therefore a = -m + n \\ x = b \Rightarrow t = 1 \therefore b = m + n \end{cases}$$

A solução desse sistema resulta na seguinte fórmula

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{-1}^1 f\left(\frac{a+b+t(b-a)}{2}\right) \frac{(b-a)}{2} dt.$$

Com a substituição de variável adequada, pode-se transformar uma integral qualquer em uma nova integral equivalente, de mesmo valor, mais fácil de ser integrada. Existem várias mudanças de variável úteis na integração numérica. Um exemplo disso é para aproximar numericamente integrais cujo intervalo de integração é ilimitado.

A mudança de variável  $x(t) = \frac{1}{t}$  pode ser utilizada para transformar certas integrais impróprias. Essa mudança é descrita pela expressão abaixo, que pode ser facilmente deduzida a partir da relação geral de mudança de variáveis em integrais.

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{\frac{1}{b}}^{\frac{1}{a}} f\left(\frac{1}{t}\right) \frac{1}{t^2} dx$$

Uma vez que a nova integral é própria, basta aplicar um método numérico qualquer para aproximá-la, tal como uma fórmula fechada de Newton. No entanto, deve-se ter cuidado ao utilizar essa mudança quando um dos limites de integração for zero. Nesse caso, antes de aplicar a mudança é preciso dividir o intervalo de integração em um limitado e outro ilimitado.

Para a integral a seguir, por exemplo, é preciso primeiramente dividir o intervalo inicial em dois

$$\int_0^{\infty} e^{-x} \cos x \, dx = \int_0^1 e^{-x} \cos x \, dx + \int_1^{\infty} e^{-x} \cos x \, dx,$$

e posteriormente aplicar a mudança de variável  $x(t) = \frac{1}{t}$  na parte imprópria:

$$\int_1^{\infty} e^{-x} \cos x \, dx = \int_0^1 \frac{e^{-\frac{1}{t}} \cos \frac{1}{t}}{t^2} \, dx.$$

Com isso, basta aproximar as duas integrais próprias por um método numérico qualquer para obter a aproximação.

$$\int_0^{\infty} e^{-x} \cos x \, dx = \int_0^1 e^{-x} \cos x \, dx + \int_0^1 \frac{e^{-\frac{1}{t}} \cos \frac{1}{t}}{t^2} \, dx = \frac{1}{2}.$$

### 3.2 Integrais Impróprias

Integrais impróprias incluem aquelas definidas em um intervalo infinito, tal como  $[0, +\infty)$ ,  $(-\infty, 0]$  ou  $(-\infty, +\infty)$ , ou cuja função tende ao infinito em algum dos extremos do intervalo. Analiticamente, integrais impróprias podem ser resolvidas aplicando o conceito de limites. A integral abaixo é um exemplo de imprópria com descontinuidade em um dos limites de integração.

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} \, dx = \lim_{a \rightarrow 0} \int_a^1 \frac{1}{\sqrt{x}} \, dx = \lim_{a \rightarrow 0} [2\sqrt{x}]_a^1 = 2$$

Já a integral abaixo é definida em um intervalo ilimitado, e por isso também se trata de uma imprópria:

$$\int_1^{\infty} \frac{1}{x^2} \, dx = \lim_{b \rightarrow +\infty} \int_1^b \frac{1}{x^2} \, dx = \lim_{b \rightarrow +\infty} \left[ -\frac{1}{x} \right]_1^b = 1.$$

Deve-se notar que as fórmulas fechadas de Newton não fornecem resultados satisfatórios ao aproximar integrais impróprias. Isso pois em integrais de intervalo ilimitado seria preciso calcular infinitos pontos do intervalo ou então trunca-lo, o

que comprometeria muito a precisão. Uma forma de resolver computacionalmente integrais de intervalos ilimitados é utilizando uma mudança de variável, que mude o intervalo de integração para um limitado.

No caso de uma integral que possui descontinuidade em um dos limites de integração, as fórmulas fechadas de Newton falham pois esse método necessita dos valores que a função assume nos extremos do intervalo. Existem diferentes alternativas para resolver numericamente esse tipo de integral, uma delas sendo uma mudança de variável que transforme a integral em uma própria. Outra alternativa é utilizar uma fórmula aberta de Newton, que aproxime a integral através de pontos no interior do intervalo, embora isso comprometa a precisão significativamente.

## 4 Quadratura Adaptativa

Ao aplicar um método numérico para aproximar uma integral definida o usuário pode estar interessado em uma precisão mínima para dado método. Usando as fórmulas clássicas de Newton-Cotes sabemos que podemos aumentar a precisão com um número maior de subintervalos, mas não temos referência alguma quanto à precisão dessas aproximações.

Assim, ao usar uma fórmula dessas é possível que seja utilizado um número de subintervalos muito pequeno, gerando um erro maior que o tolerável, ou então que seja perdido tempo com avaliações desnecessárias, calculando um valor muito mais preciso que o desejado.

Um método numérico para aproximação de integrais que estima a precisão da aproximação fornecida é chamado de adaptativo. Os métodos adaptativos são amplamente usados por garantirem uma precisão mínima de seu resultado.

## 4.1 O Método Adaptativo e sua Implementação

O erro de uma quadratura numérica depende muito da curvatura do gráfico da função integrada, de forma que quanto mais acentuada for a curva no intervalo, maior tende a ser o erro. Considerando que a curvatura de uma função pode variar muito ao longo do intervalo de integração, muitas vezes é desvantajoso dividir esse intervalo uniformemente em toda sua extensão.

Ao aproximar uma integral por fórmulas repetidas é frequente que uma curva suave, que exigiria poucos subintervalos para atingir a precisão desejada, seja dividida desnecessariamente. Uma maneira de evitar isso é determinar um limitante para o erro da aproximação em um subintervalo, e então compará-lo com a precisão desejada. Caso o limitante do erro de um subintervalo seja menor que o erro a ser tolerado, aquele subintervalo não será mais dividido. Com isso, as divisões serão mais frequentes nas regiões de curva mais acentuada do intervalo, onde são realmente necessárias.

Os métodos de quadratura adaptativa se assemelham às fórmulas repetidas, pois ambos dividem o intervalo de integração em subintervalos, onde uma fórmula simples é aplicada em cada um deles, para assim obter maior precisão. A diferença é que na quadratura adaptativa essa divisão é feita de forma seletiva. Antes de dividir cada subintervalo, é feita uma estimativa do erro de sua aproximação que é então comparada com o erro a ser tolerado para essa aproximação. Caso o erro estimado em um subintervalo seja menor que o erro a ser tolerado, não há necessidade de dividi-lo. Assim, aproximação da integral será obtida pela soma das aproximações dos subintervalos.

O pseudocódigo abaixo descreve de forma geral como funcionam os algoritmos adaptativos, onde  $Q[a, b]$  representa uma quadratura aplicada no intervalo  $[a, b]$ ,  $\tau$  é a tolerância e  $\varepsilon$  a estimativa do erro.

---

**Algorithm 2** Quadratura Adaptativa

---

```
1: function ADAP( $f, a, b, \tau$ )
2:    $Q[a, b] \approx \int_a^b f(x) dx$   $\triangleright$  aproxima a integral
3:    $\varepsilon \approx \left| Q - \int_a^b f(x) dx \right|$   $\triangleright$  estima o erro
4:   if  $\varepsilon < \tau$  then
5:     return  $Q[a, b]$   $\triangleright$  aceita a aproximação
6:   else
7:      $m \leftarrow (a + b)/2$ 
8:     return ADAP( $f, a, m, \tau/2$ ) + ADAP( $f, m, a, \tau/2$ )  $\triangleright$  rejeita
9:   end if
10: end function
```

---

Em algoritmos desse tipo pode ser, dependendo da função e da tolerância desejada, que a precisão nunca seja alcançada. Para evitar isso basta incluir como argumento da função algo que limite a 'profundidade' do método. Um exemplo disso é uma função adaptativa que solicite um tamanho mínimo para os subintervalos.

## 4.2 Regra de Simpson Adaptativa

Para implementar uma quadratura numérica em sua forma adaptativa é necessário um recurso capaz de estimar o erro de suas aproximações. No caso da Regra de Simpson, é possível deduzir um limitante a partir de suas equações do erro.

Aplicando a fórmula de Simpson para dois subintervalos e, portanto,  $h = \frac{x_2 - x_0}{2}$  obtemos

$$\int_a^b f(x) dx \approx S_1 = \frac{h}{3} \cdot (f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2))$$
$$\therefore \int_a^b f(x) dx = S_1 - \frac{h^5 f^{(iv)}(\xi)}{90}.$$



Agora, para 4 subintervalos e  $\tilde{h} = \frac{x_2 - x_0}{4} = \frac{h}{2}$ :

$$\int_a^b f(x) dx \approx S_2 = \frac{h}{3} \cdot [f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)]$$

$$\int_a^b f(x) dx = S_2 - \left(\frac{1}{16}\right) \frac{h^5 f^{(iv)}(\tilde{\xi})}{90}.$$

Supomos então que  $\xi \approx \tilde{\xi}$ , e portanto  $f(\xi) \approx f(\tilde{\xi})$ , obtendo a seguinte relação:

$$S_1 - \frac{h^5 f^{(iv)}(\xi)}{90} \approx S_2 - \left(\frac{1}{16}\right) \frac{h^5 f^{(iv)}(\tilde{\xi})}{90}$$

$$S_1 - S_2 \approx \frac{h^5 f^{(iv)}(\xi)}{90} \left[1 - \frac{1}{16}\right]$$

$$\therefore \frac{16}{15}(S_1 - S_2) \approx \frac{h^5 f^{(iv)}(\xi)}{90}.$$

Sabemos que

$$\left| \int_a^b f(x) dx - S_2 \right| \approx \left(\frac{1}{16}\right) \frac{h^5 f^{(iv)}(\xi)}{90},$$

e então, combinando essas duas expressões, obtemos uma relação entre os erros das aproximações por Simpson repetida com 4 subintervalos e 2 subintervalos:

$$\left| \int_a^b f(x) dx - S_2 \right| \approx \left(\frac{1}{15}\right) |S_1 - S_2|.$$

Portanto, dado um limitante  $\varepsilon$  para o erro de uma integração numérica pela Regra de Simpson, se  $S_2 - S_1 < 15\varepsilon$  então  $\int_a^b f(x) dx - S_2 < \varepsilon$ . Com isso, para aproximar uma integral com uma certa tolerância  $\varepsilon$  para o erro, é possível implementar um algoritmo que aproxime, primeiramente, para  $N = 2$  e  $N = 4$  subintervalos, e verifique se  $S_2 - S_1 < 15\varepsilon$ . Caso a verificação seja verdadeira, basta retornar o valor de  $S_2$ . Se não, os subintervalos  $[x_0, x_1]$  e  $[x_1, x_2]$  passarão a ser tratados individualmente, com um novo limitante  $\varepsilon_2 = \frac{\varepsilon}{2}$  para cada um deles. Serão feitas aproximações com  $N = 2$  e  $N = 4$  para os novos intervalos e será verificado para ambos se  $S_2 - S_1 < 15\varepsilon_2$ .

Esse método é conhecido como Regra de Simpson Adaptativa e foi um dos primeiros métodos adaptativos a serem propostos. É interessante notar que ao

calcular a aproximação  $S_1$  a função é avaliada em três pontos que também são usados ao obter  $S_2$ . Além disso, caso um intervalo seja dividido pela metade, três das avaliações de função para cada um dos novos intervalos já foram calculadas. Esses valores são facilmente reutilizadas na implementação da regra de Simpson Adaptativa, de forma que a função não seja avaliada mais de uma vez em um mesmo ponto.

Mesmo com essas otimizações tendendo a usar um número menor de avaliações de função a regra de Simpson Adaptativa terá, no geral, maior gasto computacional que Simpson Repetida, exceto em alguns casos específicos. A principal vantagem do método Adaptativo em relação à Simpson Repetida é a possibilidade do usuário ter um limitante para o erro da aproximação.

## 5 Mapeamento Polinomial de Integrais

As fórmulas de Newton-Cotes para integração numérica usam o valor que a função assume em pontos distintos igualmente espaçados entre si no interior do intervalo de integração. Esses valores são então multiplicados por respectivos valores comumente chamados de pesos que, nesse caso, variam com o grau da fórmula e com o espaçamento entre os pontos.

Fórmulas de integração numérica que geram uma aproximação através do somatório dos produtos entre valores da função e certos pesos são chamadas de métodos de mapeamento. Essa definição nos permite escrever qualquer método de mapeamento por uma forma geral. O que pode variar drasticamente entre esses métodos é o mapeamento e a seleção dos pesos.

Alguns dos melhores métodos para integração numérica, como a Quadratura Gaussiana e a quadratura de Clenshaw-Curtis, fazem o mapeamento da função usando como pontos as raízes de certa família de polinômios. A maior liberdade

no mapeamento da função em relação ao uso de pontos igualmente espaçados, como no caso das fórmulas de Newton-Cotes, permite a obtenção de resultados muito mais precisos com um menor número de avaliações de funções.

## 5.1 Forma geral

Pode-se generalizar as fórmulas de integração numérica por mapeamento pela expressão

$$\int_a^b f(x) dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \dots + A_n f(x_n),$$

onde os valores  $A_k$  são pesos específicos de cada fórmula.

Para a regra do trapézio, por exemplo, essa forma geral fica

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) \\ &\approx \frac{(x_1 - x_0)}{2} f(x_0) + \frac{(x_1 - x_0)}{2} f(x_1), \end{aligned}$$

onde

$$A_0 = A_1 = \frac{(x_1 - x_0)}{2}.$$

Para a regra de Simpson, temos

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) \\ &\approx \frac{x_1 - x_0}{3} f(x_0) + \frac{4(x_1 - x_0)}{3} f(x_1) + \frac{x_1 - x_0}{3} f(x_2), \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} A_0 = A_2 &= \frac{x_1 - x_0}{3} \\ A_1 &= \frac{4(x_1 - x_0)}{3}. \end{aligned}$$

## 5.2 Quadratura de Gauss-Legendre

Vimos que a regra do trapézio ( $n = 2$  pontos) apresenta erro nulo para funções de grau  $\leq 1$ , e a regra de Simpson ( $n = 3$  pontos) apresenta erro nulo para funções de grau  $\leq 3$ . Observando isso, seria interessante obter fórmulas gerais que aproximem exatamente polinômios de máximo grau possível.

Considerando o intervalo  $[-1, 1]$ , por sua simplicidade, para  $n = 1$  ponto, deseja-se obter  $A_0$  e  $t_0$  de forma que a relação

$$\int_{-1}^1 g(t) dt \approx A_0 g(t_0)$$

aproxime polinômios de máximo grau possível. Como queremos encontrar duas incógnitas, são necessárias duas equações linearmente independentes. Para uma função  $g$  de grau 0:

$$g_0(t) = 1 \Rightarrow \int_{-1}^1 1 dt = 2$$

Para uma função  $g$  de grau 1:

$$g_1(t) = t \Rightarrow \int_{-1}^1 t dt = 0$$

Resolvendo

$$A_0 g_0(t_0) = A_0 = 2$$

$$A_0 g_1(t_0) = A_0 t_0 = 0 \iff A_0 = 0 \text{ ou } t_0 = 0, \text{ como } A_0 = 2 \neq 0 \text{ temos } t_0 = 0,$$

obtemos que  $A_0 = 2$  e  $t_0 = 0$ . Ou seja, para  $n = 1$  a fórmula que aproxima exatamente funções de grau máximo 1 no intervalo  $[-1, 1]$  é:

$$\int_{-1}^1 g(t) dt \approx 2g(0).$$

Analogamente, para  $n = 2$  pontos temos a forma geral

$$\int_{-1}^1 g(t) dt \approx A_0 g(t_0) + A_1 g(t_1)$$

Como queremos obter os valores de 4 incógnitas, serão necessárias 4 equações linearmente independentes. Para uma função  $g$  de grau 0:

$$g_0(t) = 1 \Rightarrow \int_{-1}^1 1 dt = 2.$$

Para uma função  $g$  de grau 1:

$$g_1(t) = t \Rightarrow \int_{-1}^1 t dt = 0.$$

Para uma função  $g$  de grau 2:

$$g_2(t) = t^2 \Rightarrow \int_{-1}^1 t^2 dt = \frac{2}{3}.$$

Para uma função  $g$  de grau 3:

$$g_3(t) = t^3 \Rightarrow \int_{-1}^1 t^3 dt = 0.$$

Ao resolver o sistema

$$\begin{cases} A_0 g_0(t_0) + A_1 g_0(t_1) = 2 \Rightarrow A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 g_1(t_0) + A_1 g_1(t_1) = 0 \Rightarrow A_0 t_0 + A_1 t_1 = 0 \\ A_0 g_2(t_0) + A_1 g_2(t_1) = 0 \Rightarrow A_0 t_0^2 + A_1 t_1^2 = \frac{2}{3} \\ A_0 g_3(t_0) + A_1 g_3(t_1) = 0 \Rightarrow A_0 t_0^3 + A_1 t_1^3 = 0, \end{cases}$$

obtemos

$$\begin{aligned} A_0 &= A_1 = 1 \\ t_0 &= -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ t_1 &= \frac{\sqrt{3}}{3}. \end{aligned}$$

Portanto, para  $n = 2$  a fórmula que aproxima exatamente funções de grau máximo 3 no intervalo  $[-1, 1]$  é:

$$\int_{-1}^1 g(t) dt \approx g\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + g\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right).$$

Ao prosseguir com esse procedimento para demais valores  $n$  de pontos, a aproximação será exata para funções de grau máximo  $2n - 1$ . Como torna-se necessária a resolução de sistema lineares cada vez mais complicados com o aumento de  $n$ , os pontos  $t_k$  e pesos  $A_k$  são, geralmente, determinados por outros métodos ou obtidos em literatura específica. Alguns pontos e pesos podem ser consultados na tabela abaixo.

n	$t_k$	$A_k$
1	$t_0 = 1$	$A_0 = 2$
2	$t_0 = -t_1 = \sqrt{\frac{1}{3}}$	$A_0 = A_1 = 1$
3	$t_0 = 0$ $t_1 = -t_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}$	$A_0 = \frac{8}{9}$ $A_1 = A_2 = \frac{5}{9}$
4	$t_0 = -t_1 = \sqrt{\frac{3}{7} - \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$ $t_2 = -t_3 = \sqrt{\frac{3}{7} + \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$	$A_0 = A_1 = \frac{18+\sqrt{30}}{36}$ $A_2 = A_3 = \frac{18-\sqrt{30}}{36}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Essas fórmulas constituem a Quadratura de Gauss-Legendre, que é dada para o intervalo  $[-1, 1]$  conforme a expressão a abaixo.

$$\int_{-1}^1 g(t) dt = \sum_{i=0}^{n-1} A_i g(t_i),$$

Para estender a Quadratura de Gauss-Legendre à um intervalo genérico  $[a, b]$ , basta fazer a mudança de variável  $x(t) = \frac{a+b+t(b-a)}{2}$ .

Uma vantagem da quadratura Gauss-Legendre é que sua fórmula não avalia a função nos extremos do intervalo, permitindo assim a aproximação de algumas integrais impróprias que possuem descontinuidade nos limites do intervalo integração.

### 5.3 Quadratura Gaussiana

A fórmula geral de uma Quadratura Gaussiana é escrita para um intervalo  $[a, b]$  e uma função peso  $\omega(t)$ , na forma

$$\int_a^b \omega(t)g(t) dt \approx \sum_{i=0}^{n-1} A_i g(t_i),$$

onde  $n$  é o número de pontos usados na quadratura. Ou seja, a fórmula apresentada anteriormente é apenas uma das várias formas da Quadratura Gaussiana, o caso específico onde  $[a, b] = [-1, 1]$  e  $\omega(t) = 1$ , conhecido como quadratura de Gauss-Legendre. Porém, é comum que a literatura apresente a quadratura de Gauss-Legendre como Quadratura Gaussiana, omitindo a existência de suas variações.

Enquanto as fórmulas de Newton-Cotes utilizam pontos igualmente espaçados no intervalo de integração, uma QG usa pontos  $t_i$  estratégicos de forma que a aproximação seja exata para polinômios de máximo grau possível igual a  $2n - 1$ . Isso é possível usando como pontos as raízes do polinômio de Legendre de grau  $n$  no intervalo  $[-1, 1]$ .

Para verificar que uma fórmula qualquer de Quadratura Gaussiana aproxima exatamente polinômios de grau até  $2n - 1$ , começamos definindo um polinômio  $q(t)$  não trivial de grau  $n$  tal que

$$\int_a^b x^k \omega(t) q(t) dt = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n - 1,$$

onde os pontos  $t_i$  da QG com  $n - 1$  pontos são os zeros de  $q$ . Não nos preocuparemos com a existência desse polinômio por enquanto.

Ao dividir o polinômio  $g(t)$  de grau  $2n - 1$  por  $q(t)$ , podemos escrever

$$g(t) = q(t)p(t) + r(t),$$

onde  $p$  e  $r$  são polinômios de grau menor ou igual a  $n - 1$ . Obtém-se dessa relação que, para os zeros  $t_i$  de  $q$ , vale  $g(t_i) = r(t_i)$ .

Prosseguimos integrando o polinômio  $g(t)$

$$\begin{aligned}\int_a^b \omega(t)g(t) dt &= \int_a^b \omega(t)[q(t)p(t) + r(t)] dt \\ &= \int_a^b \omega(t)q(t)p(t) dt + \int_a^b \omega(t)r(t) dt,\end{aligned}$$

onde a primeira integral vale zero. Além disso, a Quadratura Gaussiana com  $n - 1$  pontos para a integral  $\int_a^b \omega(t)r(t) dt$  é exata pois  $r$  é de grau igual ou menor que  $n - 1$ . Logo

$$\begin{aligned}\int_a^b \omega(t)g(t) dt &= \sum_{i=0}^{n-1} A_i r(t_i) \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} A_i g(t_i).\end{aligned}$$

Portanto, uma QG qualquer que usa  $n$  pontos aproxima exatamente polinômios de grau menor que  $2n$ .

No caso da quadratura de Gauss-Legendre os polinômios  $q$  de grau  $n$ , que satisfazem a condição

$$\int_{-1}^1 x^k \omega(t)q(t) dt = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n - 1,$$

correspondem à família conhecida por polinômios de Legendre. Conseqüentemente, os nós  $t_i$  de Gauss-Legendre com  $n$  pontos são as raízes do polinômio de Legendre de grau  $n$ . De forma análoga as QG's são, em sua maioria, nomeadas pela família de polinômios  $q$  ortogonais correspondente.

## 5.4 Quadratura de Gauss-Lobatto

Embora a principal vantagem da Quadratura Gaussiana seja aproximar polinômios, ela também pode ser usada para aproximar outros tipos de funções. Existem variações da Quadratura Gaussiana que podem possuir ordem inferior à  $2n - 1$ . Um



exemplo disso é a fórmula de Gauss-Lobatto, uma modificação da quadratura de Gauss-Legendre.

Na quadratura de Gauss-Lobatto os extremos do intervalo de integração são usados como nós, e os nós internos correspondem aos zeros do polinômio de Jacobi de grau  $n - 2$  para  $\alpha = \beta = 1$ . O intervalo utilizado é  $[-1, 1]$ , o mesmo de Gauss-Legendre. Com essa modificação, a quadratura de Gauss-Lobatto aproxima exatamente polinômios de grau até  $2n - 3$ , e pode ser representada pela seguinte expressão

$$\int_{-1}^1 g(t) dt \approx \frac{2(g(-1) + g(1))}{n(n-1)} + \sum_{i=1}^{n-2} A_i g(t_i).$$

A desvantagem da quadratura de Gauss-Lobatto quando comparada à de Gauss-Legendre, além de ser de ordem  $2n - 3$ , é que a função é avaliada nos extremos do intervalo. Com isso, a quadratura de Gauss-Lobatto não pode ser usada em integrais impróprias com descontinuidade nos extremos do intervalo de integração. Porém, as avaliações nos extremos do intervalo tornam mais eficiente a implementação de Gauss-Lobatto na sua forma adaptativa. Isso ocorre pois, aumentando o número  $n$  de pontos na quadratura, os pontos da quadratura de Gauss-Legendre praticamente nunca coincidem.

## 5.5 Implementação de Quadraturas Gaussianas

A única dificuldade na implementação de uma QG é a determinação dos pesos  $A_i$  e pontos  $t_i$ . Tendo esses valores, basta gerar um vetor  $G$  contendo as avaliações  $g(t_i)$  e multiplica-lo pelo vetor  $A$  de pesos. Por muito tempo os nós e pesos da quadratura de Gauss-Legendre foram calculados solucionando sistemas de equações e então tabelados. Porém, existem métodos muito mais eficientes para obtenção desses valores. Tais métodos se baseiam na determinação dos zeros do polinômio ortogonal de grau  $n$  correspondente e posteriormente utilizar esses nós na deter-

minação dos pesos, por meio de relações determinadas analiticamente e disponíveis na literatura.

Abaixo é apresentado um pseudocódigo onde os nós e pesos, para um dado número  $n$  de pontos, são determinados dentro da função. Porém, caso a ideia seja aplicar a quadratura para várias integrais utilizando o mesmo valor  $n$ , torna-se mais eficiente calcular primeiramente os nós e pesos, uma única vez, e os passar como argumentos da função.

---

**Algorithm 3** Quadratura Gaussiana

---

```
1: function GAUSS( $f, a, b, n$ )  
2:    $h \leftarrow b - a$   
3:    $F \leftarrow \text{GETNODES}(n)$   $\triangleright$  obtem nós  
4:    $W \leftarrow \text{GETWEIGHTS}(n)$   $\triangleright$  obtem pesos  
5:   for  $i = 1 : n$  do  
6:      $F[i] \leftarrow f((a + b + h * F[i])/2) * h/2$   $\triangleright$  avaliações da função modificada  
7:   end for  
8:   return  $F' * W$   $\triangleright$  calcula aproximação  
9: end function
```

---

## 5.6 Quadratura de Clenshaw-Curtis

A quadratura de Clenshaw-Curtis se baseia na mudança de variável  $x(\theta) = \cos(\theta)$ , conforme a expressão

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \int_0^\pi f(\cos(\theta)) \sin(\theta) d\theta.$$

Através da série de Fourier de cossenos, pode-se escrever qualquer função par periódica  $C(x)$  pela fórmula

$$C(x) = a_0 + a_1 \cos x + a_2 \cos 2x + a_3 \cos 3x \cdots = a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos(kx),$$

onde os valores  $a_k$  devem decair com o aumento de  $k$ . É preciso, então, determinar esses valores.

Para obter  $a_0$ , basta integrar ambos os lados dessa série de 0 à  $\pi$ :

$$\int_0^\pi C(x) dx = \pi a_0 \Rightarrow a_0 = \left[ \frac{1}{\pi} \right] \int_0^\pi C(x) dx.$$

Já para os demais valores  $a_k$ , multiplica-se ambos os lados da expressão por  $\cos(kx)$  e posteriormente faz-se a integral de 0 à  $\pi$ .

$$\begin{aligned} \int_0^\pi C(x) \cos(kx) dx &= \int_0^\pi a_0 \cos(kx) dx + \int_0^\pi a_1 \cos(x) \cos(kx) dx + \cdots \\ &+ \int_0^\pi a_k \cos^2(kx) dx + \cdots + \int_0^\pi a_k \cos(kx) \cos(kx) dx \end{aligned}$$

Embora não seja tão evidente, a única integral à direita da igualdade que não vale zero é a que contém o elemento  $a_k$ . Isso pode ser verificado com algumas identidades trigonométricas no exemplo geral a seguir, onde  $m$  e  $n$  são números inteiros:

$$\begin{aligned} I = \int_0^\pi \cos(mt) \cos(nt) dt &= \frac{1}{2} \int_0^\pi [\cos(mt + nt) + \cos(mt - nt)] dt \\ &= \frac{1}{2} \left[ \frac{\sin(mt + nt)}{(m + n)} + \frac{\sin(mt - nt)}{(m - n)} \right]_0^\pi \\ &= \frac{1}{2} \left[ \frac{\sin(m\pi + n\pi)}{(m + n)} + \frac{\sin(m\pi - n\pi)}{(m - n)} \right] \end{aligned}$$

Nessa igualdade é possível notar que  $n \neq m \Rightarrow I = 0$ .

Então, basta isolar o termo  $a_k$  da integral:

$$\begin{aligned} \int_0^\pi C(x) \cos(kx) dx &= a_k \int_0^\pi \cos^2(kx) dx \\ \int_0^\pi C(x) \cos(kx) dx &= \frac{a_k \pi}{2} \\ \therefore a_k &= \left[ \frac{2}{\pi} \right] \int_0^\pi C(x) \cos(kx) dx \end{aligned}$$

Com isso, podemos escrever a expressão

$$f(\cos(\theta)) = a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos(k\theta),$$

onde

$$\begin{aligned} a_0 &= \left[ \frac{1}{\pi} \right] \int_0^\pi f(\cos(\theta)) d\theta, \\ a_k &= \left[ \frac{2}{\pi} \right] \int_0^\pi f(\cos(\theta)) \cos(k\theta) d\theta. \end{aligned}$$

Ao substituir  $f(\cos(\theta))$  na mudança de variável  $x(\theta) = \cos(\theta)$ , obtemos a fórmula geral de Clenshaw-Curtis.

$$\begin{aligned} \int_0^\pi f(\cos(\theta)) \sin(\theta) d\theta &= \int_0^\pi \left( a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos(k\theta) \right) \sin(\theta) d\theta \\ &= a_0 \int_0^\pi \sin(\theta) d\theta + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \int_0^\pi \cos(k\theta) \sin(\theta) d\theta \\ &= 2a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \left[ \frac{k \sin(\theta) \sin(k\theta) + \cos(\theta) \cos(k\theta)}{k^2 - 1} \right] d\theta \\ &= 2a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \left[ \frac{-\cos(k\pi) - 1}{k^2 - 1} \right] d\theta \\ &= 2a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \left[ \frac{(-1)^k - 1}{k^2 - 1} \right] d\theta \\ &\approx 2a_0 + \sum_{k=2,4,\dots}^N \frac{2a_k}{1 - k^2} d\theta \end{aligned}$$

Nessa fórmula  $N$  corresponde à um valor de truncamento. Para facilitar a notação, é conveniente representar  $a_0$  em função de  $a_k$ .

$$2a_0 = a_{k=0} = \tilde{a}_0$$

Assim, a aproximação  $\vartheta$  por Clenshaw-Curtis é escrita como

$$\begin{aligned}\vartheta &\approx \int_0^\pi f(\cos(\theta)) \sin(\theta) d\theta \\ \vartheta &= \tilde{a}_0 + \sum_{k=2,4,\dots}^N \frac{2\tilde{a}_k}{1-k^2} d\theta,\end{aligned}$$

onde

$$\tilde{a}_k = \left[ \frac{2}{\pi} \right] \int_0^\pi f(\theta) \cos(k\theta) dx.$$

Essa fórmula aparenta complicar o problema, a princípio, pois nela é preciso calcular várias integrais na determinação dos valores  $\tilde{a}_k$ . Porém, essas integrais são suaves e podem ser aproximadas até a precisão máxima com a fórmula do trapézio repetida em poucos subintervalos. Além disso, todas essas integrais tem o mesmo intervalo e a função inicial  $f$  será avaliada sempre nos mesmos pontos  $t_k = \cos\left(\frac{k\pi}{N}\right)$ , onde  $k$  corresponde ao número de pontos e  $N = k - 1$  o de subintervalos pela regra do trapézio.

Uma maneira conveniente de representar a fórmula de Clenshaw-Curtis é utilizando vetores. Gerando dois vetores  $\tilde{a}$  e  $W$  tais que

$$\tilde{a} = \begin{pmatrix} \tilde{a}_0 \\ \tilde{a}_1 \\ \tilde{a}_2 \\ \vdots \\ \tilde{a}_N \end{pmatrix} ; W = \begin{pmatrix} W_0 \\ W_1 \\ W_2 \\ \vdots \\ W_N \end{pmatrix} ;$$

onde  $W_0 = 1$ ,  $W_k = \frac{2}{1-k^2}$  para  $k$  par maior que zero e  $W_k = 0$  para  $k$  ímpar. Essa representação é útil pois nos permite escrever a fórmula como  $\vartheta = W.\tilde{a}$ .

A obtenção do vetor  $\tilde{a}$  pode ser feita definindo uma matriz  $V$  de dimensões  $n \times n$  na forma

$$V = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 & 1 & 1 & \cdots & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \cos \frac{\pi}{N} & \cos \frac{2\pi}{N} & \cos \frac{3\pi}{N} & \cdots & \frac{1}{2} \cos \pi \\ \frac{1}{2} & \cos \frac{2\pi}{N} & \cos \frac{4\pi}{N} & \cos \frac{6\pi}{N} & \cdots & \frac{1}{2} \cos 2\pi \\ \frac{1}{2} & \cos \frac{3\pi}{N} & \cos \frac{6\pi}{N} & \cos \frac{9\pi}{N} & \cdots & \frac{1}{2} \cos 3\pi \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2} & \cos \pi & \cos 2\pi & \cos 3\pi & \cdots & \frac{1}{2} \cos N\pi \end{pmatrix}.$$

Ao multiplicar a matriz  $V$  por um vetor  $F$

$$F = \begin{pmatrix} F(t_0) \\ F(t_1) \\ F(t_2) \\ \vdots \\ F(t_N) \end{pmatrix},$$

temos que  $\tilde{a} = V.F$ .

A utilização de vetores também nos permite escrever a fórmula na forma geral das quadraturas. Para isso é definido um vetor  $w$  de pesos  $w = V^T.W$ , e temos então a aproximação  $\vartheta$  vale  $\vartheta = w.F$ .

Deve-se notar que o vetor  $w$  não depende da função integrada, mas sim apenas do valor  $N$ . Isso permite a implementação de algoritmos que apenas geram  $F$  e o

multiplicam por um vetor  $w$  já computado, o que reduz muito o custo computacional do método.

Embora a derivação da fórmula de Clenshaw-Curtis não tenha como base um mapeamento polinomial, esse método possui relação direta com a família de polinômios de Chebyshev  $T_k(\cos(\theta)) = \cos(k\theta)$ . Os pontos  $k$  pontos onde a função é avaliada nessa fórmula correspondem aos máximos e mínimos do polinômio de Chebyshev de grau  $k$ .

## 6 Quadratura Senh-Tgh

Fórmulas de integração numérica por mapeamento eficientes fornecem aproximações de alta precisão usando um número mínimo de avaliações de função, sem grandes perdas computando os pontos e pesos. O mapeamento polinomial satisfaz essas condições para certo número de avaliações de funções mas, conforme esse número aumenta, a obtenção de mais pontos e pesos fica cada vez mais custosa.

Uma alternativa ao mapeamento polinomial é encontrar uma substituição de variável capaz de transformar a integral inicial em uma nova, com valor equivalente, mais fácil de ser resolvida. Se a integral resultante da transformação possuir o comportamento adequado, caracterizado por derivadas de baixo valor em um curto intervalo de integração, podemos obter uma boa aproximação usando até mesmo a regra do trapézio.

Temos esse comportamento quando a função transformada decai à uma taxa duplo-exponencial em torno da origem, ou seja,  $f(x(t)) \cdot \frac{dx}{dt}(t) \sim \exp(-\exp|t|)$ . Na verdade, esse decaimento é o ideal para a aproximação através da Regra do Trapézio. As fórmulas de integração numérica onde o mapeamento é feito por meio de uma substituição de variável, que busca facilitar a determinação da integral por métodos clássicos, são chamadas de fórmulas de mudança de variável.

## 6.1 Substituição Senh-Tgh

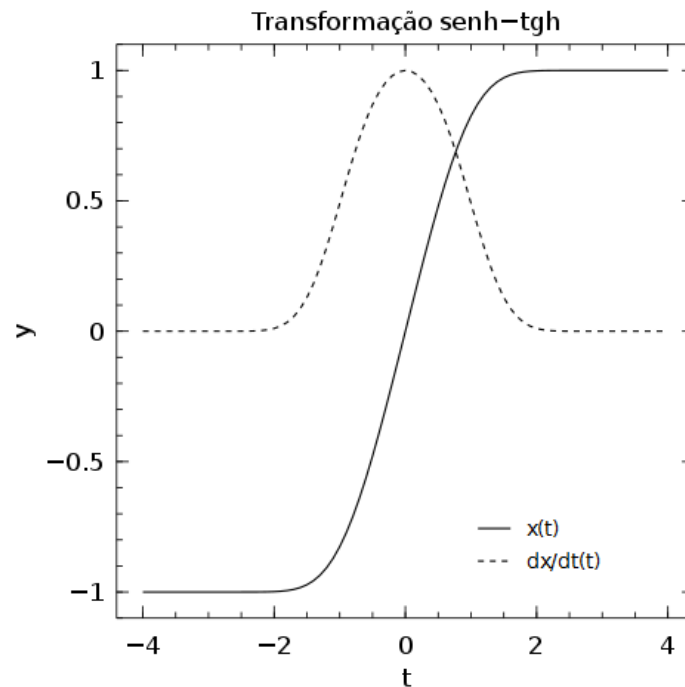
Uma das substituições que nos permite atingir aproximação ótima com a Regra do Trapézio é a seno-tangente hiperbólicas (Senh-Tgh). Essa substituição altera o intervalo  $[-1, 1]$  para  $(-\infty, +\infty)$ , e é definida por

$$x(t) = \tanh(c \cdot \sinh t)$$
$$\frac{dx}{dt}(t) = \operatorname{sech}^2(c \cdot \sinh t) \cdot c \cdot \cosh(t),$$

onde  $c$  é uma constante que pode ser substituída por valores entre 1 e  $\frac{\pi}{2}$ . Assim, a expressão da substituição Senh-Tgh é

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sech}^2(c \cdot \sinh t) \cdot c \cdot \cosh(t) \cdot f(\tanh(c \cdot \sinh t)) dt.$$

Observando o gráfico



é possível perceber que o fator  $\frac{dx}{dt}$  tende a zero rapidamente ao se distanciar da origem. Por consequência, os valores distantes da origem tornam-se desprezíveis



na aproximação da integral. Isso nos permite limitar o intervalo da integral transformada em um finito sem comprometer a precisão.

Conforme se observa no gráfico de  $x(t)$ , o valor de  $x$  fica contido intervalo  $[-1, 1]$ , ou seja, a função inicial é avaliada em um intervalo limitado de valores. Combinando isso ao rápido decaimento de  $\frac{dx}{dt}$ , a integral resultante sempre apresenta uma curva suave e pode ser aproximada com poucos subintervalos por uma Fórmula de Newton-Cotes.

A fórmula de Newton-Cotes mais adequada para aproximar integrais geradas pela mudança Senh-Tgh é a Regra do Trapézio, não havendo vantagem significativa em usar fórmulas de maior ordem. A mudança Senh-Tgh garante a convergência mais rápida possível da aproximação da integral resultante com a regra do Trapézio.

Outras informações importantes obtidas com o gráfico são que  $\frac{dx}{dt}(t) = \frac{dx}{dt}(-t)$ ,  $x(t) = x(-t)$ ,  $x(0) = 0$  e  $\frac{dx}{dt}(0) = 1$ . Aplicando essas considerações na fórmula geral da mudança Senh-Tgh, tem-se

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \left[ f(0) + \sum_{i=1}^{n-1} [f(x(i \cdot h)) + f(-x(i \cdot h))] \frac{dx}{dt}(i \cdot h) \right] h,$$

onde  $n$  é o número de pontos usados na Regra do Trapézio e  $h$  vale  $t_{i+1} - t_i$ . Generalizando o intervalo para  $[a, b]$  com a mudança  $\psi(t) = \frac{a+b+(b-a)x(t)}{2}$  temos

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} h \left\{ f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \sum_{i=1}^{n-1} \left[ f\left(\frac{a+b+(b-a)x(i \cdot h)}{2}\right) + f\left(\frac{a+b-(b-a)x(i \cdot h)}{2}\right) \right] \frac{dx}{dt}(i \cdot h) \right\}.$$

A mudança Senh-Tgh possui como grande vantagem a capacidade de resolver integrais impróprias com descontinuidades nos extremos do intervalo de integração. Devido à sua rápida convergência essa mudança também é usada para obter aproximações de grande precisão, usando precisão arbitrária.

Existem mudanças semelhantes à Senh-Tgh que podem ser aplicadas para integrais de intervalos ilimitados. Para o intervalo  $[0, +\infty)$  temos a mudança

$$x(t) = e^{2c \cdot \sinh(t)}$$

$$\frac{dx}{dt}(t) = x(t) \cdot 2c \cdot \cosh(t),$$

e para  $(-\infty, +\infty)$  aplica-se

$$x(t) = \sinh(c \cdot \sinh(t))$$

$$\frac{dx}{dt}(t) = \cosh(c \cdot \sinh(t)) \cdot c \cdot \cosh(t).$$

Onde, novamente,  $c$  pode ser substituído por valores entre 1 ou  $\frac{\pi}{2}$ . Essas substituições foram desenvolvidas com a mesma ideia, que é garantir a convergência mais rápida possível da integral resultante com a regra do Trapézio através de um decaimento duplo-exponencial da função em torno do intervalo da origem.

Essas substituições possuem a mesma lógica em sua implementação: tendo como entrada a função original a ser integrada é preciso criar uma nova integral, com a substituição de variável, e aplicar nela a Regra do Trapézio para obter a aproximação.

## 6.2 Implementação da Substituição Senh-Tgh

Para reduzir o custo computacional resultante do cálculo de  $\frac{dx}{dt}(t)$  é recomendado definir uma nova variável  $q$ , de valor  $q(t) = e^{-2 \sinh t}$ , e então reescrever o peso como

$$\frac{dx}{dt}(t) = 4 \frac{q(t)}{(1 + q(t))^2} \cosh(t),$$

o que não altera seu valor. Essa expressão pode ser obtida facilmente aplicando a relação hiperbólica abaixo

$$\operatorname{sech}(x) = 2 \frac{e^{-x}}{1 + e^{-2x}} \Rightarrow \operatorname{sech}^2(x) = 4 \frac{e^{-2x}}{(1 + e^{-2x})^2}.$$

Combinando os pesos  $\frac{dx}{dt}(t)$  e  $\frac{a+b}{2}$ , temos um peso geral  $w(t)$  tal que

$$w(t) = 2(a+b) \frac{q(t)}{(1+q(t))^2} \cosh(t).$$

Definimos então  $\delta(t)$  como

$$\delta(t) = (b-a) \frac{q(t)}{(1+q(t))}$$

e, por fim, reescrevemos a substituição na forma equivalente

$$\int_a^b f(x) dx = 2h(a+b) \left[ \frac{f\left(\frac{a+b}{2}\right)}{4} + \sum_{i=1}^{n+1} [f(a + \delta(i \cdot h)) + f(b - \delta(i \cdot h))] w(i \cdot h) \right].$$

Essa expressão pode ser obtida usando a relação hiperbólica

$$\tanh(x) = \frac{e^{-2x} - 1}{1 + e^{-2x}}$$

juntamente com algumas manipulações algébricas. Para verificar a validade disso, basta desenvolver a igualdade

$$\begin{aligned} x_j &= \frac{a+b + (b-a) \tanh(\sinh(t_j))}{2} \\ &= \frac{a+b + (b-a) \frac{q_j - 1}{1+q_j}}{2} = a + (b-a) \frac{q_j}{1+q_j} \end{aligned}$$

Um erro de cancelamento pode ocorrer nos fatores  $(a + \delta)$  e  $(b - \delta)$ . Isso se torna crítico para integrais no intervalo  $[0, 1]$ , por exemplo, onde  $f(x)$  possui uma singularidade infinita em  $x = 1$ . O erro de cancelamento ocorre se  $\delta_j$  for muito pequeno em  $(1 - \delta_j)$ . Nesse caso, se  $\delta < \epsilon$ , onde  $\epsilon$  é a precisão da máquina, a máquina irá retornar, erroneamente, que  $1 - \delta = 1$ . Uma maneira de evitar esse problema é truncar o somatório quando  $\delta_j < \epsilon$ . Isso permite que seja retornada uma aproximação para a integral, mas acaba comprometendo a precisão do método.

Esses cuidados são dispensáveis para as variações da substituição em intervalos infinitos. Para implementar essas variações, basta aplicar a regra do trapézio na função originada pela substituição.

Outra limitação da substituição Senh-Tgh, mas também da grande maioria dos métodos de integração numérica, ocorre quando ela é aplicada em intervalos infinitos para funções oscilatórias que decrescem lentamente. Um exemplo disso sendo a integral a seguir:

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2}.$$

O erro na quadratura sinh-tgh possui duas origens: a limitação da integral em um intervalo finito e o erro da aproximação pela fórmula do trapézio. Chamaremos esses erros de erro de limitação e erro de discretização, respectivamente. Usando um intervalo grande o suficiente, o erro de discretização será muito superior ao erro da limitação. Porém, também não é ideal usar um intervalo muito grande pois isso demandaria um número muito maior de avaliações de função que o necessário para atingir a precisão desejada. Denotaremos como  $[-H, H]$  o intervalo finito usado na quadratura Senh-Tgh.

É interessante notar que nas expressões de  $\delta(t)$  e  $\frac{dx}{dt}(t)$  aparece o termo  $(1+q(t))$ . Como  $q(t)$  é avaliado apenas no intervalo limitado, seu valor será mínimo quando  $t = H$ . Como  $q(t)$  decai muito rapidamente com o aumento de  $t$  seu valor irá, eventualmente, ficar menor que a precisão eps da máquina. Quando isso acontece temos um novo erro de truncamento, já que  $1 + q(t)$  será computado como 1. Esse erro é significativo e pode, inclusive, superar o erro de discretização.

Com essas considerações, uma boa alternativa é definir o valor  $H$  do intervalo limitado com base na precisão eps da máquina. Queremos limitar o valor de  $q$  em eps. Como  $q(t)$  sempre decai com o aumento de  $t$ , basta determinar  $H$  tal que  $q(H) = \text{eps}$ . Desenvolvendo  $q(H)$  obtemos a expressão para  $H$ .

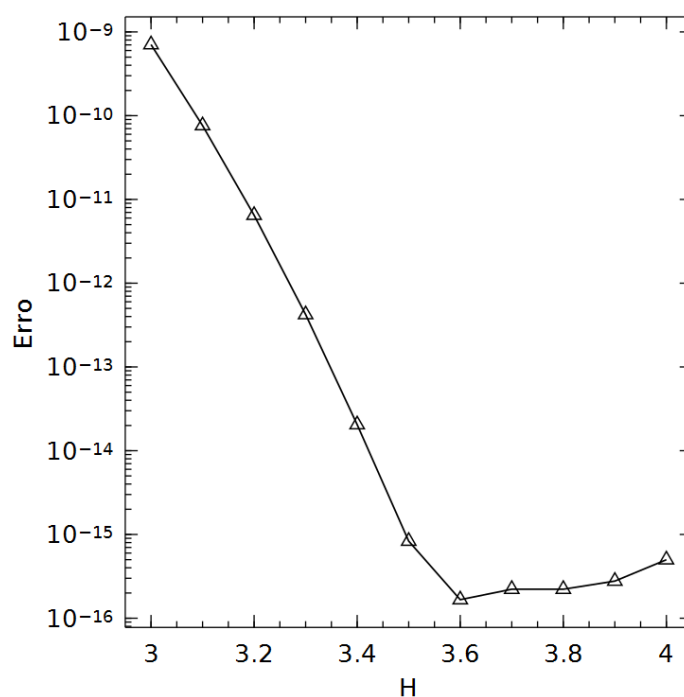
$$e^{-2 \sinh(H)} = \text{eps} \therefore H = \text{asinh} \left( -\frac{\log(\text{eps})}{2} \right).$$

O intervalo calculado por essa expressão é, na maioria das integrais, maior que o necessário para a precisão máxima possível para a precisão da máquina. Para

uma máquina de precisão  $\epsilon \approx 10^{-16}$ , por exemplo, o intervalo adequado será  $H \approx 3.6$ . Para verificar a eficiência dessa técnica, aplicamos a mudança Senh-Tgh na integral abaixo

$$\int_0^1 \frac{t}{\sqrt{t^2 + 1}} dt = \sqrt{2} - 1,$$

usando como precisão da máquina  $\epsilon = 2.2 \cdot 10^{-16}$  e diferentes intervalos finitos  $[-H, H]$  para limitar a integral transformada. O resultado pode ser observado no gráfico abaixo. Usando a expressão recomendada, o intervalo limitado ideal seria



aproximadamente  $[-3.61, 3.61]$ , o que corresponde a  $H \approx 3.61$ . É evidente que, nesse caso, a aproximação de  $H$  é eficiente. Resultados semelhantes foram obtidos para outras integrais.

Abaixo temos um exemplo de implementação da quadratura Senh-Tgh, que tem como parâmetros de entrada a função inicial, o intervalo inicial e o número de avaliações  $n$  da função feitas durante a rotina. Como o intervalo de integração

limitado é simétrico e uma das avaliações ocorre em  $t = 0$ , é preciso que  $n$  seja ímpar.

---

**Algorithm 4** Quadratura sinh-tanh

---

```

1: function SINH_TANH( $f, a, b, n$ )
2:    $\epsilon \leftarrow$  EPSILON  $\triangleright$  obtém precisão da máquina
3:    $H = \operatorname{asinh}\left(-\frac{\log(\epsilon)}{2}\right)$   $\triangleright$  obtém o intervalo limitado
4:    $h \leftarrow \frac{2*H}{n-1}$   $\triangleright$  obtém o tamanho dos subintervalos
5:    $S \leftarrow \frac{f\left(\frac{a+b}{2}\right)}{4}$   $\triangleright$  inicia soma
6:   for  $i = 1 : \frac{n-1}{2}$  do
7:      $qk \leftarrow \exp(-2 \sinh(i * h))$ 
8:      $\delta \leftarrow \frac{(b-a)*qk}{(1+qk)}$ 
9:      $w \leftarrow \frac{qk*\cosh(i*h)}{(1+qk)^2}$ 
10:    if  $\delta > \epsilon$  then  $\triangleright$  verifica precisão
11:       $S \leftarrow S + (f(a + \delta) + f(b - \delta)) * w$   $\triangleright$  continua soma
12:    end if
13:  end for
14:  return  $2S * h * (b - a)$ 
15: end function

```

---

## 7 Comparações

### 7.1 Método Comparativo

Com objetivo de comparar a eficiência de diferentes métodos de integração numérica na aproximação de integrais definidas próprias, foram construídos gráficos que relacionam o erro das aproximações de cada uma das funções abaixo para uma variedade definida de número de avaliações  $N_f$  da função durante a rotina.

A precisão  $\epsilon$  usada na máquina foi  $\epsilon \approx 7.45 \cdot 10^{-121}$ , procurando evitar que erros de truncamento afetem as comparações até a precisão observada. Para facilitar o entendimento dos gráficos o eixo  $y$  foi limitado até o valor mínimo de  $10^{-100}$ , sendo que nos casos onde o erro é inferior a esse valor ele é plotado como sendo igual a ele.

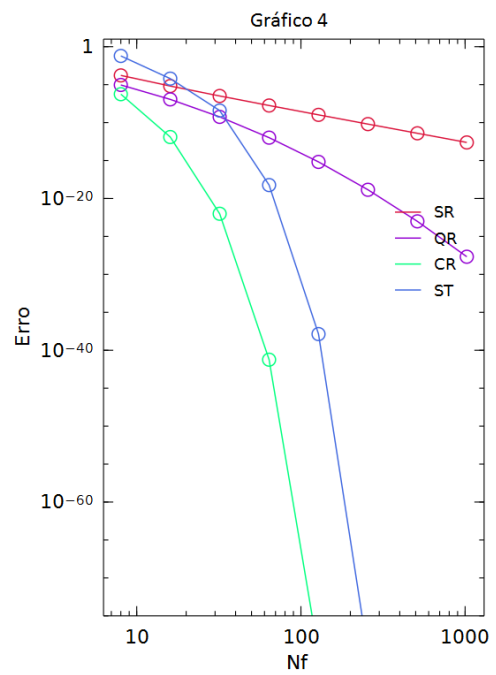
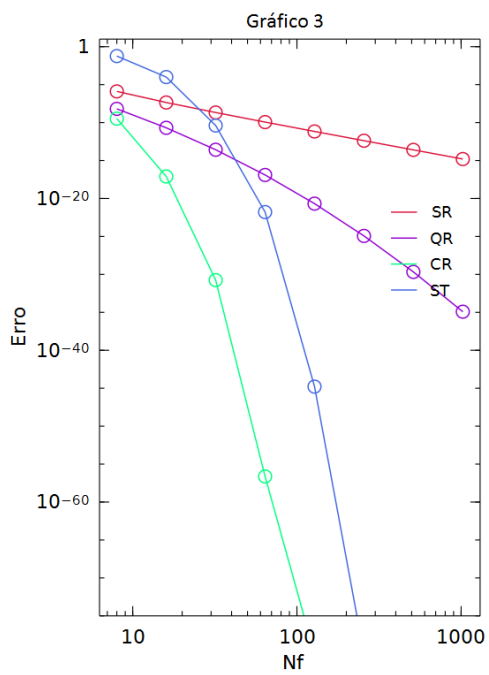
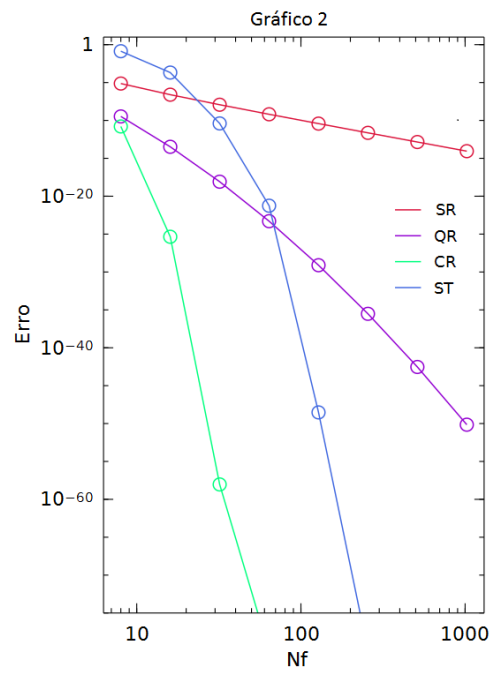
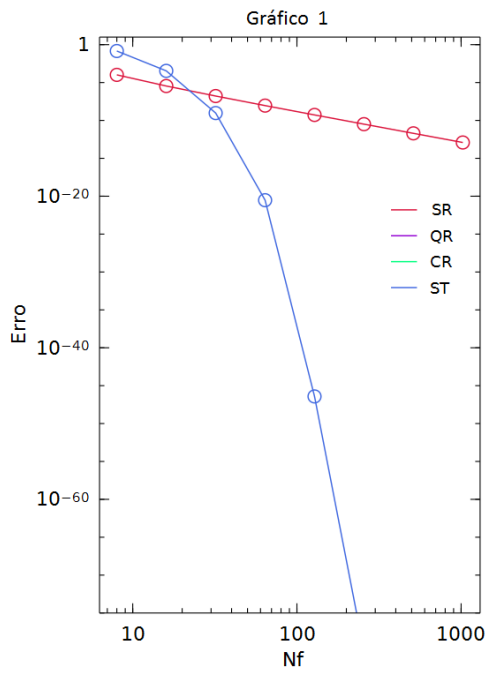
Os métodos de integração usados nessa comparação foram a Regra de Romberg, a Regra de Simpson, a Quadratura de Clenshaw e a Quadratura Senh-Tgh, enquanto que as avaliações de função foram variadas na forma  $2^k$ , com  $k = 3, 4, \dots, 10$ . A implementação da quadratura Senh-Tgh foi feita conforme o pseudo-código apresentado anteriormente.

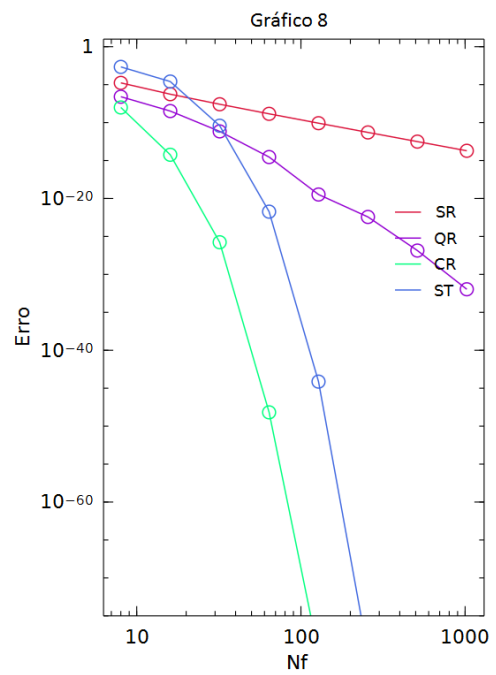
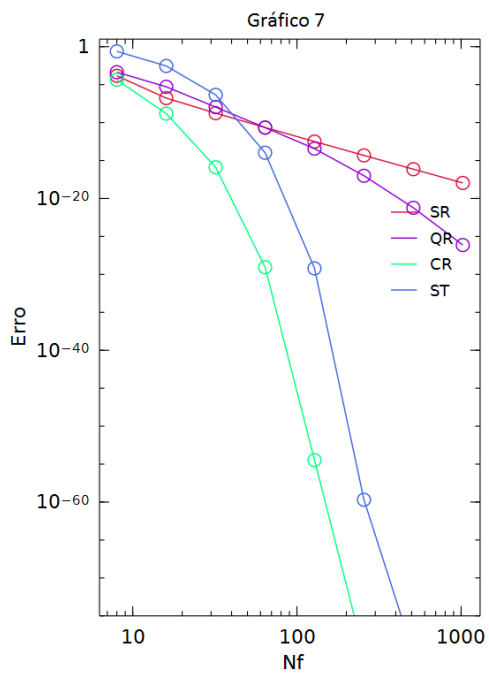
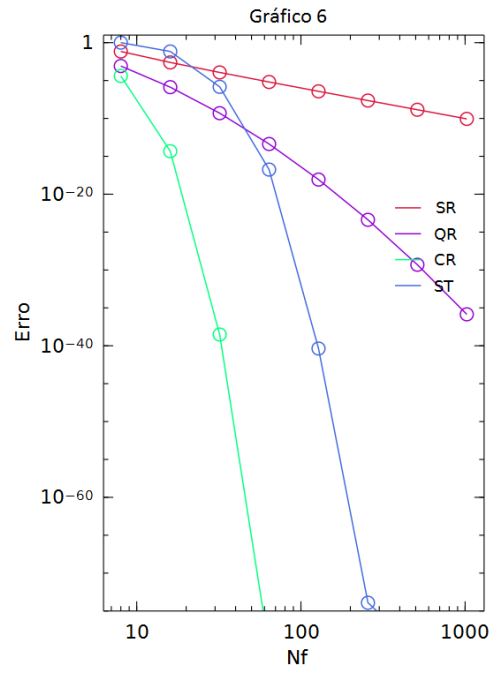
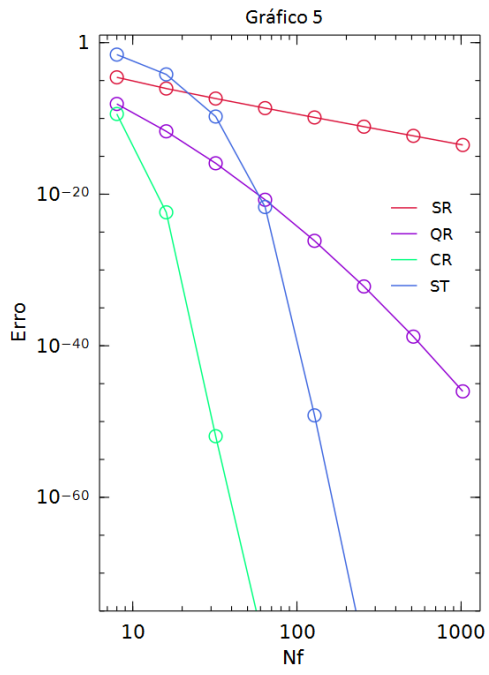
$$\begin{aligned}
1 : \int_0^1 (t^4 - 3t^3 + 1) dx &= \frac{9}{20} \\
2 : \int_0^1 e^t dx &= e - 1 \\
3 : \int_1^2 \sqrt{t} dx &= \frac{2(2\sqrt{2} - 1)}{3} \\
4 : \int_1^2 \frac{1}{2t - 1} dx &= \frac{\ln 3}{2} \\
5 : \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin t dx &= 1 \\
6 : \int_0^{\frac{3}{2}} t^3 e^{2t} dx &= \frac{3(1 + 2e^3)}{8} \\
7 : \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \frac{t}{2} dx &= 2\sqrt{2} \\
8 : \int_0^1 \frac{x}{\sqrt{x^2 + 1}} dx &= \sqrt{2} - 1 \\
9 : \int_0^1 t \log(1 + t) dx &= \frac{1}{4} \\
10 : \int_0^1 t^2 \arctan t dx &= \frac{\pi - 2 + \log 4}{12} \\
11 : \int_0^{\frac{\pi}{2}} e^t \cos t dx &= \frac{e^{\frac{\pi}{2}} - 1}{2} \\
12 : \int_0^1 \frac{\arctan \sqrt{2 + t^2}}{(1 + t^2)\sqrt{2 + t^2}} dx &= \frac{5\pi^2}{96} \\
13 : \int_0^1 \frac{10t^3 - 5t}{\sqrt{t^4 - t^2 + 6}} dx &= 0 \\
14 : \int_0^1 t^5 e^{1-t^6} dx &= \frac{e - 1}{6}
\end{aligned}$$

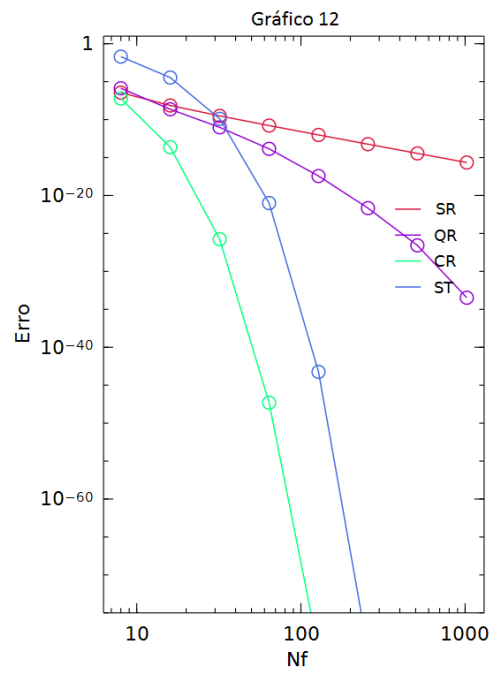
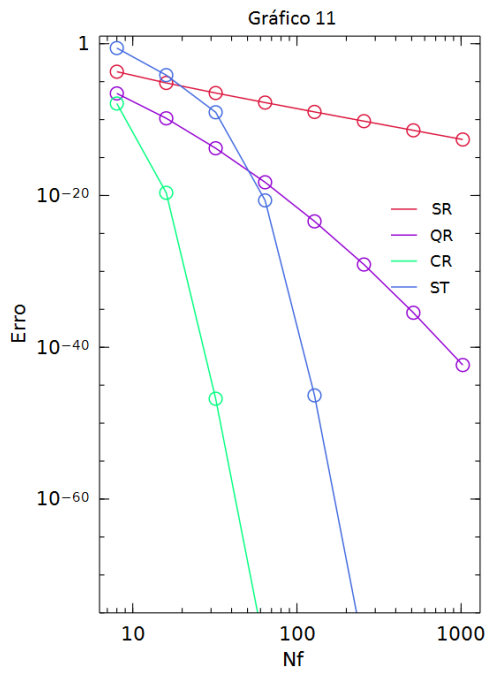
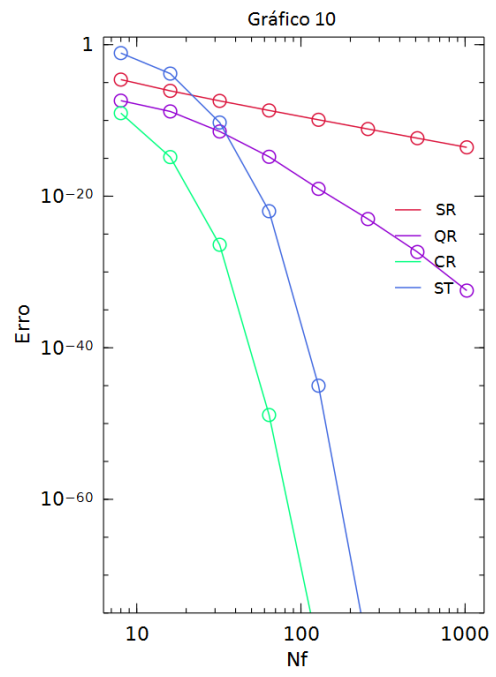
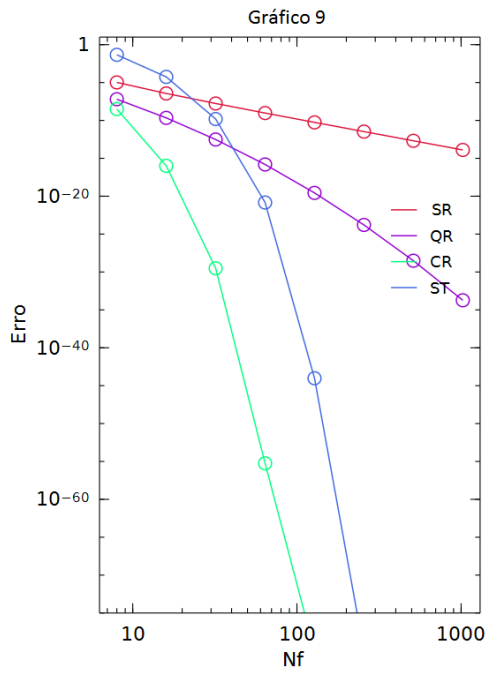
## 7.2 Resultados e Discussão

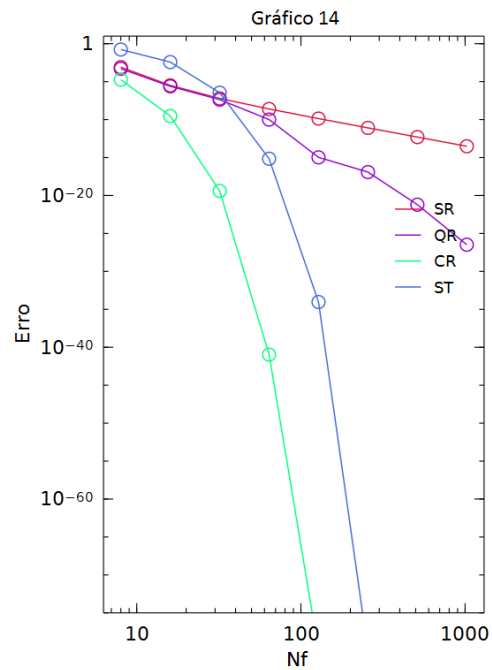
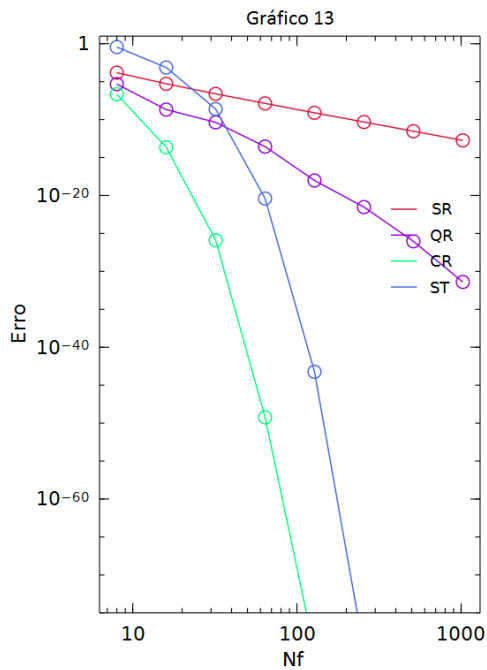
A seguir se encontram os gráficos comparativos dos métodos. O número de cada gráfico corresponde ao número da função comparada.











Os gráficos comparativos para as 14 funções escolhidas deixam claro, primeiramente, que o método mais eficiente para aproximar integrais definidas usando o menor número possível de avaliações de função é a quadratura de Clenshaw-Curtis. Se for desejável uma precisão muito alta, com erro inferior à  $10^{-20}$ , tanto a quadratura de Clenshaw-Curtis quanto quadratura Senh-Tgh são as melhores opções.

O comportamento do erro para a quadratura Senh-Tgh mostra um comportamento curioso. Para valores pequenos de Nf, no geral inferior a 32, a mudança Senh-Tgh apresenta erro superior ao obtido pela regra de Simpson nas mesmas condições. Porém, ao utilizar mais avaliações da função, o erro da quadratura Senh-Tgh decai de forma surpreendente, a uma taxa semelhante ao da quadratura Clenshaw-Curtis.

O motivo pelo qual a quadratura Senh-Tgh é ineficiente para poucas avaliações de função é que transforma a integral para um intervalo maior que o original, o

que aumenta significativamente o erro de descritização.

## 8 Conclusão

Todos os métodos derivados nesse trabalho puderam ser implementados e funcionaram conforme sugere a literatura. Na comparação para aproximação de integrais próprias quanto ao número de avaliações de função, se destacaram os métodos de Clenshaw-Curtis e a substituição Senh-Tgh para alta precisão.

Para uma análise mais completa do método Senh-Tgh é preciso estudar a derivação das substituições exponencial e duplo-exponencial, além do erro das fórmulas resultantes. Já na aproximação de integrais impróprias, seria adequado o estudo e a implementação de outra fórmula robusta para comparação, como a Fórmula do Erro.

Precisamos considerar também que o número de avaliações de função não é o critério ideal para comparar a eficiência desses métodos pois aqueles que fazem mapeamento polinomial, por exemplo a quadratura de Clenshaw-Curtis, tem alto gasto computacional na determinação dos pontos e pesos, principalmente para altas precisões. Para levar em conta isso é preciso fazer uma nova comparação, levando em conta o tempo decorrido durante a rotina computacional para obter determinada precisão com o método.

Seria interessante também estudar a possibilidade de melhorar o mapeamento do método Senh-Tgh através da inclusão de um método adaptativo na aplicação da Regra do Trapézio na integral transformada. Isso pois como a função decai muito rapidamente - com uma taxa duplo-exponencial - aparenta que seria mais eficiente usar um maior número de pontos próximos da origem do que distantes dela.

A inclusão de um método adaptativo permitiria também a possibilidade de

fornecer um limitante para o erro do resultado fornecido, o que amplia as possíveis aplicações do método.

## Referências

- [1] R. L. Burden e J. D. Faires. *Numerical analysis*. Pacific Grove: Brooks/Cole, 9ª ed., 2011.
- [2] M. Mori. Quadrature formulas obtained by variable transformation and the de-rule. *Journal of computational and applied mathematics*, 1985.
- [3] W. H. Press, S. H. Teukolsky, W. T. Vetterling e B. P. Flannery. *Numerical recipes*. Cambridge University Press, 3ª ed., 2007.
- [4] M. A. G. Ruggiero e V. L. d. Rocha Lopes. *Cálculo numérico - aspectos teóricos e computacionais*. Editora Pearson, 2ª ed., 1997.
- [5] The julia language. URL: <http://julialang.org/>.