Comparação entre a integração numérica aproximada pela regra de Simpson e pela Quadratura de Gauss

Mateus Akira Moraes Yamaoka

18 de Outubro de 2017

1 Objetivos

O projeto de iniciação científica objetiva a otimização da integração numérica de uma função, ou seja, ajustar a integração de forma a usar o menor número de pontos de integração possível para um intervalo, afim de obter o resultado com a margem de erro consideravelmente baixa. Desse modo, esse estudo foi realizado com o intuito de se familiarizar com a integração numérica e o programa Wolfram Mathematica e o estudo de dois métodos de integração numérica.

Dentro da diversas alternativas numéricas para aproximar a integral de uma função, foi escolhido a Regra de Simpson e a Quadratura de Gauss afim de comparar a precisão dessas com a integral propriamente dita. Ainda, esse estudo objetiva mostrar a eficiência dos métods acima, ou seja, mostrar a convergência para um resultado aceitavelmente próximo ao real com menor número de pontos de integração possível.

2 Metodologia e Resultados

2.1 Regra de Simpson

A aproximação de Simpson é uma integração numérica proposta pelo matemático inglês Thomas Simpson (1710-1761) para integrais definidas com intervalos igualmente espaçados. O método usa uma paráboloa *P(x)* para aproximar a função *f(x)*. Não será discutida a demonstração do método, mas a expressão de aproximação é dada por:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{6}[f(a) + 4f(\frac{(b-a)}{2}) + f(b)] \tag{1}$$

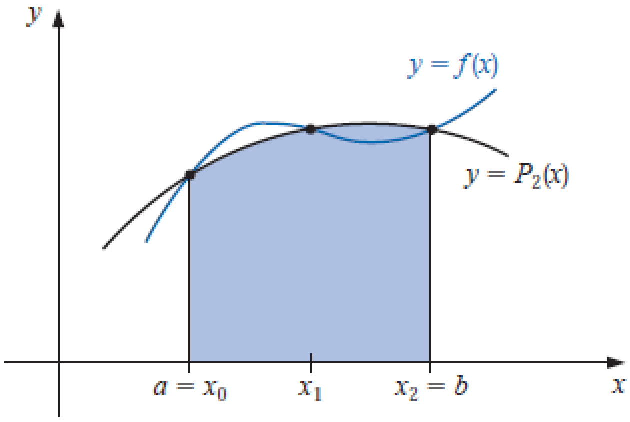

Figura 1: Aproximação de y=*f(x)* por y=P_2*(x)*.

Para casos em que o intervalo [a,b] seja pequeno a ponto que a função *f(x)* seja suave, a aproximação de Simpson calcula a integral exatada para esse intervalo. Incialmente o intervalo [a,b] pode não ser suficientemente pequeno para que a aprximação convirja para o valor exato. Nessas situações é possível quebrar o intervalo em subintervalos menores e aplicar a regra de Simpson para cada um desses subintervalos. A aproximação da integral de *f(x)* nesse caso será dada pela soma da aproximação de cada intervalo. Para o caso em que divide-se o intervalo [a,b] em subintervalos para obter a aproximação mais exatada da função, a regra é chamda de Simpson Composta.

Em Simpson Composto divide-se o intervalo [a,b] em n subintervalos, sendo n um número par. Então, a aproximação da função *f(x)* é dada por:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{3n}[f(a) + \sum_{i=1}^{(n/2)-1} 4f(x_{2j}) + \sum_{i=1}^{(n/2)-1} 4f(x_{2j-1}) + f(b)] \quad (2)$$

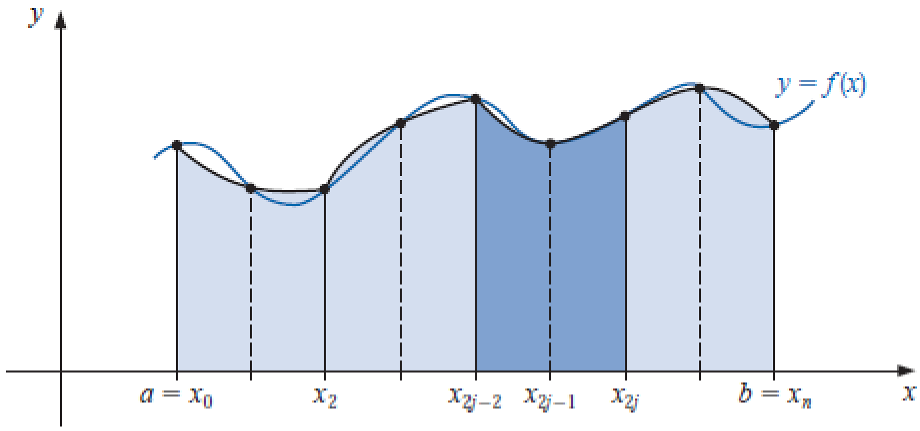

Figura 2: Aproximação de *y=f(x)* pela soma das integrais dos subintervalos [a,b].

2.2 Quadratura Gaussiana

A Quadratura Gaussiana, assim como a regra de Simpson, é um método de aproximação numérico para integrais definidas. Contudo, para uma aproximação utilizando n pontos de integração, o valor da integral será exato para polinômios de até $2n-1$ ordem. O método da Quadratura Gausiana propõe abscissas ótimas para o cálculo afim de minimizar o erro, como representado na Figura 3 por x_1 e x_1, ao invés de usar os pontos das extremidades do intervalo [a,b]. Ainda, são levados em considerações os fatores denominados pesos w_i.

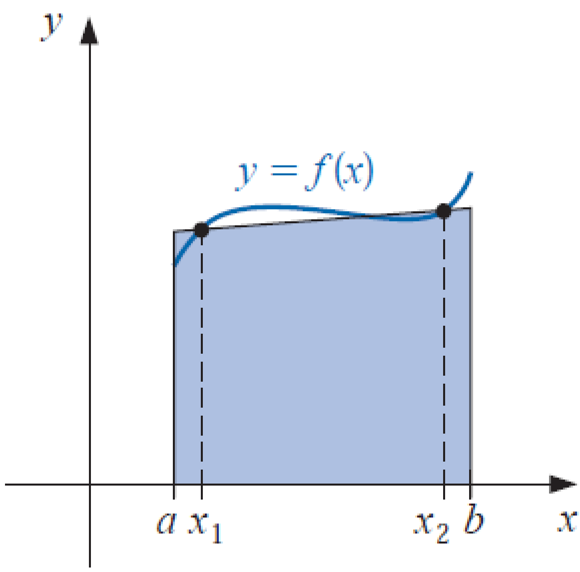

Figura 3: Escolha de abscissas ótimas para a integração de *f(x)*

É possível utilizar os polinômios de Legendre para determinar os pontos das abscissas x_i para o intervalo [-1,1], dados como as raízes do polinômio de Legendre (P_n) para ordem n. E os pesos w_i são dados por:

$$w_i = \frac{2}{(1-x_i^2)[P_n'(x_i)]^2} \tag{3}$$

Então, com os pesos e abscissas determinados para n pontos de integração, a aproximação é dada por:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \tag{4}$$

Dessa forma obtém-se o valor da integração para os limites [-1,1], porém os limes de integração podem ser difentes desse, para isso, coverte-se os limites de integração para qualquer intervalo [a,b] por:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{b+a}{2}) \approx \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} w_i f(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{b+a}{2}) \tag{5}$$

2.3 Programação

Foi utilizado o programa Wolfram Mathematica para analisar o desempenho dos métodos de Simpson e a Quadratura Gaussiana. Assim, foram escritos dois métodos de resolução, um para cada aproximação. Para ambos os métodos foram definidos a mesma função *f(x)*, o memos intervalo de integração [a,b] e um fator p. Para a Quadratura de Gauss o valor de p será o número de pontos de integração e para a Regra de Simpson, ese valor será a metade do número de sub intervalos criados. Ainda, foi adotada a precisão de 10^{-10} como sendo um valor aceitavelmente próximo ao valor da integral, ou seja, quando o valor aproximado pelos métodos tiver uma diferença menor que 10^{-10} com relação ao valor real da integral, é cosiderado que o método convergiu exatamente.

Abaixo seguem três exemplos do funcionamento dos métodos, mostrando a relação entre os erros gerados para cada número de pontos/subintervalos:

Para a função $f(x) = cos(2x^2)$, no intervalo de [0,1] com $p = 10$ (20 subintervalos para a Regra de Gauss e 10 pontos para a Quadratura de Gauss), temos:

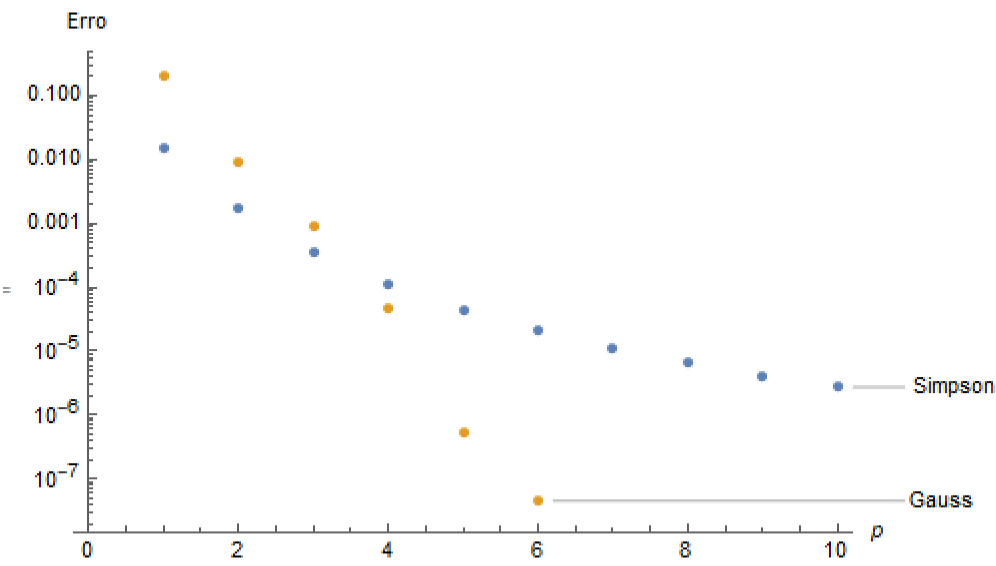

Figura 4: Comparação de erros para $f(x) = cos(2x^2)$

O tempo que o Mathematica demorou para calcular os erros para a Regra de Simpson foi de 0.00217304 segundos, enquanto pela Quadratura Gaussiana o programa levou 0.00494727 segundos.

Para os mesmos parâmetros escolhidos anteriormente, mas para a função $f(x) = e^{x^2}$ temos:

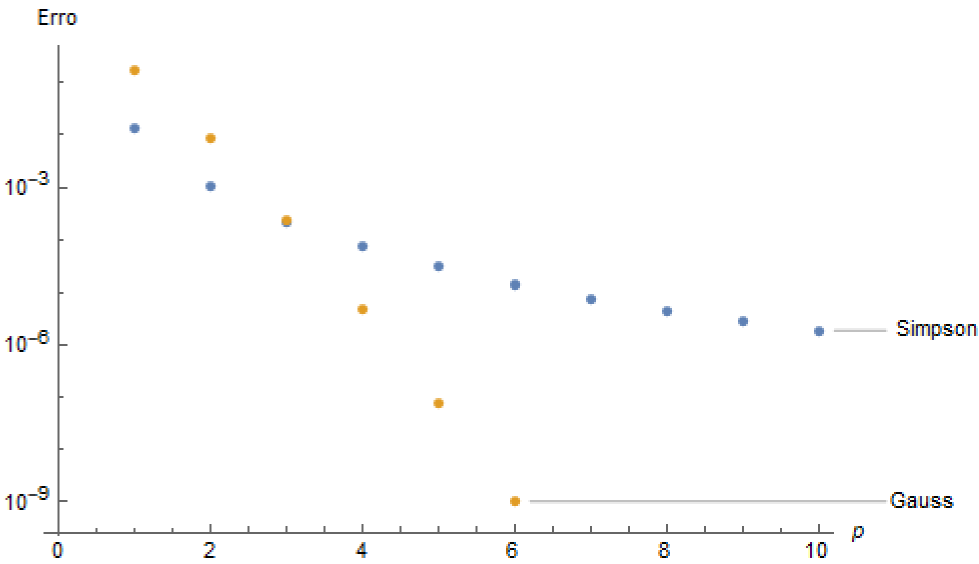

Figura 5: Comparação de erros para $f(x) = e^{x^2}$

O tempo que o Mathematica demorou para calcular os erros para a Regra de Simpson foi de 0.0187616 segundos, enquanto pela Quadratura Gaussiana o programa levou 0.00394068 segundos.

Para os mesmos parâmetros escolhidos anteriormente, mas para a função $f(x) = x^{21} + 3x^7 + 45x^2$ temos:

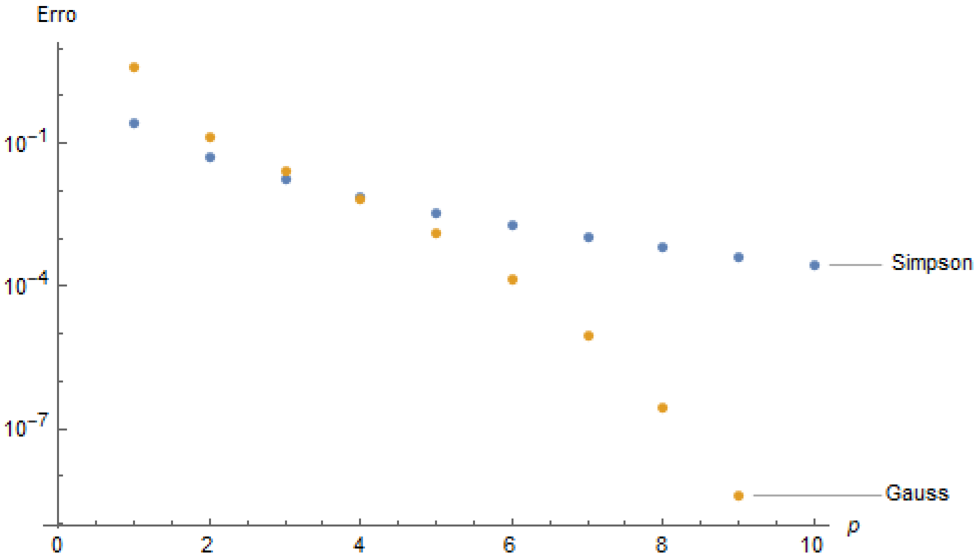

Figura 6: Comparação de erros para $f(x) = x^{21} + 3x^7 + 45x^2$

O tempo que o Mathematica demorou para calcular os erros para a Regra de Simpson foi de 0.00387437 segundos, enquanto pela Quadratura Gaussiana o programa levou 0.00406029 segundos.

Para esse exemplo foi aumentado o valor de p da Regra de Simpson afim de que ela convergisse e foi notado que para $p = 416$ o valor converge, conforme mostrado abaixo. Isso mostra que para 932 subintervalos do método de Simpson o método converge para um valor com 10^{-10} de diferença do valor da integral exata, enquanto o método da Quadratura de Gauss converge para essa mesma difrença com 10 pontos de integração. Ainda, o método de Simpsons demorou 3.78777 segundos para convergir para o resultado, enquanto o método de Gauss levou 0.00406029 segundos.

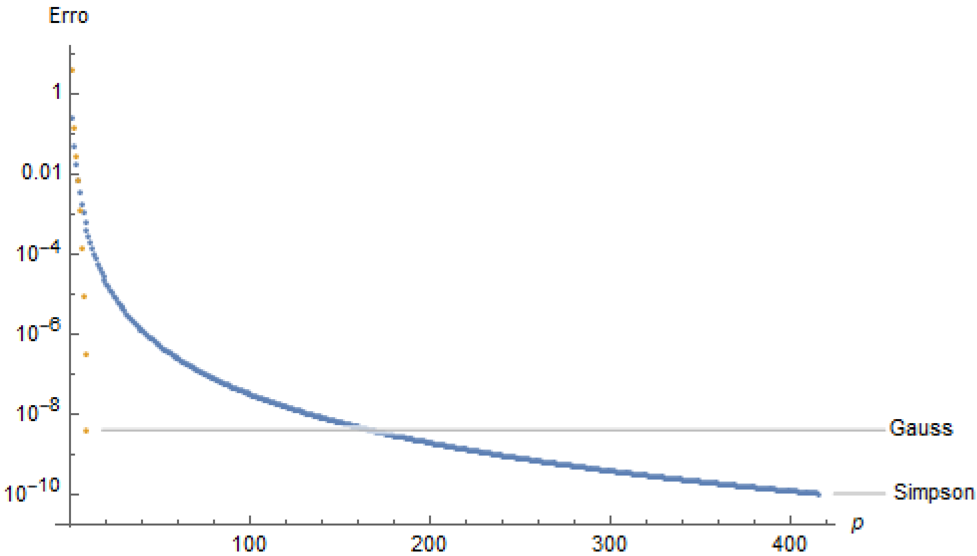

Figura 7: Comparação de erros para $f(x) = x^{21} + 3x^7 + 45x^2$ para ambos os métodos convergindo

3 Análise dos Resultados

Visto os exemplos mostrados no item de Metodologia e Resultados percebe-se que a Quadratura de Gauss tem maior eficiência quando comparado a Regra de Simpsons, o que implica que o primeiro método converge para o resutado da integral de uma função com menos pontos de integração. Ainda, é importante levar em consideração que a curva de erros da Regra de Simpson tende a convergir para o valor exato com um valor grande de subintervalos. Conforme mostrado na Figura 7, foi visto que a curva de Simpson converge com $p = 416$ enquanto Gauss converge com $p = 10$, além de termos uma diferença de tempo de execução do programa de aproximadamente 3.7878 segundos para o método de Simpson contra 0.0041 segundos para o método de Gauss.

Imaginando um cenário em que o intervalo [0,1] estudado seja apenas um pequeno intervalo dentro de um intervalo [a,b], onde um possível estudo se baseie, podem ser necessárias milhares de integrações em pequenos intervalos. Isso implica que para integrar um intervalo [a,b], tavez seja necessário milhares de vezes o tempo necessário para integrar um intervalo pequeno, como o [0,1]. Assim percebe-se que o método de Gauss torna-se mais interessante quando comparado a Rega de Simpson.