EP 1 - Métodos de Integração Numérica
IME USP - Fundamentos de Análise Numérica

Alexsander Benatti da Silva
14555221
alexsander.benatti@usp.br

Ana Paula Tavares da Fonseca
8557207
ana.paula.fonseca@usp.br

Resumo

Neste Exercício Programa vamos utilizar os métodos do trapézio, de Simpson e de Romberg para aproximar o valor da integral de uma função. Para o cálculo das integrais $\int_0^1 x^2 dx$ e $\int_0^{0.907} e^{x^2} dx$, o método de Romberg obteve resultados bastante satisfatórios, chegando a um valor muito próximo do verdadeiro e com apenas metade de iterações, em comparação aos outros métodos.

1 Introdução e Conceitos

O Método dos Trapézios é uma técnica para integração numérica, ou seja, para aproximar a integral definida:

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

Este método funciona aproximando a região sob o gráfico da função $f(x)$ como um trapézio e calculando sua área. Dessa forma, temos:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\cdot\frac{1}{2}\left(f(a)+f(b)\right).$$

Esta abordagem pode ser vista como o resultado obtido ao calcular a média das somas de Riemann à esquerda e à direita. A integral pode ser ainda mais bem aproximada dividindo o intervalo de integração, aplicando a regra dos trapézios a cada subintervalo e somando os resultados (Atkinson, 1991).

A Regra de Simpson é baseada na ideia de aproximar a função $f(x)$ por uma parábola (uma função quadrática) que passa por três pontos: $f(a)$, $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ e $f(b)$. A fórmula para a Regra de Simpson pode ser derivada utilizando a interpolação quadrática para esses três pontos e integrando o polinômio resultante. A fórmula básica da Regra de Simpson para a aproximação da integral $\int_a^b f(x)dx$ é:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

A maior precisão da regra de Simpson em relação à regra dos trapézios pode ser explicada pelo fato de que a regra de Simpson inclui uma avaliação no ponto médio, o que proporciona um melhor equilíbrio à aproximação (Burden and Faires, 2011).

O método de Romberg consiste em usar a extrapolação de Richardson para construir métodos de maior ordem a partir do métodos dos trapézios para o intervalo $[a, b]$ (de Matemática,). A extrapolação pode ser aplicada quando se sabe que uma técnica de aproximação possui um termo de erro previsível, que depende de um parâmetro, geralmente o tamanho do passo h. Suponha que temos uma fórmula $N_1(h)$ que aproxima uma constante desconhecida M, e que o erro de truncamento segue a forma

$$M - N_1(h) = K_1h + K_2h^2 + K_3h^3 + \dots$$

O objetivo da extrapolação é combinar essas aproximações de ordem $O(h)$ de maneira a produzir fórmulas com erro de truncamento de ordem superior, como $O(h^2)$, $O(h^3)$, e assim por diante, melhorando progressivamente a precisão (Burden and Faires, 2011). O método de Romberg inicia aplicando a regra dos trapézios com um número inicial de subintervalos e, em seguida, aprimora a estimativa utilizando uma técnica de extrapolação para minimizar o erro. Costuma-se construir uma tabela triangular em que a primeira coluna é dada pela fórmula dos trapézios, e as colunas seguintes são construídas com a relação de recorrência. O erro associado a T(m,j) é da ordem h^{2j} e o termo mais preciso da tabela é T(M,M) (Aguiar,).

2 Implementação e testes

Os algoritmos foram implementados em Python, e foram utilizadas as bibliotecas NumPy e Sympy, esta última utilizada para as expressões simbólicas na entrada das funções, o que, embora demande mais recursos computacionais, oferece maior flexibilidade. Dentro da biblioteca Sympy, foram utilizadas as funções `diff`, para calcular a derivada de uma expressão simbólica em relação a uma variável; `symbols`, que cria objetos simbólicos, que são usados para representar variáveis em expressões matemáticas; E `lambdify`, que transforma a expressão simbólica em uma função Python, de modo a poder ser avaliada em valores numéricos específicos.

2.1 Implementação

2.1.1 Método dos Trapézios

Vamos implementar o Método dos Trapézios com refinamento progressivo, onde a integral é inicialmente calculada para o intervalo $[a, b]$ inteiro e, em seguida, é refinada em cada iteração ao adicionar mais pontos intermediários. Para $i = 0$, a função retorna a integral aproximada usando os extremos $[a, b]$

$$T_0 = \frac{f(a) + f(b)}{2}(b - a)$$

Calcula-se novos pontos intermediários dentro do intervalo $[a, b]$ através de:

$$x_j = a + (2j - 1)\Delta_i$$

Em que j são os novos pontos que aparecem na i-ésima iteração, e varia de 1 até 2^{i-1}. O valor da integral é atualizado conforme

$$T_i = \frac{T_{i-1}}{2} + \Delta_i \sum_{j=1}^{2^{1-1}} f(x_j)$$

O processo é repetido até a integral esteja refinada o suficiente para i iterações. Isso aumenta a precisão da aproximação da integral. O cálculo do erro é baseado na segunda derivada da função $f(x)$ em pontos específicos dentro do intervalo. Define-se um número fixo, 100, chamados de “pontos exóticos”ξ, que serão utilizados para encontrar o erro máximo dentro do intervalo $[a, b]$. A segunda derivada é avaliada nos 100 pontos ξ e pegamos o valor máximo M encontrado nestas avaliações, garantindo que o erro estimado seja conforme o pior cenário possível. O erro estimado é calculado segundo a fórmula:

$$\text{Erro} = -\frac{(b - a)\Delta_i^2 M}{12}$$

2.1.2 Método de Simpson

A função `simps` implementa o Método de Simpson para integrar numericamente uma função $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ usando $2i$ subintervalos. Para $i = 0$ a função retorna a integral aproximada usando a fórmula básica do Método de Simpson, que é aplicada a três pontos: os extremos a e b do intervalo, e o ponto médio $\frac{a+b}{2}$, de acordo com a fórmula:

$$\text{Simp}_0 = \frac{b - a}{3}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a + b}{2}\right) + f(b)\right)$$

Para o caso de $i > 0$, divide-se o intervalo $[a, b]$ em $2i$ subintervalos de largura Δ_n, com $x_0 = a, x_{2i} = b$. São gerados $2i + 1$ pontos $x_0, \ldots, x_{2i}$, que são os pontos em que a função $f(x)$ será avaliada, e que estão distribuídos uniformemente entre $[a, b]$. A função calcula os termos intermediários da soma ponderada na fórmula do Método de Simpson. A sequência de pesos $(4, 2, 4, 2, \ldots)$ é aplicada aos valores de $f(x)$ nos pontos $(x_1, x_2, \ldots, x_{2i-1})$. O peso de 4 é aplicado nos pontos ímpares j ímpar) e o peso de 2 nos pontos pares j par). Em seguida é calculada a soma soma total, que inclui os valores de $f(x)$ nos extremos x_0 e x_{2i}, com peso 1, e a soma ponderada dos valores intermediários. Finalmente, a integral aproximada é calculada multiplicando a soma ponderada pelo fator $\frac{\Delta_n}{3}$, de acordo com a fórmula do Método de Simpson. Esse método fornece uma aproximação da integral que é geralmente mais precisa do que o Método dos Trapézios, especialmente para funções suaves.

A função que avalia o erro desta função é similar à função que calcula o erro para o Método dos Trapézios. A diferença é que é avalia-se a quarta derivada nos 100 pontos ξ. O erro estimado é dado por:

$$\text{Erro} = -\frac{(b - a)^5}{2880n^4}M$$

Em que n corresponde ao número de subintervalos e a constante 2880 é um fato de ajuste.

2.1.3 Método de Romberg

A função calcula a primeira entrada da tabela de Romberg, $T_{0,0}$, utilizando a Regra dos Trapézios com apenas um intervalo. Esta é a aproximação mais simples da integral de $f(x)$ no intervalo $[a, b]$. Para cada linha da tabela de Romberg, um loop calcula $T_{i,k}$ que é o valor da integral aproximado, e que utiliza a aproximação anterior para dividir o intervalo em mais subintervalos, de modo a melhorar a precisão. Verifica-se caso a diferença entre os dois últimos valores calculados na linha, $T_{i,i}$ e $T_{i,i-1}$ é menor que a tolerância do erro e, fixada em 0.0005. Caso for, o loop para uma vez que a aproximação é considerada suficientemente precisa.

2.2 Testes

Obs: na exibição da tabela de Romberg os valores foram arredondados para 5 casas decimais, para proporcionar uma exibição melhor. O resultado final manteve-se sem arredondamento.

$\int_0^1 x^2 dx$

```
Método dos Trapézios:
Número de iterações: 6
Valor aproximado da integral:
 ↪  0.33349609375
Erro máximo:
 ↪  0.00016276041666666666

Método de Simpson:
Número de iterações: 6
Valor aproximado da integral:
 ↪  0.3333333333333333
Erro máximo: 0.0

Método de Romberg:
0.5
0.375 0.3333333333333333
0.34375 0.3333333333333333
 ↪  0.3333333333333333
Número de iterações: 3
Valor aproximado da integral:
 ↪  0.3333333333333333
```

$\int_0^{0.995} \frac{1}{1-x} dx$

```
Método dos Trapézios:
Número de iterações: 17
Trapz: 5.298318134888644
Erro máximo:
 ↪  0.0003058074895913598

Método de Simpson:
Número de iterações: 17
Simps: 5.298317551231815
Erro máximo:
 ↪  0.00014783059564584905

Método de Romberg:
99.9975
50.9888 34.65257
26.80581 18.74481 17.6843
15.03363 11.10957 10.60055
 ↪  10.48811
9.44824 7.58644 7.35156 7.29999
 ↪  7.28749
6.91993 6.07716 5.97654 5.95471
 ↪  5.94944 5.94813

Número de iterações: 6
Valor aproximado da integral:
 ↪  5.948129976746139
```

$\int_0^{0.907} e^{x^2} dx$

```
Método dos Trapézios:
Número de iterações: 7
Trapz: 1.2314027949173942
Erro máximo:
 ↪  0.0001828340955193909

Método de Simpson:
Número de iterações: 7
Simps: 1.2313681251937771
Erro máximo:
 ↪  0.00011810538937094442

Método de Romberg:
Intervalo de confiança:
 ↪  [1.2302819227528534,
 ↪  1.2324889973583177]
1.4859
1.3 1.23804
1.24889 1.23185 1.23144

Número de iterações: 3
Valor aproximado da integral:
 ↪  1.2314389161996313
```

2.3 Sugestão estatística para melhorar a precisão do método de Romberg

Podemos ver pelos resultados dos testes que o método de Romberg pode não ser tão preciso quanto os outros, a exemplo do teste usando $f(x) = 1/(1-x)$. Assim, uma sugestão para melhorarmos tal precisão seria usar como referência um intervalo de confiança, IC, feito da seguinte maneira:

- Supomos que o valor verdadeiro da integral esteja num intervalo $IC = [\bar{X} - \Delta x, \bar{X} + \Delta x]$, onde $\bar{X}$ é a média dos valores obtidos nos métodos do trapézio e de Simpson e Δx uma amplitude de erro aceitável.

- Definimos que $\mathbb{P}(X \in IC) = 99\%$, ou seja, a probabilidade de que o valor verdadeiro da integral, X, está no intervalo é 99%. Tendo assim:

$$\mathbb{P}(\bar{X} - \Delta x \leq X \leq \bar{X} + \Delta x) =$$
$$= \mathbb{P}\left(\frac{-\Delta x}{\frac{s}{\sqrt{n}}} \leq \frac{X - \bar{X}}{\frac{s}{\sqrt{n}}} \leq \frac{\Delta x}{\frac{s}{\sqrt{n}}}\right) =$$
$$= \mathbb{P}\left(\frac{-\Delta x}{\frac{s}{\sqrt{n}}} \leq T_{(n-1)} \leq \frac{\Delta x}{\frac{s}{\sqrt{n}}}\right) = 0,99$$

  Onde $T_{(n-1)}$ é a estatística T de Student com $n-1 = 1$ grau de liberdade, $n = 2$ a quantidade de daods que temos e s a variância amostral dos dados.

- Segundo a tabela de distribuição t de Student, temos que:

$$\frac{\Delta x}{\frac{s}{\sqrt{n}}} = t_c = 63,66$$
$$\Rightarrow \boxed{\Delta x = \frac{s}{\sqrt{n}} t_c}$$

- Assim, podemos definir nosso intervalo de confiança e, após a condição de parada $|T_{nn} - T_{n,n-1}| \leq e * |T_{nn}|$, inserimos mais uma condição para verificar se $T_{nn} \in IC$. Pois assim a tabela só será completa quando obtivermos um valor mais preciso para a integral.

2.3.1 Testes do método de Romberg com IC

$\int_0^1 x^2 dx$

```
Método de Romberg:
Intervalo de confiança:
 ↪  [0.32823404947916607,
 ↪  0.3385953776041672]
0.5
0.375 0.33333
0.34375 0.33333 0.33333

Número de iterações: 3
Valor aproximado da integral:
 ↪  0.3333333333333333
```

$\int_0^{0.995} \frac{1}{1-x} dx$

```
Método de Romberg:
Intervalo de confiança:
 ↪  [5.298299265263346,
 ↪  5.2983364208571135]
99.9975
50.9888 34.65257
26.80581 18.74481 17.6843
15.03363 11.10957 10.60055
 ↪  10.48811
9.44824 7.58644 7.35156 7.29999
 ↪  7.28749
6.91993 6.07716 5.97654 5.95471
 ↪  5.94944 5.94813
5.86352 5.51138 5.47367 5.46568
 ↪  5.46377 5.46329 5.46317
5.47188 5.34133 5.32999 5.32771
 ↪  5.32717 5.32704 5.32701 5.327
5.34621 5.30432 5.30185 5.3014
 ↪  5.3013 5.30128 5.30127
 ↪  5.30127 5.30127
5.31073 5.2989 5.29854 5.29849
 ↪  5.29848 5.29847 5.29847
 ↪  5.29847 5.29847 5.29847
5.30145 5.29836 5.29833 5.29832
 ↪  5.29832 5.29832 5.29832
 ↪  5.29832 5.29832 5.29832
 ↪  5.29832

Número de iterações: 11
Valor aproximado da integral:
 ↪  5.298320987199621
```

$\int_0^{0.907} e^{x^2} dx$

```
Método de Romberg:
Intervalo de confiança:
 ↪  [1.2302819227528534,
 ↪  1.2324889973583177]
1.4859
1.3 1.23804
1.24889 1.23185 1.23144

Número de iterações: 3
Valor aproximado da integral:
 ↪  1.2314389161996313
```

2.3.2 Observações sobre a melhoria

A motivação para aplicarmos essa melhoria era a obtenção de uma estimação mais precisa principalmente para integrais como no caso $f(x) = 1/(1-x)$. Comparando as duas versões (sem e com IC) podemos notar que:

- O número de iterações foi maior quando aplicamos a condição do valor estar no intervalo de confiança;

- Considerando um erro relativo $|\bar{X} - X|/\bar{X}$, onde $\bar{X}$ é a média que usamos anteriormente e X o valor final de cada teste, analisamos que o erro relativo para a integral da função $f(x) = 1/(1-x)$ **sem IC** foi de aproximadamente $12,26\%$, em contrapartida, o teste **com IC** teve um erro relativo de aproximadamente $0,00005934\%$, muito menor quando comparado com o anterior.

Referências

Carlos Aguiar. O método de romberg. `https://www.if.ufrj.br/~carlos/fiscomp/calcnum/romb/romb.html`. Acessado 06/09/2024.

Kendall Atkinson. 1991. *An introduction to numerical analysis*. John wiley & sons.

Richard L Burden and J Douglas Faires. 2011. *Numerical Analysis*. Brooks/Cole Cengage Learning.

UFRGS IME Recursos Educacionais Abertos de Matemática. Método de romberg. `https://www.ufrgs.br/reamat/CalculoNumerico/livro-sci/in-metodo_de_romberg.html`. Acessado 06/09/2024.