Introdução ao Cálculo Numérico

Integração numérica

(regras do trapézio, Simpson e Romberg; quadratura de Gauss-Legendre)

Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
UFRGS

Prof. Rudnei Dias da Cunha

Integração numérica

- É um processo computacional que busca calcular $\int_a^b f(x)dx$, substituindo $f(x)$ por uma função $g(x) \cong f(x)$, tal que $g(x)$ seja mais amena à integração (p.ex., $g(x)$ é um polinômio),

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \big(g(x) + e(x)\big)dx = \int_a^b g(x)dx + E \qquad (1)$$

onde $e(x)$ é o erro devido à aproximação de $f(x)$ por $g(x)$ e $E = \int_a^b e(x)dx$.

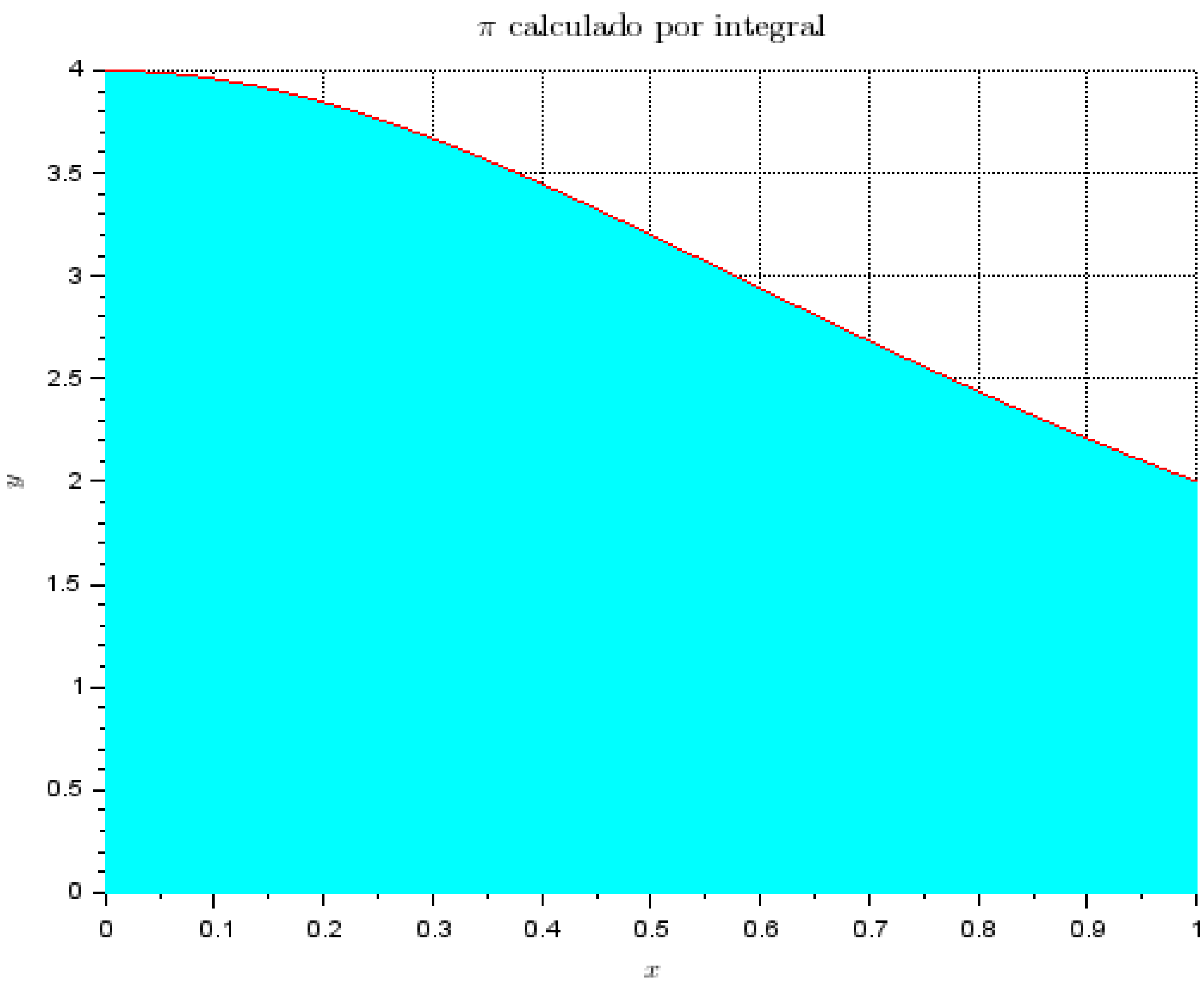
Problema modelo

- Para ilustrar as diferentes formas de integração numérica que abordaremos, usaremos como problema modelo a integral

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,dx = 4\tan^{-1} x\Big|_0^1 = \pi. \qquad (2)$$

- O gráfico da função integranda e da área abaixo da sua curva no intervalo de integração é mostrado a seguir:

Problema modelo



Integração numérica por interpolação polinomial

Fórmula de Newton-Cotes

Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA UFRGS

Integração numérica por interpolação polinomial

- Para calcular o polinômio interpolador que substituirá a função integranda, tomamos os limites de integração a e b como os extremos de um intervalo $[a; b]$, e dividimo-lo em subintervalos $[x_0; x_1]$, $[x_1; x_2]$, ..., $[x_{n-1}; x_n]$, tais que os nós x_i satisfaçam

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Integração numérica por interpolação polinomial

- De posse desses nós, podemos interpolar $f(x)$ usando os polinômios de Lagrange,

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x), l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \tag{3}$$

Integração numérica por interpolação polinomial

- Podemos agora substituir $f(x)$ por $p(x)$ na integral $\int_a^b f(x)dx$, obtendo

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\cong \int_a^b p(x)dx = \\ &\cong \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\int_a^b l_i(x)dx = \\ &\cong \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \qquad (4)\end{aligned}$$

onde $A_i = \int_a^b l_i(x)dx$.

Integração numérica por interpolação polinomial

- A fórmula anterior é conhecida como *fórmula de Newton-Cotes*, se os nós x_i forem igualmente espaçados.
- A partir dessa fórmula, podemos obter várias *regras de integração*, como as do *trapézio* e de *Simpson.*

Regras do Trapézio

Simples, Composta e Composta Uniforme

Regra do Trapézio

- Se substituirmos $f(x)$ por um polinômio de grau 1 (i.e., uma reta), os polinômios interpoladores são

$$l_0(x) = \frac{b-x}{b-a}, l_1(x) = \frac{x-a}{b-a}$$

de onde A_0 e A_1 são obtidos como

$$A_0 = \int_a^b l_0(x)dx = \frac{(b-a)}{2} = \int_a^b l_1(x)dx = A_1. \qquad (5)$$

Regra do Trapézio

- E, portanto, podemos escrever

$$T(a;b) = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{b-a}{2}\big(f(a) + f(b)\big), \qquad (6)$$

a qual define a *regra do trapézio.*

- O erro de truncamento associado à regra do trapézio é dado por

$$E_{T(a;b)} \leq \frac{(b-a)^3}{12} \max_{a \leq x \leq b} |f''(x)|. \qquad (7)$$

Regra do Trapézio

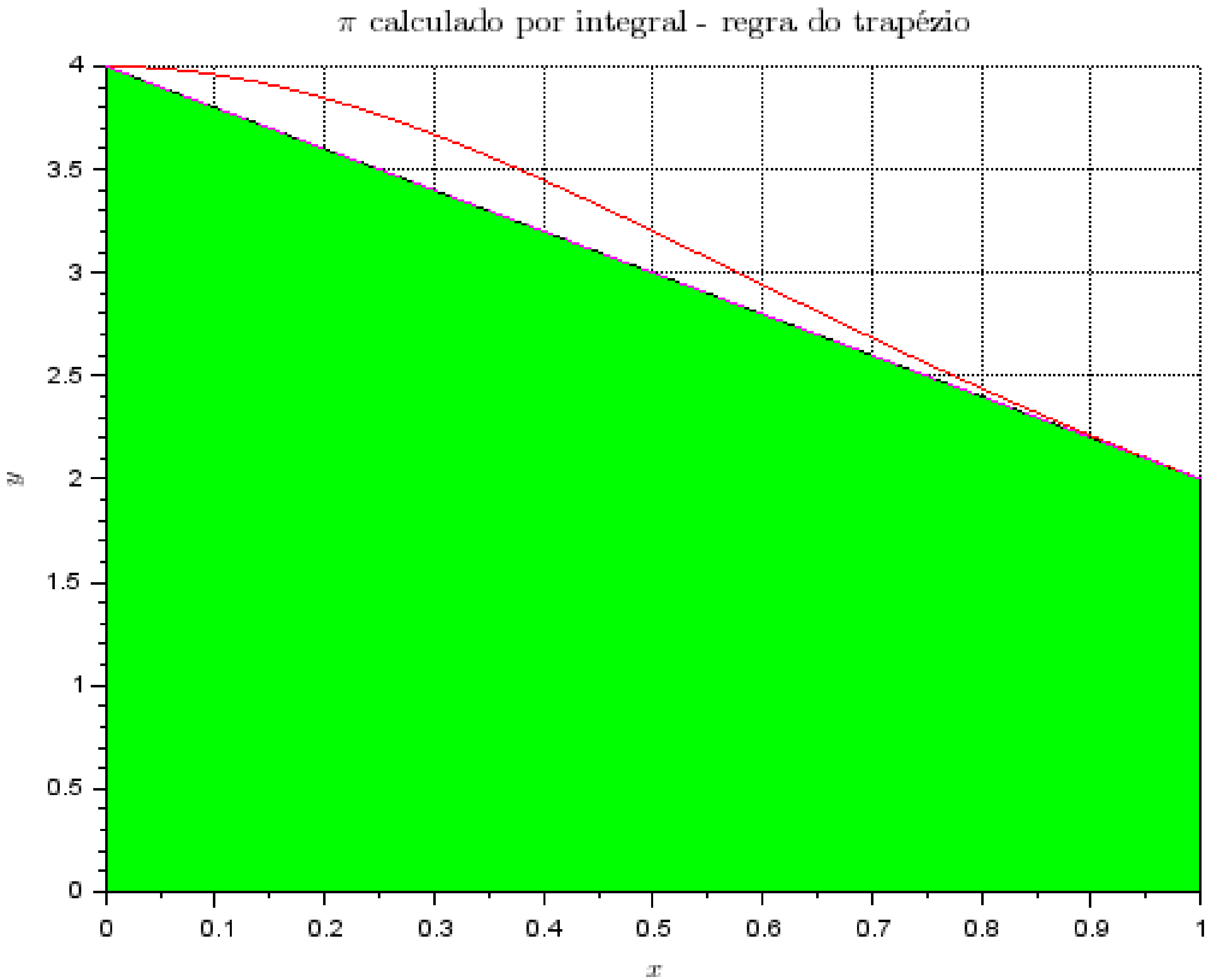
- Aplicando a regra do trapézio ao problema modelo, obtemos:

$$T(0;1) = \frac{1}{2}(f(0) + f(1)) = \frac{2+4}{2} = 3$$

e o erro relativo entre essa aproximação e a solução exata é

$$e_r = \frac{|\pi - T(0;1)|}{\pi} = 4{,}507034 \times 10^{-2}.$$

Regra do Trapézio



Regra Composta do Trapézio

- O erro associado à regra do trapézio pode ser reduzido se dividirmos o intervalo $[a; b]$ em subintervalos $[x_0; x_1]$, $[x_1; x_2]$, ..., $[x_{n-1}; x_n]$, com $x_0 = a$ e $x_1 = b$, e aplicarmos individualmente a regra do trapézio em cada subintervalo.
- Note que os nós x_i podem ser obtidos de forma **arbitrária**, ou podem ser **distribuídos uniformemente** no intervalo $[a; b]$:
  - Deve haver **maior concentração** de nós nas regiões de **maior variação** da função.

Regra Composta do Trapézio

- A regra composta do trapézio pode ser expressa então como

$$\int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=1}^{n} T(x_{i-1}; x_i\ ) \\ = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(x_i - x_{i-1})\big(f(x_{i-1}) + f(x_i)\big) \qquad (8)$$

ou, de maneira equivalente,

$$T_c(\{x_i\}) = T(x_0; x_1) + \cdots + T(x_{n-1}; x_n) \qquad (9)$$

Regra Composta do Trapézio

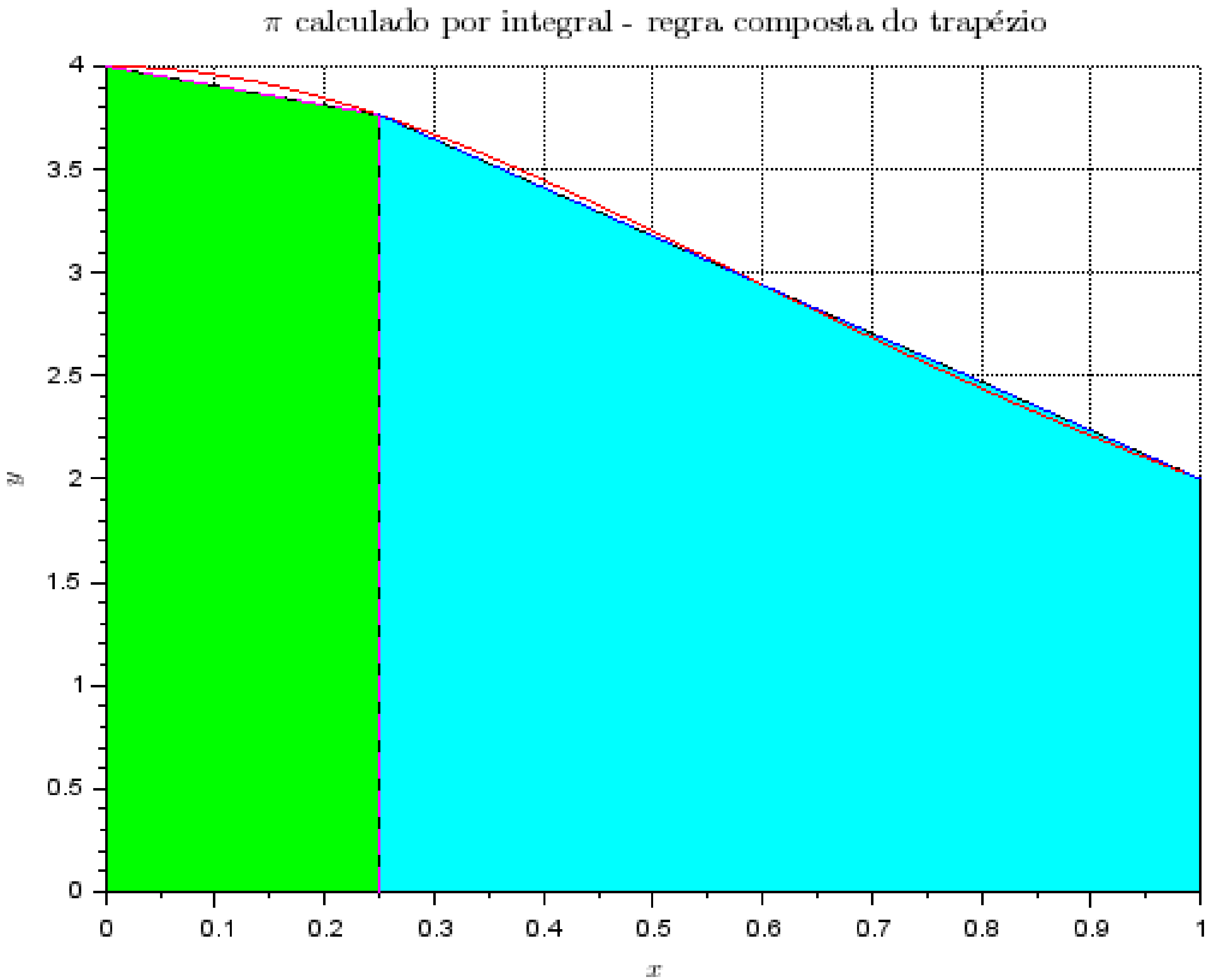
- Aplicando a regra composta do trapézio ao problema modelo, usando os nós $x_0 = 0$, $x_1 = 0{,}25$ e $x_2 = 1$, obtemos:

$$T_c(\{0; 0{,}25; 1\}) = T(0; 0{,}25) + T(0{,}25; 1)$$
$$= 3{,}13235294118$$

e o erro relativo entre essa aproximação e a solução exata é

$$e_r = \frac{|\pi - T_c(\{0; 0{,}25; 1\})|}{\pi} = 2{,}941092 \times 10^{-3}$$

Regra Composta do Trapézio



Regra Composta do Trapézio

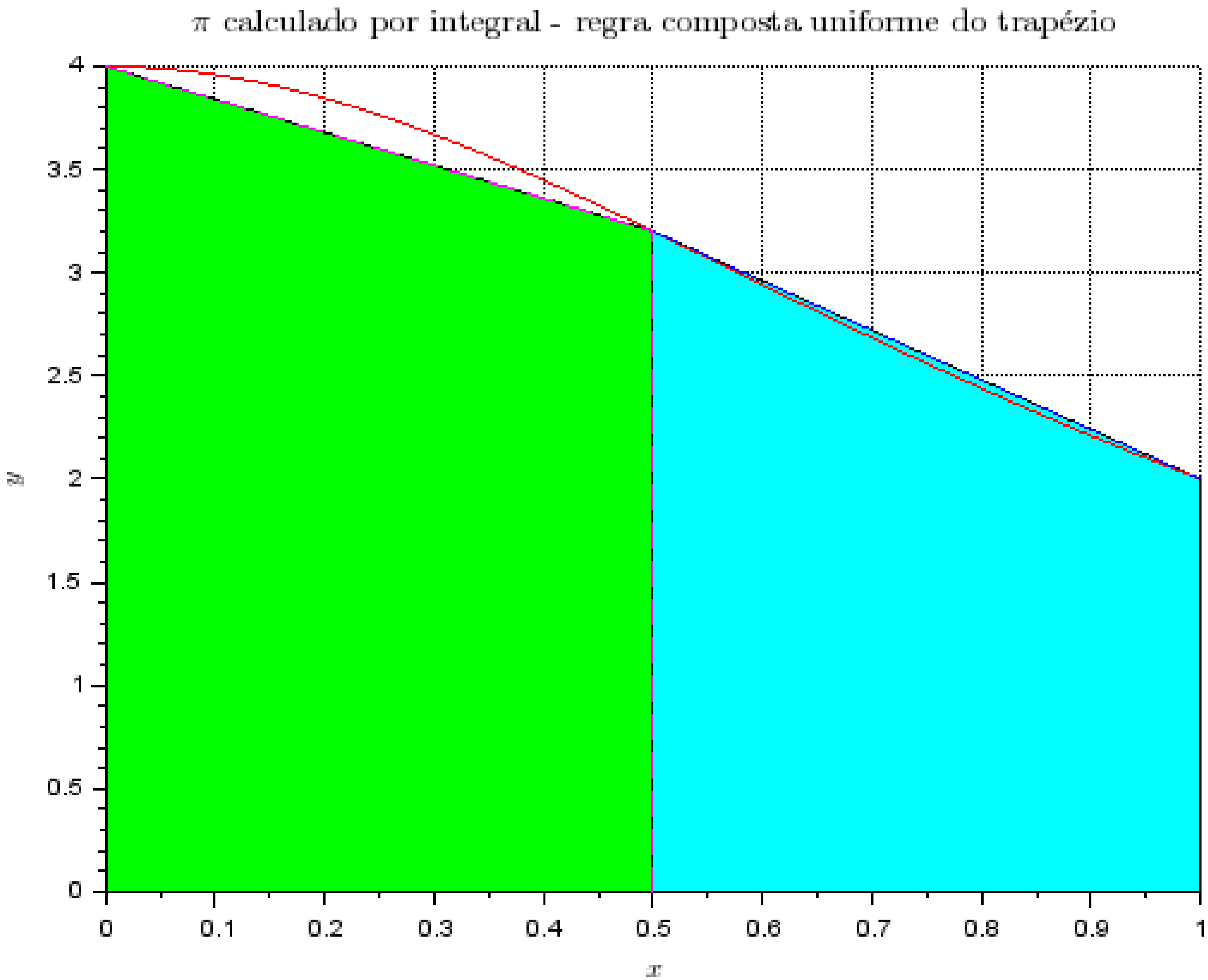
- Agora, usando os nós $x_0 = 0$, $x_1 = 0{,}5$ e $x_2 = 1$, obtemos:

$$T_c(\{0; 0{,}5; 1\}) = T(0; 0{,}5) + T(0{,}25; 1)$$
$$= 3{,}1000000000$$

e o erro relativo entre essa aproximação e a solução exata é

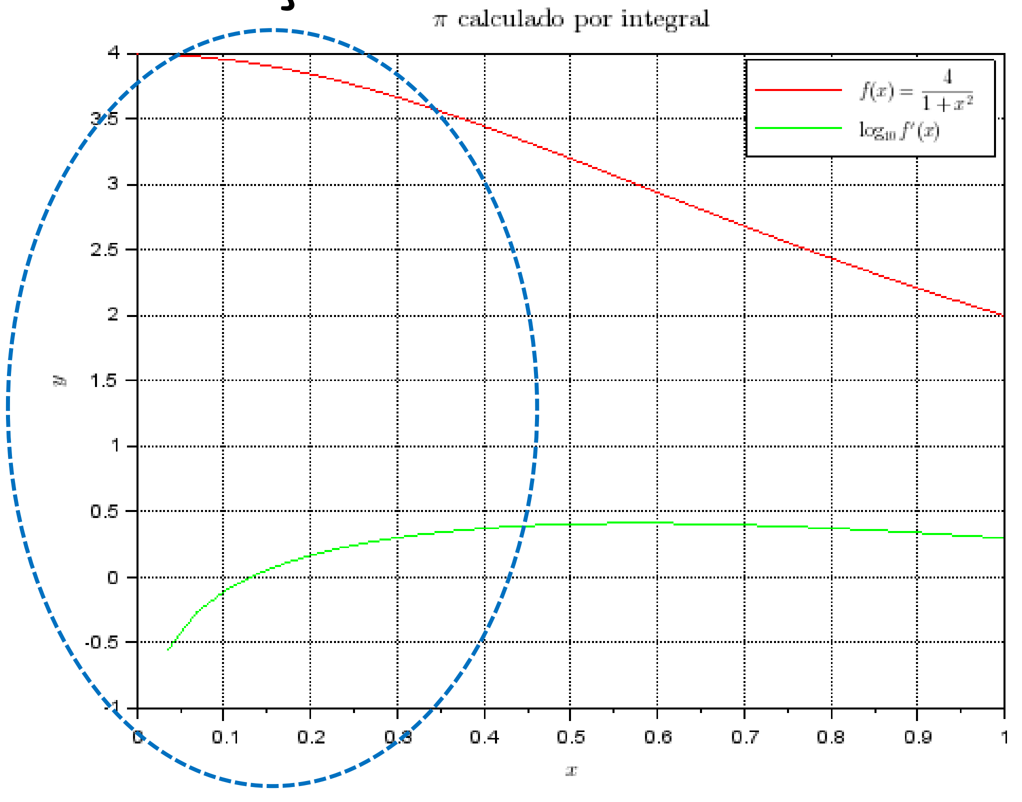
$$e_r = \frac{|\pi - T_c(\{0; 0{,}5; 1\})|}{\pi} = 1{,}323935 \times 10^{-2}$$

Regra Composta do Trapézio



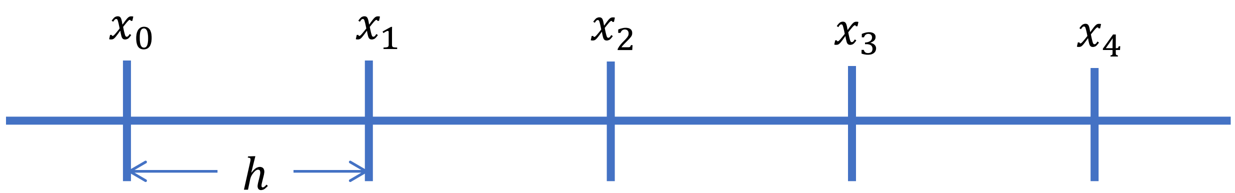
Regra Composta do Trapézio

- Os dois gráficos anteriores evidenciam a necessidade de se colocar mais nós onde haja maior variação da função:



Regra Composta Uniforme do Trapézio

- Para $n+1$ nós x_i igualmente espaçados no intervalo $[a; b]$, com $x_0 = a$ e $x_n = b$, definimos o espaçamento $h = \frac{b-a}{n}$, de onde $x_i = a + ih$.



$$n = 4$$
$$h = \frac{b-a}{4}$$

$$x_0 = a$$
$$x_1 = a + h$$
$$x_2 = a + 2h$$
$$x_3 = a + 3h$$
$$x_4 = a + 4\frac{b-a}{4} = b$$

Regra Composta Uniforme do Trapézio

- Escrevendo a regra do trapézio para cada um dos n trapézios e rearranjando os termos, obtemos a *regra composta uniforme do trapézio,*

$$T_u(h) = \frac{h}{2}\left(f(a) + \left(2\sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih) \right) + f(b) \right). \qquad (10)$$

- O *erro de truncamento* associado à regra composta uniforme do trapézio é dado por

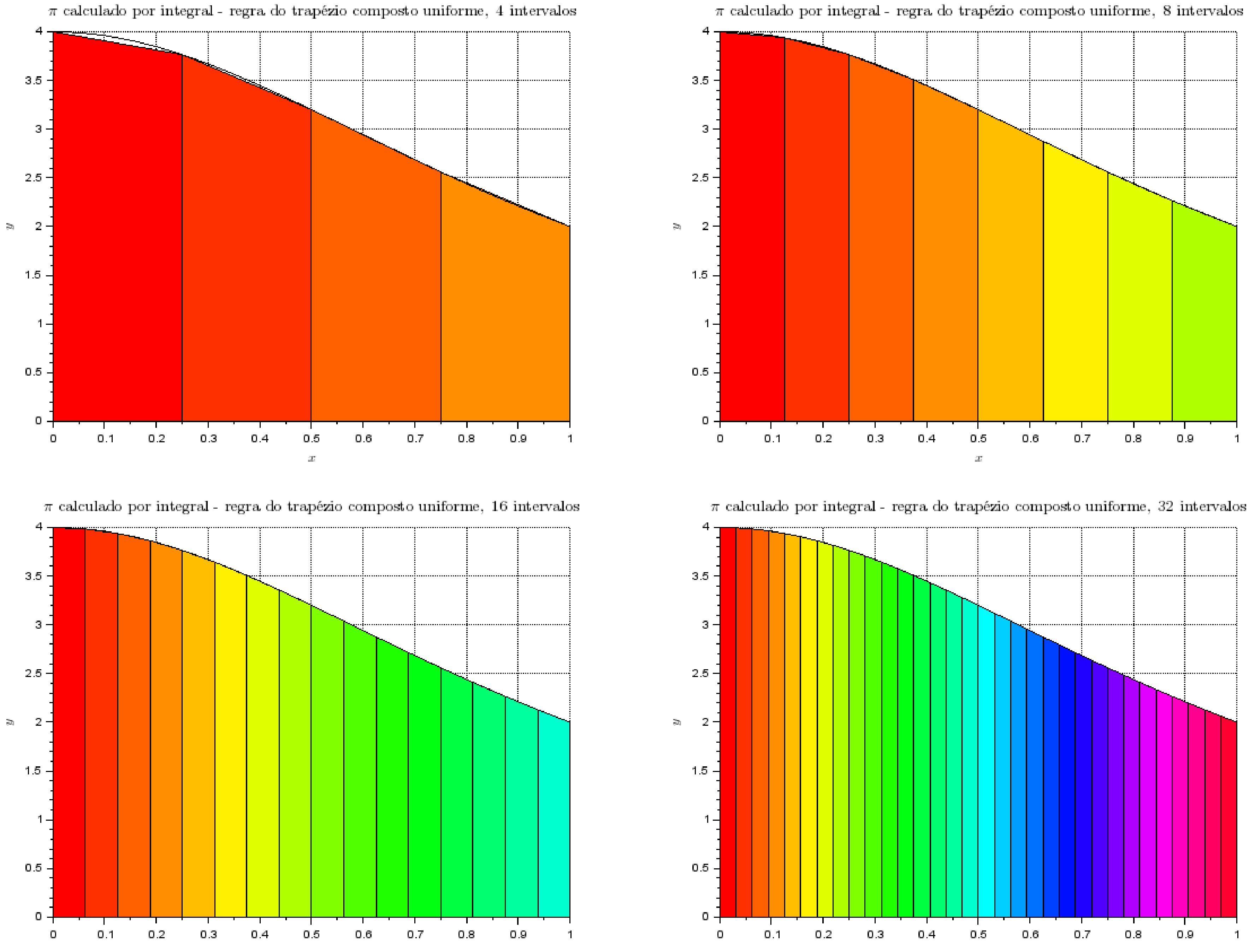
$$E_{T_u(h)} \leq \frac{h^2}{12}(b-a) \max_{a \leq x \leq b} |f''(x)|. \qquad (11)$$

Regra Composta Uniforme do Trapézio

- Usando nós igualmente espaçados para o problema modelo, obtemos os seguintes resultados, mostrados na Tabela 1:

h	$T_u(h)$	$e_r(\pi, T_u(h))$
$1/4$	$3{,}13117647059$	$3{,}315574 \times 10^{-3}$
$1/8$	$3{,}13898849449$	$8{,}289296 \times 10^{-4}$
$1/16$	$3{,}14094161204$	$2{,}072330 \times 10^{-4}$
$1/32$	$3{,}14142989317$	$5{,}180825 \times 10^{-5}$

- Observe os gráficos a seguir:


π calculado por integral - regra do trapézio composto uniforme, 4 intervalos
π calculado por integral - regra do trapézio composto uniforme, 8 intervalos
π calculado por integral - regra do trapézio composto uniforme, 16 intervalos
π calculado por integral - regra do trapézio composto uniforme, 32 intervalos
y
x
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
1

Regras de Simpson

Simples, Composta e Composta Uniforme

Regra de Simpson

- Como visto, a regra do trapézio não aproxima adequadamente a área sob a curva da função integranda, em geral.
- Uma alternativa é introduzir um nó intermediário aos extremos do intervalo formado pelos limites de integração, $[a; b]$, e interpolar os pontos $\big(a; f(a)\big)$, $\big(m; f(m)\big)$ e $\big(b; f(b)\big)$ por um polinômio de grau 2, onde $m = \frac{a+b}{2}$.

Regra de Simpson

- Nesse caso, as funções cardinais são dadas por:

$$l_0 = \frac{x-m}{a-m}\frac{x-b}{a-b}, l_1 = \frac{x-a}{m-a}\frac{x-b}{m-b} \text{ e } l_2 = \frac{x-a}{b-a}\frac{x-m}{b-m},$$

de onde as integrais A_0, A_1 e A_2 são dadas por:

$$A_0 = \frac{b^3 - a^3}{3(a-m)(a-b)} + \frac{\left(-\frac{m}{a-b} - \frac{b}{a-m}\right)(b^2 - a^2)}{2(a-b)} + \frac{mb(b-a)}{(a-m)(a-b)}$$

$$A_1 = \frac{b^3 - a^3}{3(m-a)(m-b)} + \frac{\left(-\frac{a}{m-a} - \frac{b}{m-a}\right)(b^2 - a^2)}{2(m-b)} + \frac{ab(b-a)}{(m-a)(m-b)}$$

$$A_2 = \frac{b^3 - a^3}{3(b-a)(b-m)} + \frac{\left(-\frac{a}{b-a} - \frac{m}{b-a}\right)(b^2 - a^2)}{2(b-m)} + \frac{am}{b-m}$$

Regra de Simpson

- Após simplificarmos a expressão

$$f(a)A_0 + f(m)A_1 + f(b)A_2,$$

obtemos

$$S(a;b) = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f(m) + f(b)\right) \tag{12}$$

a qual define a *regra de Simpson.*

- O erro de truncamento associado à regra é dado por

$$E_{S(a;b)} \leq \frac{1}{90}(b-a)^5 \max_{a \leq x \leq b}\left|f^{(4)}(x)\right|. \tag{13}$$

Regra de Simpson

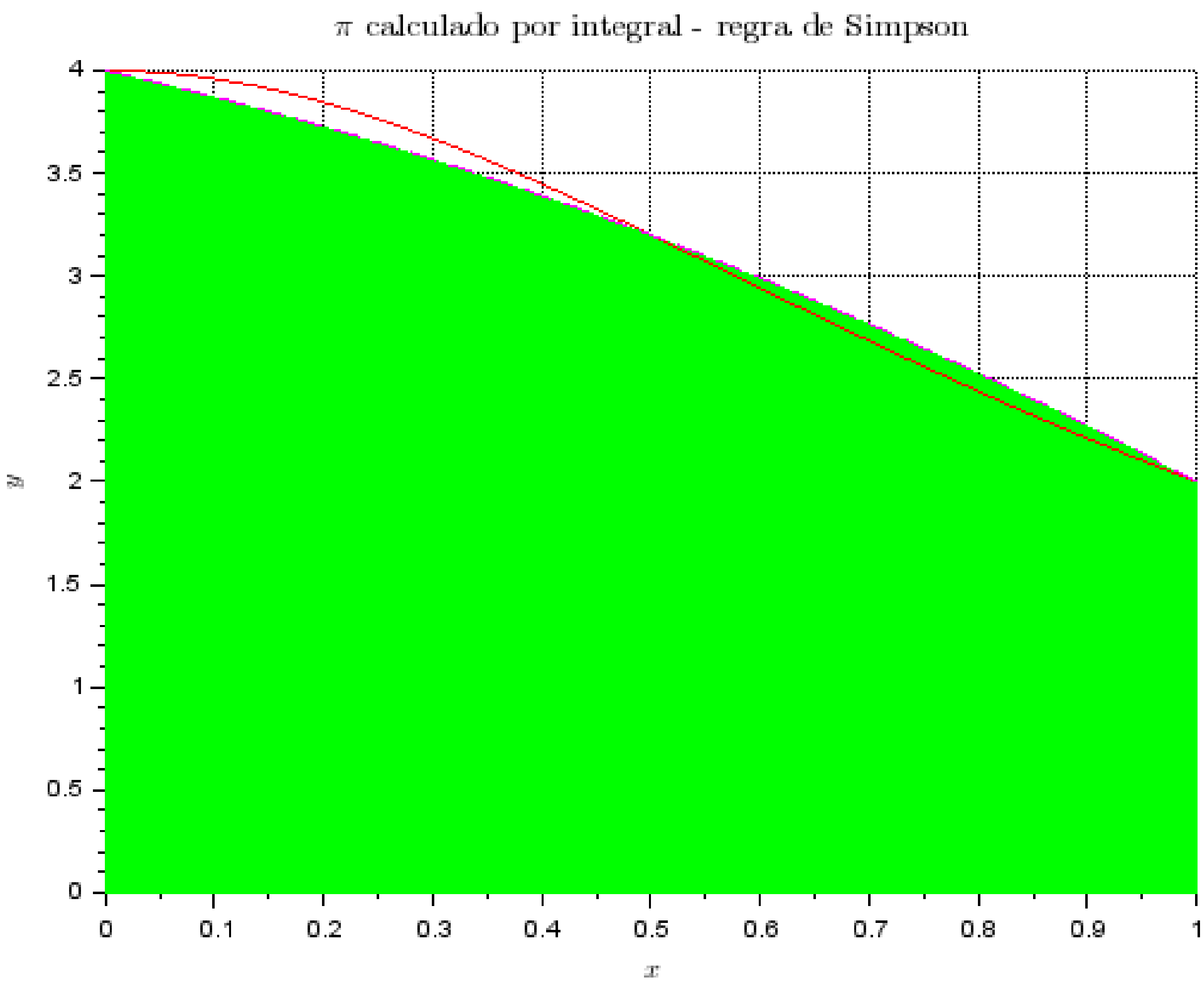
- Aplicando a regra de Simpson ao problema modelo, obtemos:

$$S(0;1) = \frac{1}{6}(f(0) + 4f(0{,}5) + f(1)) =$$
$$= 3{,}13333333333$$

e o erro relativo entre essa aproximação e a solução exata é

$$e_r = \frac{|\pi - S(0;1)|}{\pi} = 2{,}629023 \times 10^{-3}$$

Regra de Simpson



Regra Composta de Simpson

- Da mesma forma que na regra do trapézio, o erro associado à regra de Simpson pode ser reduzido se dividirmos o intervalo $[a; b]$ novamente num conjunto de subintervalos $[x_0; x_1]$, $[x_1; x_2]$, ..., $[x_{n-1}; x_n]$, onde $x_0 = a$ e $x_n = b$, e aplicarmos individualmente a regra de Simpson a cada um deles, resultando em:

$$S_C(\{x_i\}) = \sum_{i=0}^{n-1} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{6} \left(f(x_i) + 4f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + f(x_{i+1}) \right) \right) \qquad (14)$$

ou,

$$S_C(\{x_i\}) = S(x_0; x_1) + \cdots + S(x_{n-1}; x_n) \qquad (15)$$

Regra Composta de Simpson

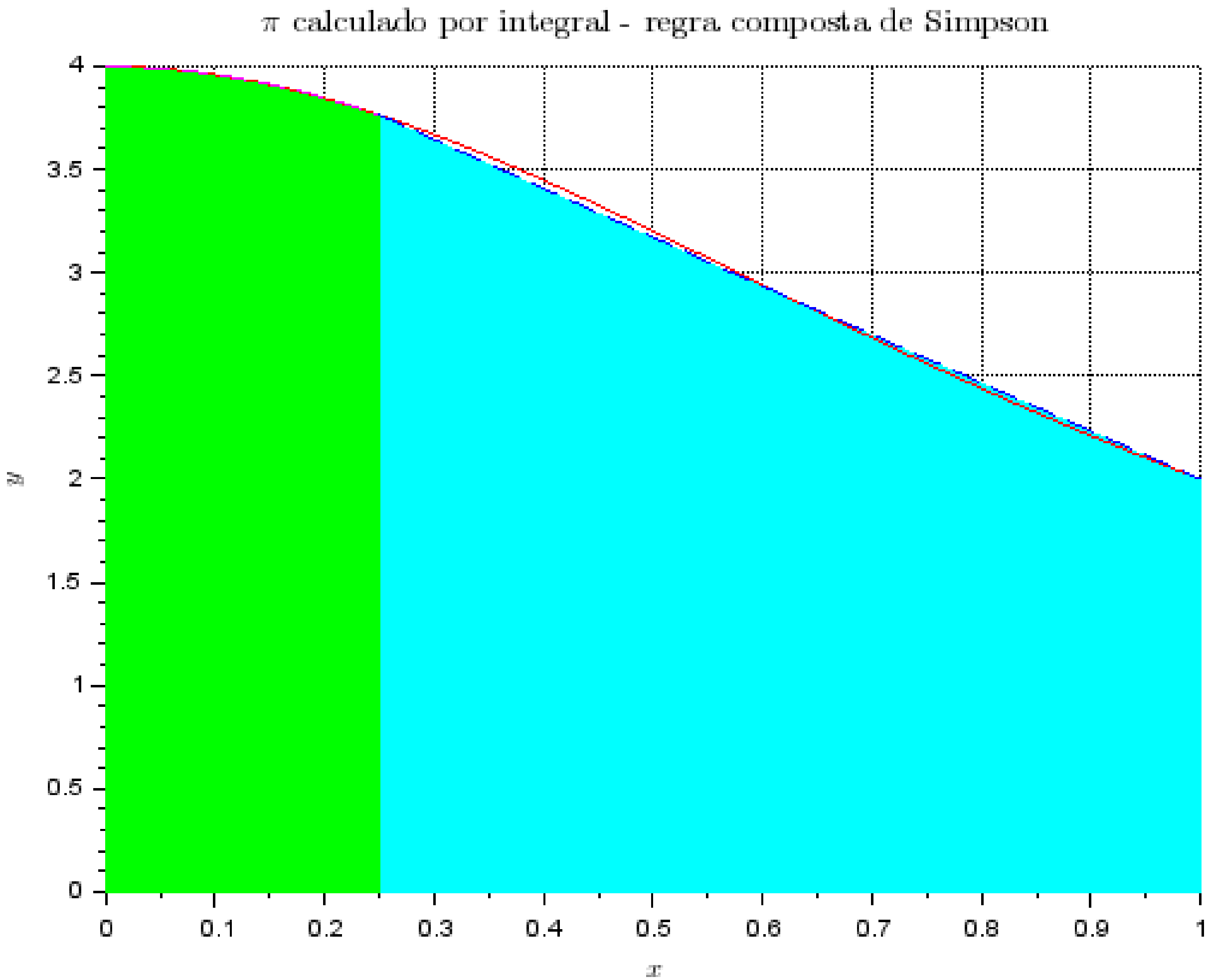
- Aplicando a regra composta de Simpson ao problema modelo, usando os nós $x_0 = 0$, $x_1 = 0{,}25$ e $x_2 = 1$, obtemos:

$$S_c(\{0; 0{,}25; 1\}) = S(0; 0{,}25) + S(0{,}25; 1)$$
$$= 3{,}13873015066$$

e o erro relativo entre essa aproximação e a solução exata é

$$e_r = \frac{|\pi - S_c(\{0; 0{,}25; 1\})|}{\pi} = 9.111630 \times 10^{-4}$$

Regra Composta de Simpson



Regra Composta de Simpson

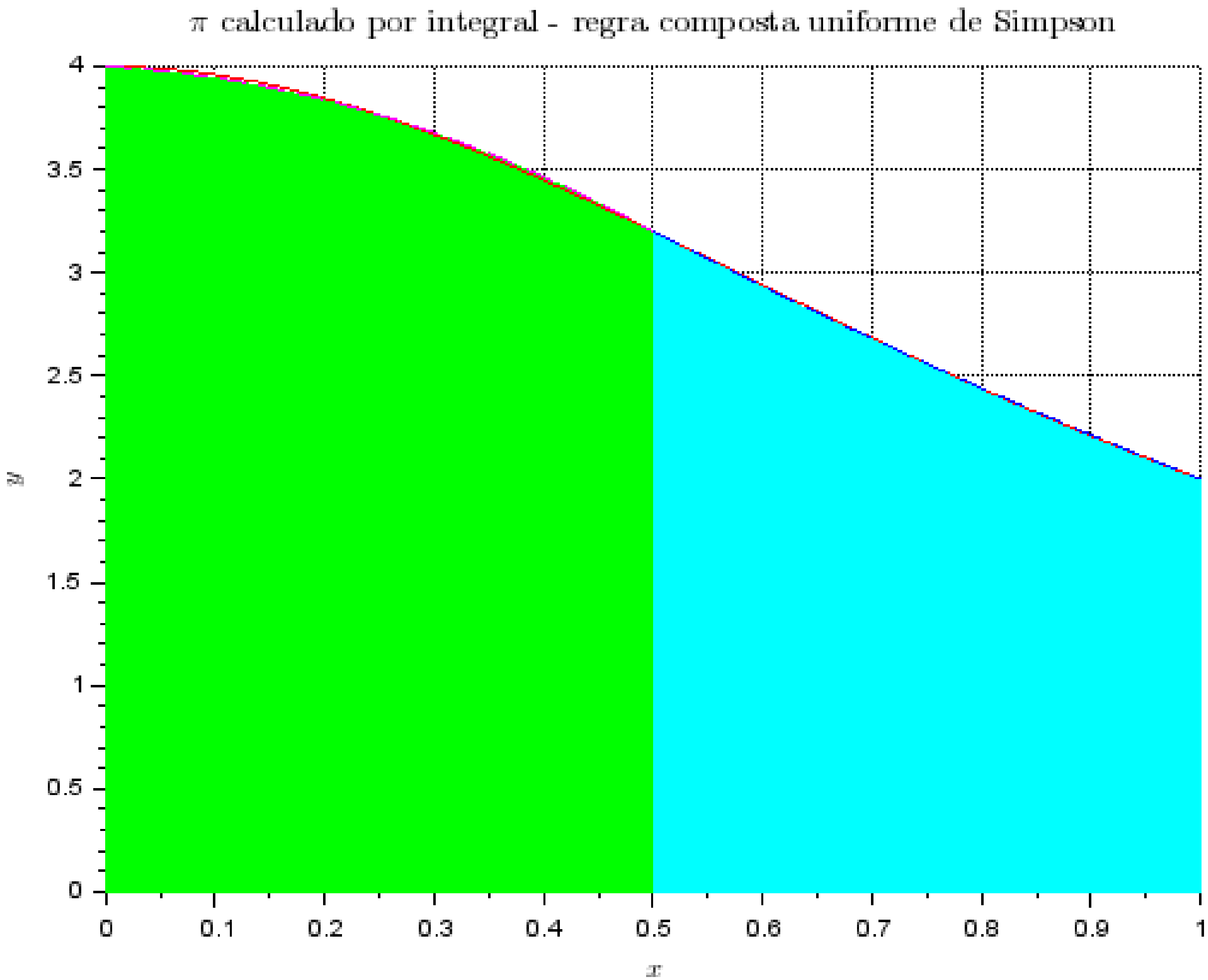
- Agora, usando os nós $x_0 = 0$, $x_1 = 0{,}5$ e $x_2 = 1$, obtemos:

$$S_c(\{0; 0{,}5; 1\}) = S(0; 0{,}5) + S(0{,}25; 1)$$
$$= 3{,}14156862745$$

e o erro relativo entre essa aproximação e a solução exata é

$$e_r = \frac{|\pi - S_c(\{0; 0{,}5; 1\})|}{\pi} = 7{,}647758 \times 10^{-6}$$

Regra Composta de Simpson



Regra Composta Uniforme de Simpson

- Para nós x_i, igualmente espaçados no intervalo $[a; b]$, obtemos a *regra composta uniforme de Simpson*, onde n é **par:**

$$S_u(h) = \frac{h}{3}\left(f(a) + 2\sum_{i=2}^{n/2} f(x_{2i-2}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + f(b)\right). \quad (16)$$

- O erro de truncamento associado à regra composta uniforme de Simpson é dado por

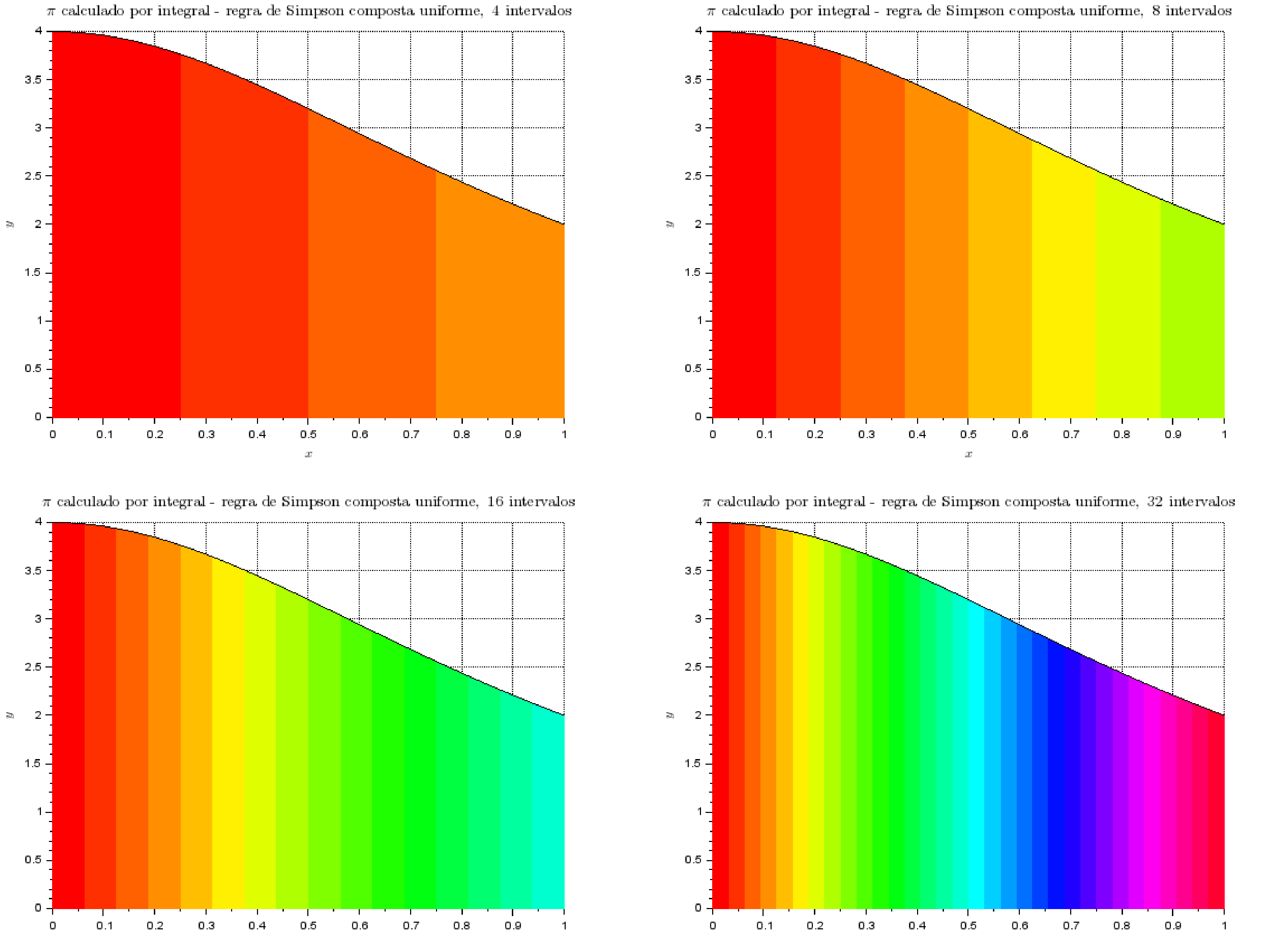
$$E_{S_u(h)} \leq \frac{h^4}{180}(b-a)\max_{a\leq x\leq b}\left|f^{(4)}(x)\right|. \quad (17)$$

Regra Composta Uniforme de Simpson

- Usando nós igualmente espaçados para o problema modelo, obtemos os seguintes resultados, mostrados na Tabela 2:

h	$S_u(h)$	$e_r(\pi, S_u(h))$
$1/4$	$3{,}14156862745$	$7{,}647758 \times 10^{-6}$
$1/8$	$3{,}14159250246$	$4{,}810652 \times 10^{-8}$
$1/16$	$3{,}14159265122$	$7{,}527938 \times 10^{-10}$
$1/32$	$3{,}14159265355$	$1{,}176367 \times 10^{-11}$

- Observe os gráficos a seguir:



π calculado por integral - regra de Simpson composta uniforme, 4 intervalos
π calculado por integral - regra de Simpson composta uniforme, 8 intervalos
π calculado por integral - regra de Simpson composta uniforme, 16 intervalos
π calculado por integral - regra de Simpson composta uniforme, 32 intervalos
y
x
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4
0.1
0.2
0.3
0.4
0.6
0.7
0.8
0.9

Regra de Romberg

Extrapolação de Richardson e Regra do Trapézio

- Como vimos nos exemplos anteriores, as regras simples não fornecem, em geral, aproximações de grande precisão, devido ao erro inerente às suas formulações.
- As regras compostas permitem melhorar a precisão, pois o erro é menor ao dividir o intervalo de integração em subintervalos e aplicar a regra simples em cada um deles; mas, ainda assim, podem não alcançar a precisão desejada e requerem grande número de avaliações da função integranda.

- Um maneira de se alcançar uma maior precisão, sem recorrer às regras compostas, é usar a chamada **extrapolação de Richardson**.
- Proposta pelo matemático e físico inglês Lewis Fry Richardson (*1881-†1953), ela permite calcular uma aproximação mais precisa e simples, a partir de duas aproximações calculadas de forma adequada, das quais se conheça a ordem do erro.
- Essa técnica pode ser aplicada em diversas situações, como veremos a seguir.

Extrapolação de Richardson

- Suponha que desejamos calcular a (uma quantidade qualquer: derivada, integral, etc.), a qual não pode ser calculada de forma exata.
- Suponha, ainda, que existe um processo numérico gerado por uma função $\varphi(h)$, diferenciável continuamente e infinitamente, onde $h \in \mathbb{R}$ é tal que $\varphi(h) \rightarrow \varphi(0) = a$, quando $h \rightarrow 0$.
- Podemos, então, expandir $\varphi(h)$ por uma série de Taylor:

$$\varphi(h) = \varphi(0) + h\varphi'(0) + \frac{h^2}{2}\varphi''(0) + \frac{h^3}{6}\varphi'''(0) + \cdots \tag{18}$$

Extrapolação de Richardson

- Como $\varphi(0) = a$, e deixando em evidência apenas os termos nas potências de h, podemos reescrever (18) como

$$\varphi(h) = a + c_1 h + c_2 h^2 + c_3 h^3 + \cdots \qquad (19)$$

onde c_1, c_2, c_3, ... são constantes.

- A Eq. (19) tem um erro $O(h)$. Para melhorar a aproximação, podemos tomar um espaçamento $h/2$:

$$\varphi(h/2) = a + c_1 \frac{1}{2} h + c_2 \frac{1}{4} h^2 + c_3 \frac{1}{8} h^3 + \cdots \qquad (20)$$

- Agora, ao invés de tentarmos obter aproximações sucessivamente melhores, dividindo h pela metade a cada vez, vamos proceder de forma diferente:

Extrapolação de Richardson

- Multiplicando $\varphi(h/2)$ por 2 e subtraindo dela $\varphi(h)$, vem:

$$2\varphi(h/2) - \varphi(h) = a + \overbrace{2c_1\frac{1}{2}h - c_1 h}^{=0} - c_2\frac{1}{2}h^2 - c_3\frac{3}{4}h^3 \tag{21}$$

Descartando os termos de ordem igual ou superior a h^2, escrevemos

$$a = 2\varphi(h/2) - \varphi(h) = \psi(h) \tag{22}$$

a qual tem um erro $O(h^2)$.

Extrapolação de Richardson

- Então, é muito melhor calcular uma aproximação para a usando a Eq. (22), do que recorrer à divisão sucessiva de h pela metade, pois o erro em $\varphi(h)$ sempre será $O(h)$.
- Porém, podemos obter aproximações ainda melhores, usando a mesma técnica. Vamos remover o termo em h^2 na Eq. (21):

$$\psi(h) = a + -c_2 \frac{1}{2} h^2 - c_3 \frac{1}{4} h^3 \qquad (23)$$

$$\psi(h/2) = a + -c_2 \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2^2} h^2 - c_3 \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{2 \cdot 2^2} h^3 \qquad (24)$$

Extrapolação de Richardson

- Multiplicando $\psi(h/2)$ por 2^2 e subtraindo $\psi(h)$ dela, vem:

$$2^2\psi(h/2) - \psi(h) = 3a + c_3\frac{3}{8}h^3 + \cdots \tag{25}$$

- Desprezando os termos de ordem igual ou superior a h^3, obtemos a expressão

$$a = \frac{4\psi(h/2) - \psi(h)}{3} = \theta(h) \tag{26}$$

a qual tem um erro $O(h^3)$.

Extrapolação de Richardson

- De forma correlata, é possível obter uma estimativa para o erro na aproximação em $\psi(h)$. Suponha que a é aproximada pelas duas equações abaixo, ambas com erro $O\left(h^k\right)$:

$$a = \psi(h) + ch^k \tag{27}$$

$$a = \psi(h/2) + c\,\frac{1}{2^k}\,h^k \tag{28}$$

Subtraindo a Eq. (28) da Eq. (27), obtemos

$$c = \frac{\psi(h/2) - \psi(h)}{(1 - 2^{-k})h^k} \tag{29}$$

Extrapolação de Richardson

- Esse processo pode ser novamente repetido, removendo o termo em h^3 na Eq. (25) e produzindo uma aproximação $O(h^4)$, e assim sucessivamente.
- A Eq. (26) requer $\psi(h)$ e $\psi(h/2)$ os quais, por sua vez, requerem $\varphi(h)$, $\varphi(h/2)$ e $\varphi(h/4)$.
- Para poder expressar adequadamente o processo da aplicação da extrapolação de Richardson, vamos introduzir uma notação mais adequada:

$$R(j,0) \quad := \quad \varphi\left(h/2^j\right), j \geq 0 \tag{30}$$

$$R(j,k) \quad := \quad \frac{2^k R(j,k-1) - R(j-1,k-1)}{2^k - 1}, j \geq k > 0 \tag{31}$$

Extrapolação de Richardson

- Analisando os índices em R nas Eqs. (30) e (31), se observa que os valores calculados preenchem uma matriz triangular, em que dois elementos sucessivos numa coluna produzem um elemento na coluna seguinte:

$$
\begin{array}{ccccc}
R(0,0) & & & & \\
R(1,0) & R(1,1) & & & \\
R(2,0) & R(2,1) & R(2,2) & & \\
R(3,0) & R(3,1) & R(3,2) & R(3,3) & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\
\uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \\
O(h) & O(h^2) & O(h^3) & O(h^4) &
\end{array}
$$

Extrapolação de Richardson

- Mais ainda, é importante observar que apenas os valores na 1ª coluna requerem (possivelmente) cálculos mais extensos; todos os demais são obtidos por simples aplicação da Eq. (31), tornando a extrapolação de Richardson um processo eficaz e eficiente de se obter aproximações de maior ordem, com baixo custo computacional.
- A seguir, apresentamos duas aplicações da extrapolação de Richardson:

Extrapolação de Richardson

1. Considere as regras do trapézio compostas uniformes calculadas com $h = 1/8$ e $h = 1/16$, apresentadas na Tabela 1: $T_u(1/8) = 3{,}13898849449$ e $T_u(1/16) = 3{,}14094161204$.

A regra do trapézio composta uniforme apresenta ordem de erro $k = 2$ (Eq. (11)). Então, usando a Eq. (26):

$$a = \frac{4T_u(1/16) - T_u(1/8)}{3} = 3{,}14159265122482223 0$$

com $e_r(\pi, a) = 7{,}527936 \times 10^{-10} \ll e_r\big(\pi, T_u(1/32)\big)$.

Extrapolação de Richardson

2. Se deseja determinar qual o valor de n para o qual o erro seja menor do que 10^{-10}. Aqui, usaremos as regras de Simpson compostas uniformes calculadas com $h = 1/4$ e $h = 1/8$, apresentadas na Tabela 1: $S_u(1/4) = 3{,}14156862745$ e $S_u(1/8) = 3{,}14159250246$.

A regra de Simpson apresenta ordem de erro $k = 4$ (Eq. (17)). Usando a Eq. (29), com $h = 1/4$,

$$c = \frac{S_u(1/8) - S_u(1/4)}{(1 - 2^{-4})\left(^1/_4\right)^4} = 6{,}519468776605 \times 10^{-3}.$$

Como o erro na aproximação é dado por $|c|h^k$, impomos a condição $|c|h^k \leq 10^{-10}$.

Extrapolação de Richardson

2. Usando a condição anterior, calculamos h:

$$h \leq \left(\frac{10^{-10}}{c}\right)^{\frac{1}{4}} = 1{,}11287643803264051 \times 10^{-2}.$$

Como, por definição, $h = (b-a)/n$, podemos determinar quantos nós devem ser usados:

$$n = \left\lceil \frac{1}{1{,}11287643803264051 \times 10^{-2}} \right\rceil = 90,$$

onde se usa o operador $\lceil \cdot \rceil$ para garantir que a desigualdade para h seja satisfeita.

Extrapolação de Richardson

2. Calculando agora a regra composta uniforme de Simpson e o erro relativo correspondente, obtemos:

$$S_u(1/90) = 3{,}14159265358971850 9$$

com $e_r\big(\pi, S_u(1/90)\big) = 2{,}374814 \times 10^{-14} \ll 10^{-10}$ ■.

Observe que, como o erro relativo é da ordem de 10^{-14}, a solução está no limite da precisão dupla. Com efeito, se repetíssemos o procedimento, exigindo que o erro fosse menor do que 10^{-12}, obteríamos uma aproximação muito pior.

Regra de Romberg

- Essa regra de integração combina a regra do trapézio composta uniforme com a extrapolação de Richardson.
- Calculando a expressão para o erro através de uma expansão de Taylor para a regra composta uniforme do trapézio, verifica-se que ela é da forma

$$T_u(h) = \int_a^b f(x)\,dx + c_1 h^2 + c_2 h^4 + c_3 h^6 + \cdots \qquad (32)$$

envolvendo apenas potências pares de h.

Regra de Romberg

- Nesse caso, a aplicação da extrapolação de Richardson deve ser feita para eliminar os termos em h^{2k}, $k = 1,2,\ldots$
- Assim, a Eq. (31) deve ser ajustada convenientemente, para refletir as ordens pares dos termos de erro. Reescrevendo adequadamente as Eqs. (30) e (31), obtemos

$$R(j,0) \quad := \quad T_u\left(h/2^j\right), j \geq 0 \tag{33}$$

$$R(j,k) \quad := \quad \frac{2^{2k}R(j,k-1) - R(j-1,k-1)}{2^{2k}-1}, j \geq k > 0 \tag{34}$$

as quais definem a regra de Romberg.

- As colunas $R(j,k)|k > 0$ são associados aos erros de ordem $O(h^{2k})$.

Regra de Romberg

- Aplicando a regra de Romberg ao problema modelo, com $h = 1/2$, até $O(h^8)$, obtemos:

$R(0,0) =$ 3,100000				
$R(1,0) =$ 3,131177	$R(1,1) =$ 3,141567			
$R(2,0) =$ 3,138989	$R(2,1) =$ 3,141593	$R(2,2) =$ 3,141594		
$R(3,0) =$ 3,140942	$R(3,1) =$ 3,141593	$R(3,2) =$ 3,141593	$R(3,3) =$ 3,141593	
$R(4,0) =$ 3,141230	$R(4,1) =$ 3,141593	$R(4,2) =$ 3,141593	$R(4,3) =$ 3,141593	$R(4,4) =$ 3,141593

onde $R(4,4) = 3,141592653649 \approx \int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,dx = \pi$, com

$$e_r = \frac{|\pi - R(4,4)|}{\pi} = 1,90405 \times 10^{-11}.$$

Quadratura de Gauss-Legendre

Quadraturas

- Uma *quadratura* é uma aproximação para uma integral definida de uma função, usualmente expressa como a soma ponderada dos valores da função, usando pesos w_i, quando avaliada em certos nós (x_i) do intervalo de integração:

$$\int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=1}^{N} w_i f(x_i)\,. \tag{35}$$

Quadratura Gaussiana

- A *quadratura Gaussiana* é construída de tal forma que ela é exata para polinômios de grau $2N - 1$ ou menos, obtida com apenas N avaliações da função aproximadora, para valores específicos dos nós x_i e pesos w_i, $1 \leq i \leq N$.
- Os pesos e nós podem ser obtidos a partir de *polinômios ortogonais*, como os de Legendre, Chebyshev, Hermite e Laguerre.

Quadratura Gaussiana

- Os nós x_i e pesos w_i são escolhidos de tal forma que a integral seja exata para certos polinômios de grau até $2N-1$:

$$\int_{-1}^{1} x^p dx = \sum_{i=1}^{N} w_i x^p \mid 0 \leq p \leq 2N-1 \tag{36}$$

- Como exemplo, vamos determinar os nós e os pesos da quadratura dada por

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) \tag{37}$$

Quadratura Gaussiana

- Como a quadratura é linear, e temos quatro coeficientes a determinar (os nós x_0, x_1 e os pesos w_0, w_1), precisamos de quatro equações nessas quatro variáveis.
- Observe que $N = 2$ e que desejamos que $\int_{-1}^{1} x^p dx = \sum_{i=1}^{N} w_i x^p$ seja exata para os polinômios de grau $0,1,2$ e $2N - 1 = 3$.
- Para determinar os coeficientes, vamos usar um conjunto de polinômios **ortogonais entre si**, os quais formam uma **base polinomial**:

Quadratura Gaussiana

- Uma base polinomial é formada por um conjunto de k polinômios $P_i(x)$, os quais satisfazem as seguintes relações:

$$\int_a^b w(x)P_i(x)P_j(x)dx = 0, i \neq j, \quad (38)$$

$$\int_a^b w(x)P_i(x)^2 dx \neq 0. \quad (39)$$

- Note a similaridade com a definição de base vetorial num espaço $\mathbb{R}^n$.

Quadratura Gaussiana

- Uma base polinomial é a formada pelos polinômios: $1, x, x^2$ e x^3. As integrais definidas desses polinômios são:

$$\int_{-1}^{1} dx = x\Big|_{-1}^{1} = 2 = w_0 + w_1$$

$$\int_{-1}^{1} x\,dx = \frac{x^2}{2}\Big|_{-1}^{1} = 0 = w_0 x_0 + w_1 x_1$$

$$\int_{-1}^{1} x^2 dx = \frac{x^3}{3}\Big|_{-1}^{1} = \frac{2}{3} = w_0 {x_0}^2 + w_1 {x_1}^2$$

$$\int_{-1}^{1} x^3 dx = \frac{x^4}{4}\Big|_{-1}^{1} = 0 = w_0 {x_0}^3 + w_1 {x_1}^3$$

Quadratura Gaussiana

- Com isso, obtemos o sistema de equações não-lineares

$$\begin{cases} w_0 + w_1 & = & 2 \\ w_0 x_0 + w_1 x_1 & = & 0 \\ w_0 {x_0}^2 + w_1 {x_1}^2 & = & \dfrac{2}{3} \\ w_0 {x_0}^3 + w_1 {x_1}^3 & = & 0 \end{cases} \tag{40}$$

o qual tem como solução:

$$x_0 = -x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$
$$w_0 = w_1 = 1$$

de onde a quadratura é expressa como

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

Quadratura Gaussiana

- Usando uma variante do problema modelo como exemplo,

$$\int_{-1}^{1} \frac{4}{1+x^2}\,dx = 4\tan^{-1} x\Big|_{-1}^{1} = 2\pi,$$

a quadratura anterior nos permite calcular a integral acima como:

$$\int_{-1}^{1} \frac{4}{1+x^2}\,dx = \frac{4}{1+\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2} + \frac{4}{1+\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2} = 6{,}0$$

com erro relativo $e_r(2\pi, 6) = 4{,}50703 \times 10^{-2}$.

Quadratura Gaussiana

- Outras escolhas de bases polinomiais facilitam a determinação dos nós e pesos da quadratura, como os **polinômios de Legendre**.
- Os polinômios de Legendre são definidos através da fórmula de recorrência

$$P_0(x) = 1 \tag{40}$$

$$P_1(x) = x \tag{41}$$

$$P_n(x) = \frac{2n-1}{n} x P_{n-1}(x) - \frac{n-1}{n} P_{n-2}(x), n > 1, \tag{42}$$

Polinômios de Legendre

- Os cinco primeiros polinômios de Legendre são:

$$P_0(x) = 1 \tag{43}$$

$$P_1(x) = x \tag{44}$$

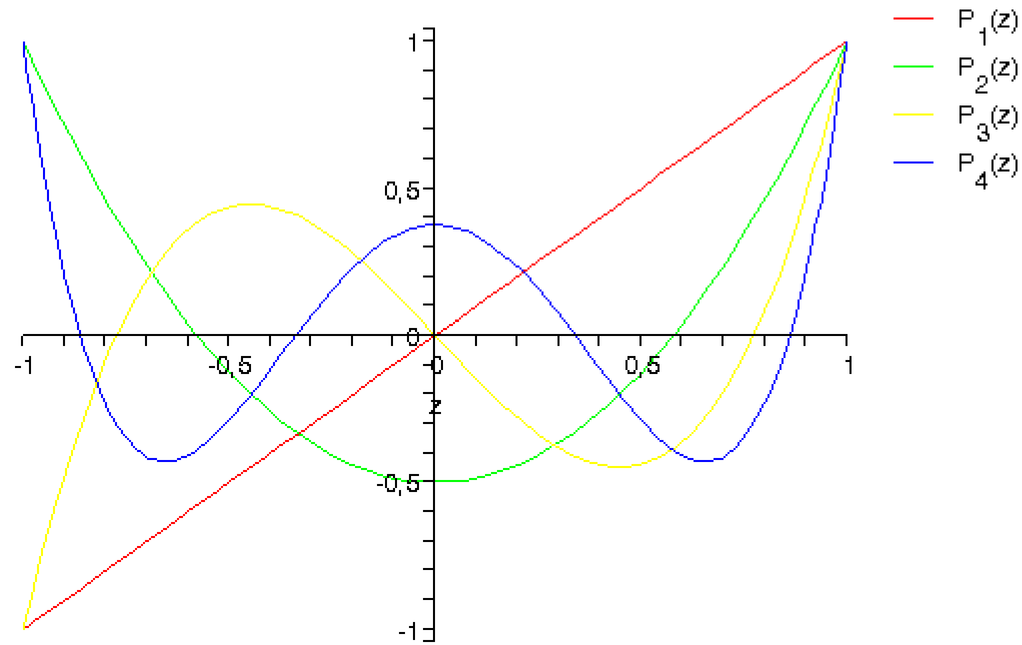
$$P_2(x) = \frac{3}{2}x(x) - \frac{1}{2}(1) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \tag{45}$$

$$P_3(x) = \frac{5}{3}x\left(\frac{1}{2}(3x^2 - 1)\right) - \frac{2}{3}(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \tag{46}$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) \tag{47}$$

Polinômios de Legendre

- As curvas abaixo representam os polinômios $P_1(x)$, $P_2(x)$, $P_3(x)$ e $P_4(x)$:



Quadratura Gaussiana

- No caso geral, obtém-se um sistema de $2N$ equações para $0 \leq p \leq 2N-1$:

$$w_1 {x_1}^p + \cdots + w_N {x_N}^p = \int_{-1}^{1} x^p dx = \begin{cases} \dfrac{2}{p+1}, & p = 0,2,\ldots,2N-2 \\ 0, & p = 1,3,\ldots,2N-1 \end{cases} \tag{48}$$

- Em particular, para qualquer polinômio de grau até $2N-1$, pode-se escrever

$$f(x) = Q(x)P_N(x) + R(x), \tag{49}$$

onde Q e R são os polinômios quociente e resto, de grau até $N-1$.

- A integral pode então ser escrita como

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \int_{-1}^{1} [Q(x)P_N(x) + R(x)]dx \tag{50}$$

Quadratura Gaussiana

- E a quadratura é expressa como

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} w_i f(x_i) = \sum_{i=1}^{N} [Q(x_i)P_N(x_i) + R(x_i)]. \qquad (51)$$

Se os nós forem as raízes dos polinômios P_N, então o primeiro termo no somatório se anula, de onde

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} w_i f(x_i) = \sum_{i=1}^{N} R(x_i) \qquad (52)$$

ou seja, os pesos satisfazem o sistema (48) quando os nós são as raízes dos polinômios P_N.

Quadratura de Gauss-Legendre

- Quem são os nós e os pesos:
  - Os nós x_i são as *raízes do polinômio* $P_n(x)$ no intervalo $[-1;1]$
  - Seguindo a formulação encontrada em Abramowitz & Stegun 1972, p. 887, os pesos são dados por

$$w_i = \frac{2}{\left(1-x_i^2\right)[P_n{}'(x)]^2}. \tag{53}$$

  - As derivadas $P_n{}'(x)$ são calculadas através da fórmula de recorrência

$$P_0'(x) = 0 \tag{54}$$

$$P_1'(x) = 1 \tag{55}$$

$$(1-x^2)P_n'(x) = (n+1)xP_n(x) - (n+1)P_{n+1}(x), n > 1 \tag{56}$$

Quadratura de Gauss-Legendre

- Vamos mostrar um exemplo da determinação dos pesos com polinômios de Legendre. Como no exemplo anterior, vamos usar $N = 2$, mas agora com os polinômios de Legendre de graus 0,1,2 e 3 (equações (43) a (46)):

$$\int_{-1}^{1} dx = x\Big|_{-1}^{1} = 2$$

$$\int_{-1}^{1} x\, dx = \frac{x^2}{2}\Big|_{-1}^{1} = 0$$

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{2}(3x^2 - 1)dx = \frac{1}{2}(x^3 - x)\Big|_{-1}^{1} = 0$$

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{2}\left(5x^3 - 3x\right)dx = \frac{1}{2}\left(\frac{5x^4}{4} - \frac{3x^2}{2}\right)\Big|_{-1}^{1} = 0$$

Quadratura Gaussiana

- Com isso, obtemos o sistema de equações não-lineares

$$\begin{cases} w_0 + w_1 & = & 2 \\ w_0 x_0 + w_1 x_1 & = & 0 \\ w_0 \dfrac{1}{2}(3{x_0}^2 - 1) + w_1 \dfrac{1}{2}(3{x_1}^2 - 1) & = & 0 \\ w_0 \dfrac{1}{2}(5{x_0}^3 - 3x) + w_1 \dfrac{1}{2}(5{x_1}^3 - 3x) & = & 0 \end{cases}$$

o qual tem como solução:

$$x_0 = -x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$$

$$w_0 = w_1 = 1$$

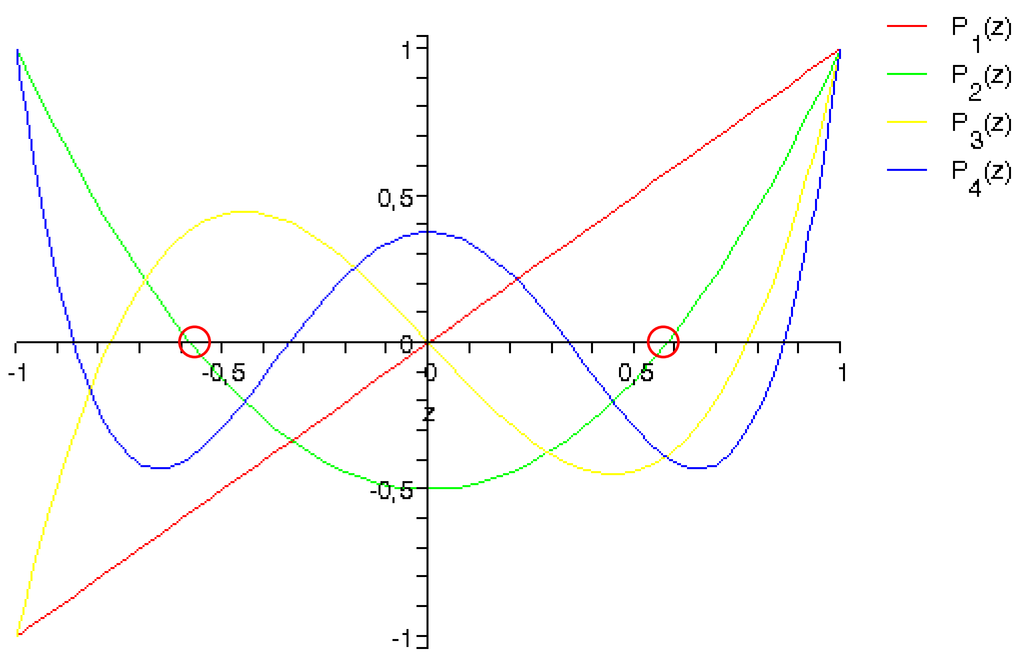
de onde a quadratura é expressa como

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right).$$

Quadratura Gaussiana

- Note que $x_0 = -x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$ são as raízes do polinômio $P_2(x)$:

$$P_2\left(\pm\frac{\sqrt{3}}{3}\right) = \frac{1}{2}\left(3\left(\pm\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2 - 1\right) = 0$$



Quadratura de Gauss-Legendre

- A tabela abaixo mostra alguns dos nós e pesos (observe a concordância dos valores para $N = 2$ com os resultados obtidos no exemplo anterior):

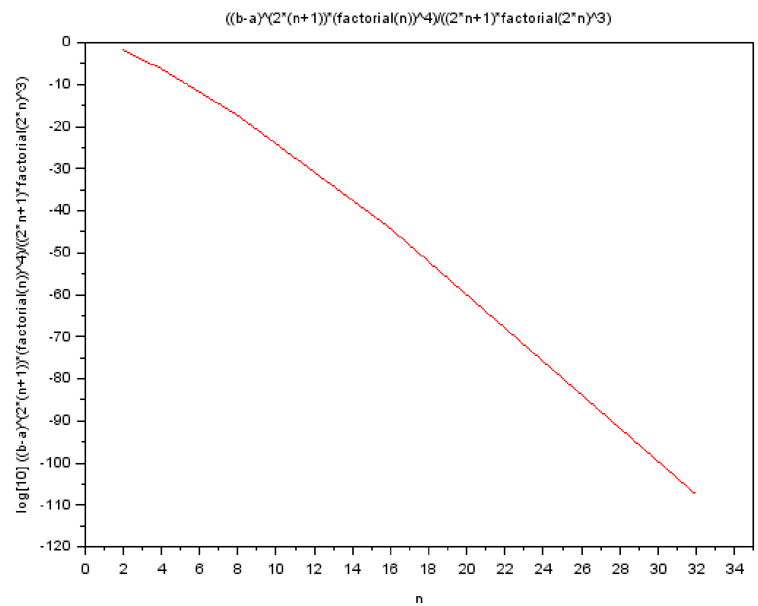
N	Raízes (x_i)	Pesos (w_i)
2	±0.5773 5026 9189 626	1.0000 0000 0000 000
3	0.0000 0000 0000 000 ±0.7745 9666 9241 483	0.8888 8888 8888 888 ±0.5555 5555 5555 555
4	±0.3399 8104 3584 856 ±0.8611 3631 1594 053	±0.6521 4515 4862 546 ±0.3478 5484 5137 454
5	0.0000 0000 0000 000 ±0.5384 6931 0105 683 ±0.9061 7984 5938 664	0.5688 8888 8888 889 ±0.4786 2867 0499 366 ±0.2369 2688 5056 189
6	±0.2386 1918 6083 197 ±0.6612 0938 6466 265 ±0.9324 6951 4203 152	±0.4679 1393 4572 691 ±0.3607 6157 3048 139 ±0.1713 2449 2379 170

Quadratura de Gauss-Legendre

- O erro de truncamento da quadratura é

$$E(f,n) \leq \frac{(b-a)^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)[(2n)!]^3} \max_{a\leq x\leq b} \left|f^{(2n)}(x)\right| \tag{57}$$

Observe que o termo envolvendo fatoriais decai rapidamente à medida que n cresce, como mostra o gráfico de $\log_{10} \frac{(b-a)^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)[(2n)!]^3}$ ao lado (usando $a=-1$ e $b=1$):



Quadratura de Gauss-Legendre

- Note que a quadratura é definida para uma integral com limites de integração -1 e 1.
- Para integrarmos usando limites a e b quaisquer, fazemos a seguinte troca de variável:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}\right)dx \tag{58}$$

o que, em termos da quadratura, resulta em

$$\int_a^b f(x)dx \cong \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} w_i f\left(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{a+b}{2}\right). \tag{59}$$

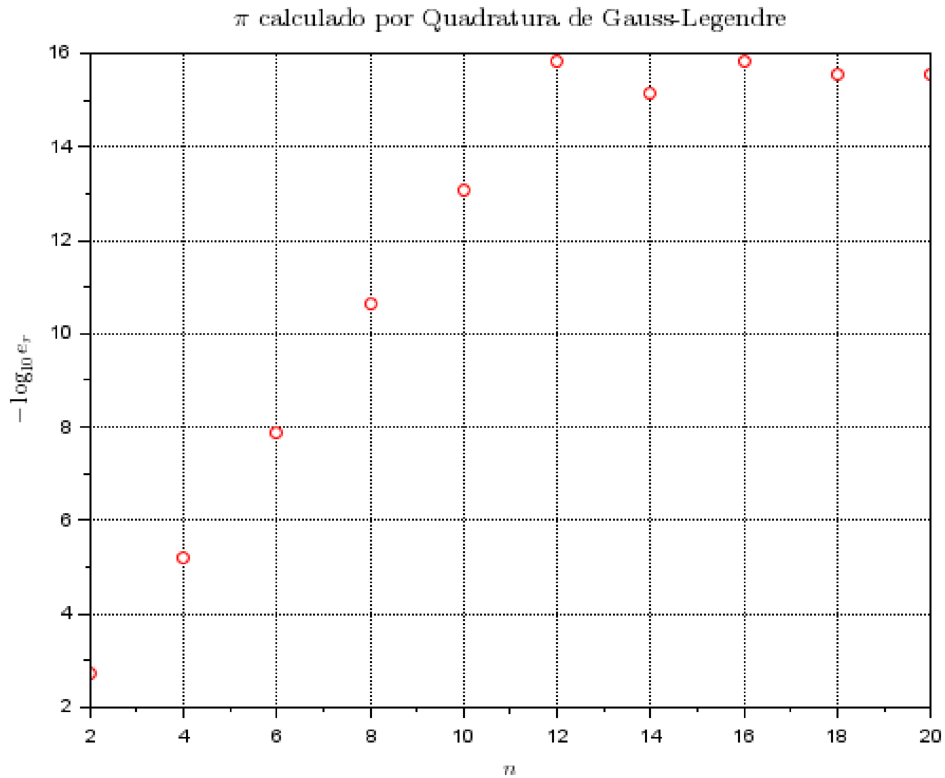
Quadratura de Gauss-Legendre

- A tabela abaixo mostra os resultados obtidos com a quadratura na resolução do problema modelo, para diferentes ordens de quadratura:

n	$Q(n)$	$\boldsymbol{e_r(\pi, Q(n))}$
2	3,14754098360655910	$1{,}893412250620 \times 10^{-3}$
4	3,14161190524580558	$6{,}127992434177 \times 10^{-6}$
8	3,14159265351911854	$2{,}249641665696 \times 10^{-11}$
16	3,14159265358979356	$1{,}413579858428 \times 10^{-16}$
18	3,14159265358979400	$2{,}827159716856 \times 10^{-16}$
20	3,14159265358979400	$2{,}827159716856 \times 10^{-16}$

Quadratura de Gauss-Legendre

- O gráfico a seguir evidencia que há um limite, no problema modelo, para além do qual não é vantajoso usar ordens maiores de quadratura, pois a exatidão da solução chega a piorar:



Problemas típicos da integração numérica

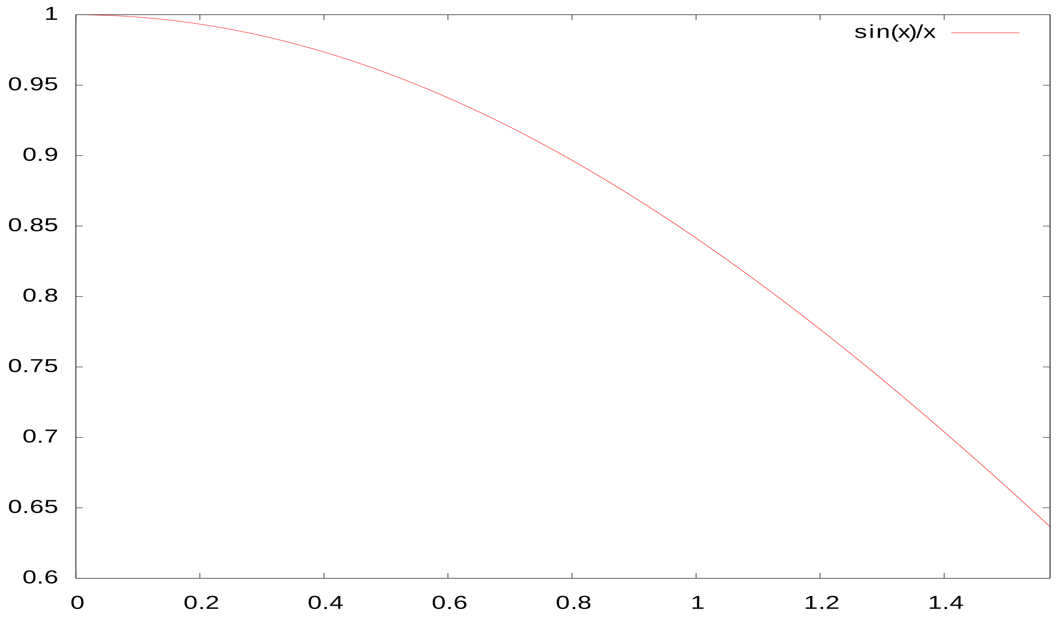
- Alguns problemas típicos
  - O que fazer quando:
    - Um dos limites de integração (ou os dois) causam uma indeterminação do integrando?
    - A curva apresenta uma assíntota vertical?
    - A curva apresenta uma assíntota horizontal?

Alguns problemas típicos

- Indeterminação do integrando
  - Por exemplo, considere a integral

$$\int_0^{\pi/2} \frac{\sin x}{x}\, dx$$

e o gráfico da função integranda:



- Alguns problemas típicos
  - Indeterminação do integrando
    - Evidentemente, a função integranda não pode ser codificada de forma ingênua: poderíamos escrever, em Scilab, uma *function* como

```
function [y]=f(x)
   if abs(x)>0.0 then
      y=sin(x)/x
   else
      y=1
   end
endfunction
```

Alguns problemas típicos

- Indeterminação do integrando
  - Porém, mesmo isso não seria adequado, já que

$$\frac{\sin x}{x} = 1, x \ll 1.$$

  - Por exemplo, usando o Scilab (cujos cálculos são feitos em precisão dupla), para

$$x = \sqrt{\varepsilon_M} = 1{,}490116119385 \times 10^{-8}$$

obtemos $\frac{\sin x}{x} = 1$. No entanto, se $x = 2\sqrt{\varepsilon_M}$, o valor calculado é $\frac{\sin x}{x} = 0{,}99999999999999998900$.

Alguns problemas típicos

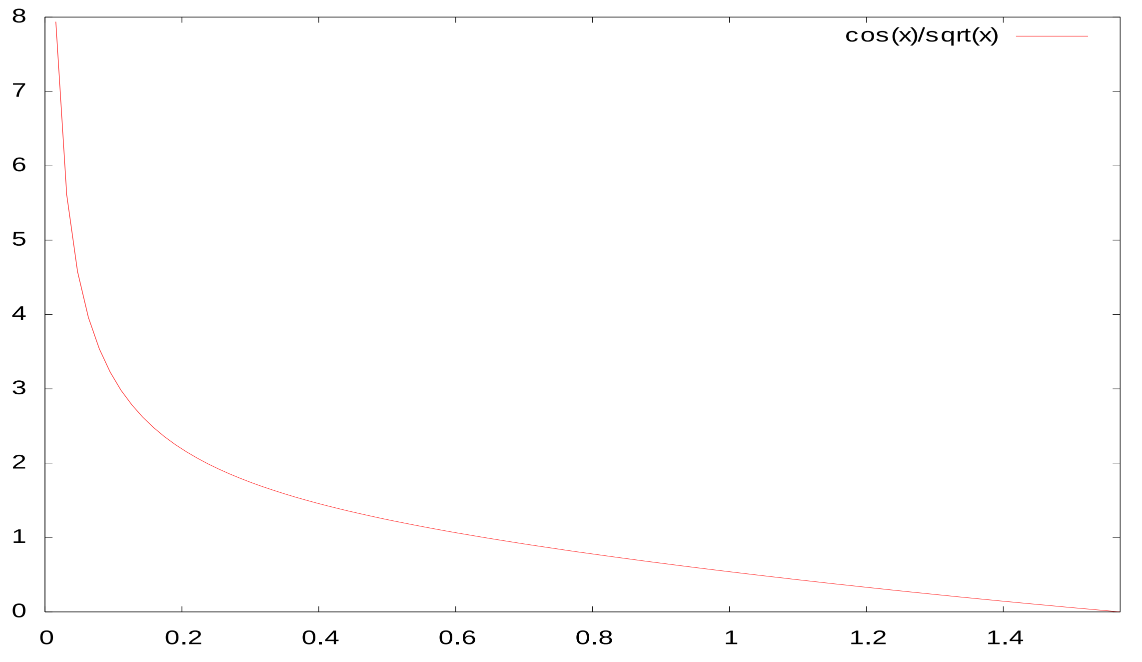
- Indeterminação do integrando
  - No entanto, obteríamos um resultado mais acurado se, para x pequeno, calculássemos a função integranda, substituindo a função seno pelos primeiros termos da série de Taylor:

```
function [y]=f(x)
   if abs(x)<0.1 then
     y=1-x**2*(1-x**2/20)/6
   else
     y=sin(x)/x
   end
endfunction
```

Alguns problemas típicos

- Assíntota vertical do integrando
  - Considere a integral

$$\int_0^{\pi/2} \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx$$



Alguns problemas típicos

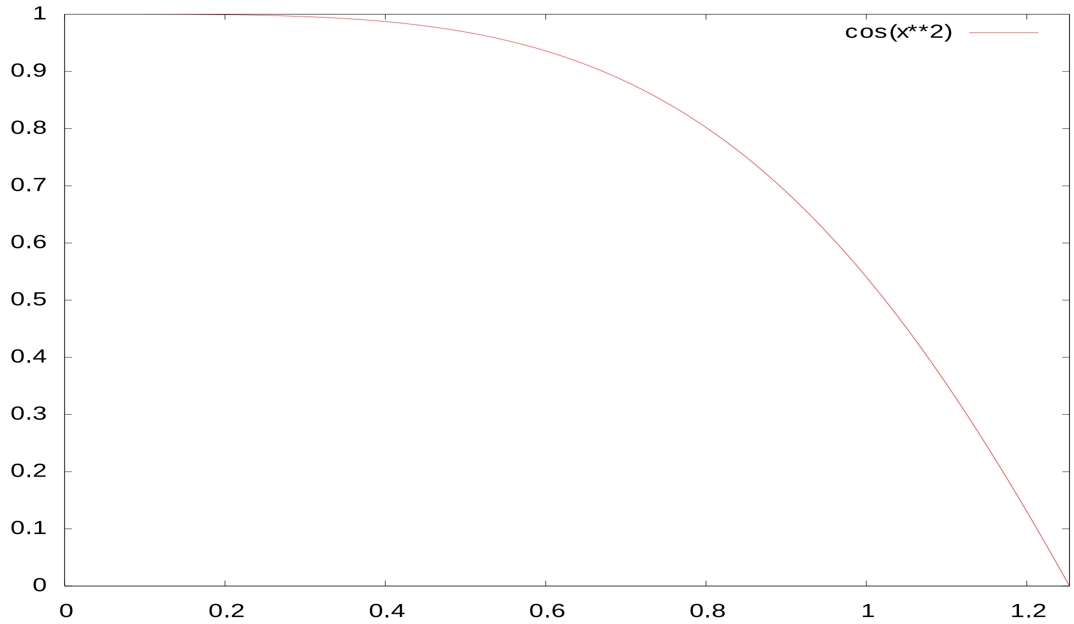
- Assíntota vertical do integrando
  - Afora o fato de haver uma indeterminação do integrando em $x = 0$, o problema aqui é como medir bem a área sob a curva, já que ela cresce para $+\infty$ perto de $x = 0$.
  - A solução é proceder a uma troca de variável e obter uma expressão equivalente que é mais amena à integração numérica.

Alguns problemas típicos

- Assíntota vertical do integrando
  - Por exemplo, fazendo $x = u^2$, $dx = 2u\,du$, de onde

$$\int_0^{\pi/2} \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx = 2\int_o^{\sqrt{\pi/2}} \cos u^2\,du$$

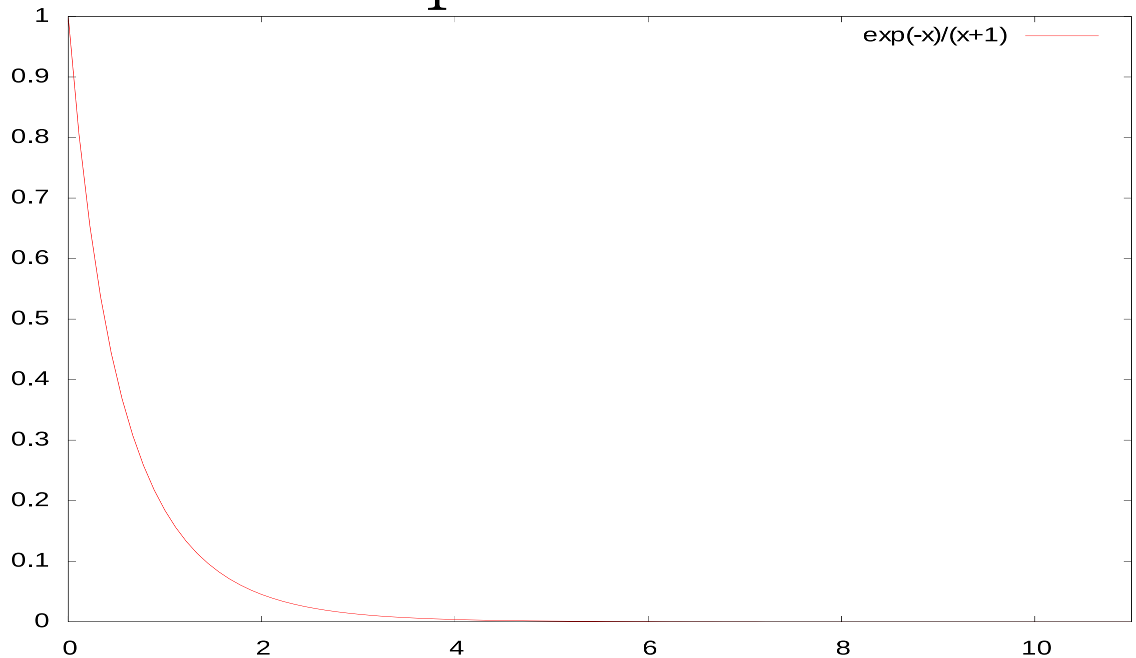
a qual é completamente amena à integração numérica!



Alguns problemas típicos

- Assíntota horizontal do integrando
  - Considere a integral

$$\int_1^\infty \frac{e^{-x}}{x+1}\,dx$$



Alguns problemas típicos

- Assíntota horizontal do integrando
  - Observe que a função integranda, nesse exemplo, é benigna à integração numérica.
  - Porém, ela logo se torna próxima de zero:

x	$\dfrac{e^{-x}}{x+1}$
2	0.0451 1176 1079
4	0.0036 6312 7780
8	0.0000 3727 3630

Alguns problemas típicos

- Assíntota horizontal do integrando
  - Ou seja, será um desperdício de esforço computacional se usarmos uma integração numérica para, p.ex., o intervalo $[0; 10]$.
  - A estratégia aqui é novamente uma troca de variável: fazendo $x = y^{-1}$, $dx = -y^{-2}\,dy$, de onde obtemos
$$\int_0^1 \frac{e^{-y^{-1}}}{1+y}\frac{dy}{y}$$
  - Com essa troca de variável, eliminamos o limite de integração $+\infty$, porem devemos tomar dois cuidados:
    - O integrando não pode ser avaliado quando $y = 0$;
    - O integrando não pode ser avaliado quando $e^{-y^{-1}}$ for tão pequeno que ocorra *underflow.*