A probabilidade de obter o conjunto de medidas para os N valores de y_i $(i=1\ldots N)$ é o produto das probabilidades de cada observação

$$P(a_v,b_v) = \prod_{i=1}^{N} P_i = \left\{ \prod_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{\sigma_i\sqrt{2\pi}} \right) \right\} \exp\left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{y_i - y_v(x_i)}{\sigma_i} \right]^2 \right\} \quad \text{(I)}$$

onde o produto de exponenciais foi expresso como a soma dos argumentos. Nesses produtos e somas quantidades como $1/\sigma_i^2$ atuam como pesos.

De forma similar, p/ qq valores estimados de a e b podemos calcular a probabilidade de obter o conjunto de medidas observadas

$$P(a,b) = \left\{ \prod_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{\sigma_i\sqrt{2\pi}} \right) \right\} \exp\left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{y_i - y(x)}{\sigma_i} \right]^2 \right\} \quad \text{(II)}$$

Vamos assumir que os dados observados são mais prováveis de vir a partir da distribuição "verdadeira" do que qq outra distribuição semelhante com diferentes valores e, portanto, a probabilidade da eq. (I) é a máxima probabilidade atingível com a eq. II.

Assim a estimativa de máxima semelhança ("maximum likehood") p/ a e b são os valores que maximizam a probabilidade da eq. II

Pelo fato de o 1º fator no produtório da eq II ser constante, independente dos valores de a e b, maximizar a probabilidade $P(a,b)$ é equivalente a minimizar a soma na exponencial

$$\chi^2 \equiv \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i}\right]^2 = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{1}{\sigma_i}(y_i - a - bx_i)\right]^2$$

— Nosso método de encontrar a melhor função que se ajusta aos dados será a de encontrar valores a e b que minimizam a soma ponderada dos quadrados dos termos de χ^2.

— Os valores de χ^2 são determinados por

1. Flutuação nos valores medidos y_i
2. Valores das incertezas σ_i; valores incorretos de σ_i levarão a valores incorretos de χ^2
3. A seleção da função analítica $y(x)$ como uma aproximação p/ $y_v(x)$
4. Os valores dos parâmetros da função $y(x)$. Nosso objetivo é encontrar os "melhores valores" desses parâmetros.

Minimizando χ^2

Para encontrar os parâmetros a e b que fornecem o mínimo valor para χ^2 igualamos a zero as derivadas parciais de χ^2 com respeito a cada um deles

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a} = \frac{\partial}{\partial a} \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{1}{\sigma_i^2} (y_i - a - bx_i)^2 \right]$$

$$= -2 \sum \left[\frac{1}{\sigma_i^2} (y_i - a - bx_i) \right] = 0$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial b} = \frac{\partial}{\partial b} \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{1}{\sigma_i^2} (y_i - a - bx_i)^2 \right]$$

$$= -2 \sum \left[\frac{x_i}{\sigma_i^2} (y_i - a - bx_i) \right] = 0$$

Essas equações podem ser rearranjadas como um par de eq. lineares

$$a \sum \frac{1}{\sigma_i^2} + b \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} = \sum \frac{y_i}{\sigma_i^2}$$

$$a \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} + b \sum \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} = \frac{\sum x_i y_i}{\sigma_i^2}$$

Usando a regra de Cramer

$$a = \frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \sum \frac{y_i}{\sigma_i^2} & \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} \\ \sum \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} & \sum \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} \end{vmatrix} = \frac{1}{\Delta}\left(\sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} \sum \frac{y_i}{\sigma_i^2} - \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} \sum \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2}\right)$$

$$b = \frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \sum \frac{1}{\sigma_i^2} & \sum \frac{y_i}{\sigma_i^2} \\ \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} & \sum \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} \end{vmatrix} = \frac{1}{\Delta}\left(\sum \frac{1}{\sigma_i^2} \sum \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} - \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} \sum \frac{y_i}{\sigma_i^2}\right)$$

Onde
$$\Delta = \begin{vmatrix} \sum \frac{1}{\sigma_i^2} & \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} \\ \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} & \sum \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} \end{vmatrix} = \sum \frac{1}{\sigma_i^2} \sum \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} - \left(\sum \frac{x_i}{\sigma_i^2}\right)^2$$

Para o caso particular que todas as incertezas são iguais $\sigma_i = \sigma$, $i = 1 \dots N$ as fórmulas se reduzem às já estudadas sem pesos.

incerteza dos parâmetros (Bevington & Robinson)

$$\sigma_a^2 \simeq \frac{1}{\Delta} \sum \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}$$

$$\sigma_b^2 = \frac{1}{\Delta} \sum \frac{1}{\sigma_i^2}$$

CAP VI Integração Numérica (ou Quadratura "Quadrature")

Introdução

Objetivo Calcular $I = \int_a^b f(x)\,dx$ numericamente

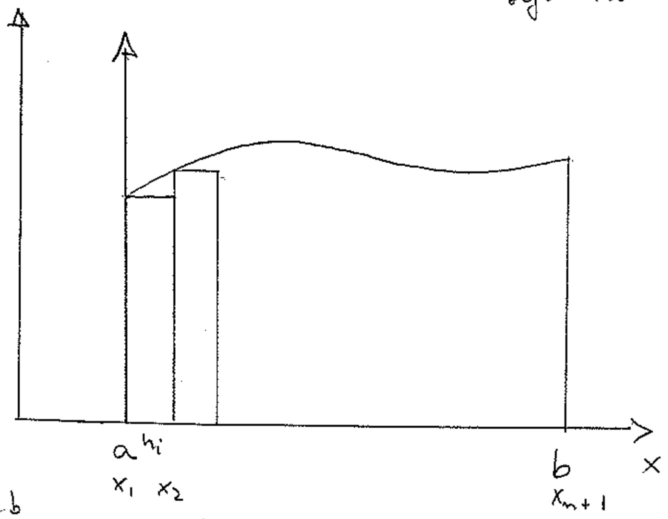
— Integral pode ser complicada ou mesmo impossível de ser feita analiticamente. ex.: $\int_0^1 e^{-x^2} dx$

— Existem vários métodos de integração numérica dos quais estudaremos

- Integração por Retângulos
- Regra do ponto médio
- Regra do Trapézio
- Regra de Simpson
- Regra de Spline
- Romberg
- Quadraturas Adaptativas
- Gauss
- Monte Carlo

Integração por Retângulos

– Seja intervalo $[a,b]$ eixo x



$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} h_i f(x_i) \qquad x_1 = a \qquad h_i = x_{i+1} - x_i$$

$$x_{n+1} = b$$

Expandindo $f(x)$ em serie de Taylor em torno do ponto x_i

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

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

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

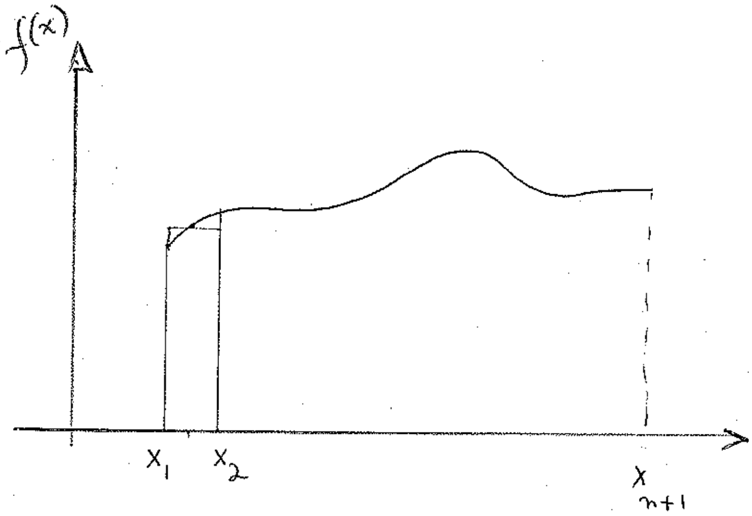
$$= f(x_i)\,h_i + \frac{1}{2} h_i^2 f'(x_i) + \dots$$

ERRO na integral por 1 retangulo é $O(h^2)$

considerando a soma de N intervalos, $N = \frac{b-a}{h}$

ERRO TOTAL $\approx N h^2 \longrightarrow$ ERRO total $O(h)$

Regra do Ponto Médio ("Midpoint Rule")



$$\bar{x}_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2} \quad \text{(ponto médio de } h_i\text{)}$$

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

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

Para avaliarmos o erro vamos expandir $f(x)$ em série de Taylor em torno de $\bar{x}_i$

$$f(x) = f(\bar{x}_i) + (x-\bar{x}_i) f'(\bar{x}_i) + \frac{1}{2}(x-\bar{x}_i)^2 f''(\bar{x}_i) + \frac{1}{3!}(x-\bar{x}_i)^3 f'''(\bar{x}_i) + \frac{1}{4!}(x-\bar{x}_i)^4 f^{IV}(\bar{x}_i)$$

$$I_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(\bar{x}_i)\,dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-\bar{x}_i) f'(\bar{x}_i)\,dx + \frac{1}{2}\int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-\bar{x}_i)^2 f''(\bar{x}_i)$$

$$+ \frac{1}{6}\int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-\bar{x}_i)^3 f'''(\bar{x}_i) + \frac{1}{24}\int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-\bar{x}_i)^4 f^{IV}(\bar{x}_i)$$

$$\text{Mas} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-\bar{x}_i)^p\, dx = \begin{cases} h_i & (p=0) \\ 0 & (p=1) \\ \dfrac{h_i^3}{12} & (p=2) \\ 0 & (p=3) \\ \dfrac{h_i^5}{80} & (p=4) \end{cases}$$

A integral no intervalo $[x_i\,,\,x_{i+1}]$ será

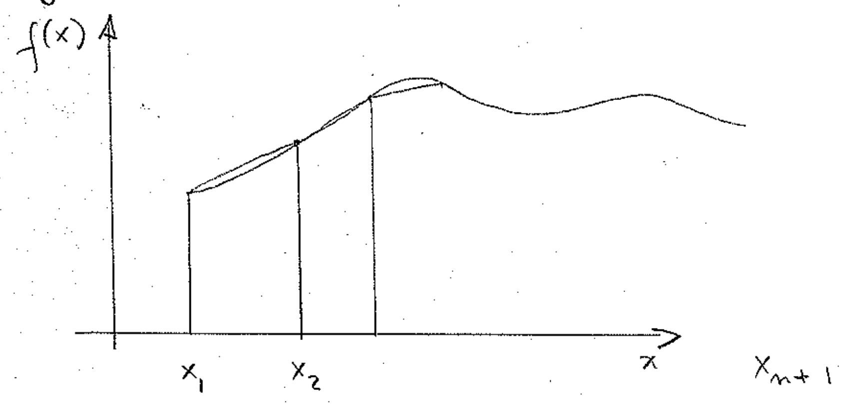
$$I_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx = \underbrace{h_i\, f(\bar{x}_i)}_{M_i} + \frac{1}{24} h_i^3 f''(\bar{x}_i) + \frac{1}{1920} h_i^5 f^{IV}(\bar{x}_i)$$

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

erro na regra do ponto médio

erro total $O(h^2)$

Regra do Trapézio



$$I_i \approx \frac{\text{base} + \text{base}}{2} \times \text{altura} = \underbrace{h_i \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2}}_{T_i}$$

$$I \approx T = \sum_{i=1}^{n} h_i \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2}$$

equidistantes $\Rightarrow T = \frac{h}{2}\left[f_1 + 2f_2 + 2f_3 + \ 2f_n + f_{n+1}\right]$

Cálculo do erro na Regra do Trapézio

Pelo Teorema Fundamental do Cálculo, existe uma função F tal que $F'(x) = f(x)$. O erro na Regra do Trapézio será dado por

$$I_i - T_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} F'(x)\,dx - \frac{h}{2}\left\{ f(x_i) + f(x_{i+1}) \right\} =$$

$$= F(x_i + h) - F(x_i) - \frac{h}{2}\left\{ f(x_i) + f(x_i + h) \right\}.$$

Expandindo o primeiro e o último termo em série de Taylor

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

$$- F(x_i)$$

$$- \frac{h}{2} f(x_i)$$

$$- \frac{h}{2} f(x_i) - \frac{h^2}{2} f'(x_i) - \frac{h^3}{4} f''(x_i) + \dots$$

$$= -\frac{h^3}{12} f''(x_i) + O(h^4)$$

erro em um subintervalo

Se somarmos N subintervalos, onde $N = \frac{b-a}{h}$, teremos um erro total $\approx O(h^2)$

Exemplo: Estime $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ usando a regra do trapézio tomando $N=2,4,8,16$. (O Valor da integral é 0.746824133 c/ precisão até 9 decimais)

$$T = \frac{h}{2}\left[f_1 + 2f_2 + 2f_3 + \dots + 2f_n + f_{n+1} \right]$$

$N=2$, $h=0.5$

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

$N=4$, $h=0.25$

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

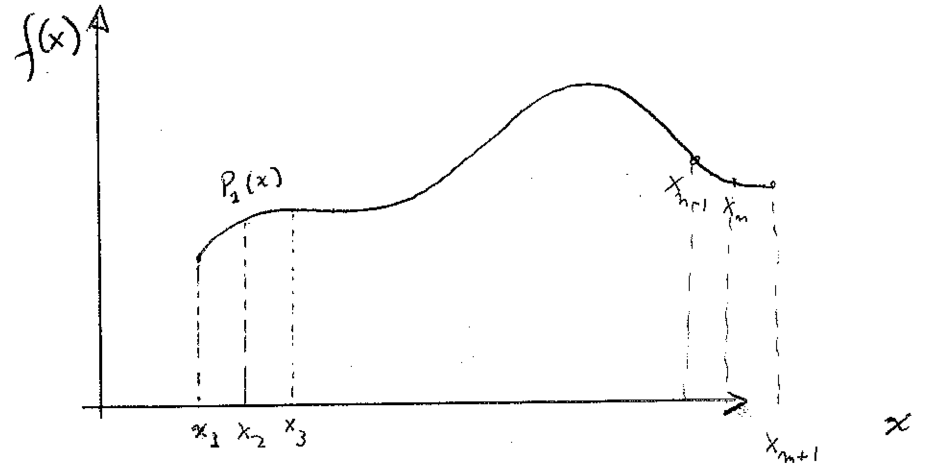
$N=8$, $h=0.125$

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

$N=16$, $h=0.0625$

$$\int_0^1 f(x)dx \approx 0.7465846$$

Regra de Simpson



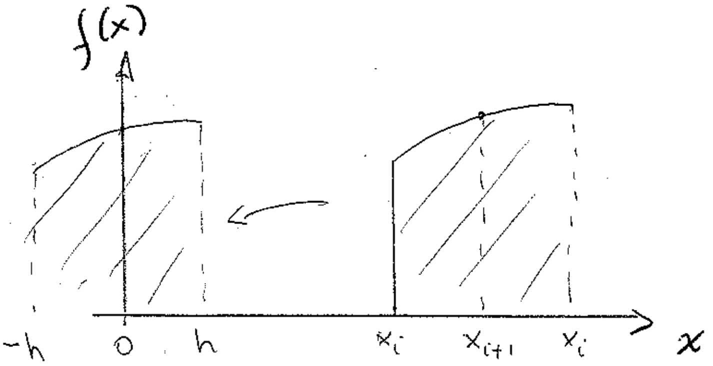
$$S = \sum_{i=1}^{n/2} S_i = \sum_{i=1}^{n/2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_i(x)\, dx$$

$P_i(x)$ - polinômio do 2º grau passando por

$x_i , f(x_i)$

$x_{i+1} , f(x_{i+1})$

$x_{i+2} , f(x_{i+2})$



Como não estamos interessados no polinômio em si mas em sua integral definida é mais simples trabalharmos no intervalo $(-h, y_i)$ $(0, y_{i+1})$ e $(h ; y_{i+2})$

$$p(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} y_1 + \frac{(x-x_1)}{(x_2-x_1)} \frac{(x-x_3)}{(x_2-x_3)} y_2 + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} y_3$$

$$= \frac{x\,(x-h)}{(-h)(-h-h)} y_i + \frac{(x+h)}{h} \frac{(x-h)}{(-h)} y_{i+1} + \frac{(x+h)\,x}{[h-(-h)]\,h} y_{i+2}$$

$$p(x) = \frac{1}{2h^2}\left\{x(x-h)\,y_i - 2(x+h)(x-h)\,y_{i+1} + x(x+h)\,y_{i+2}\right\}$$

$$\int_{-h}^{h} p(x)\,dx = \frac{1}{2h^2}\left\{y_i \int_{-h}^{h} x(x-h) - 2y_{i+1}\int_{-h}^{h}(x+h)(x-h)\,dx + y_{i+2}\int_{-h}^{h} x(x+h)\,dx\right\}$$

$$\int_{-h}^{h} x(x-h)\,dx = \int_{-h}^{h}(x^2-hx)\,dx = \left.\frac{x^3}{3}\right|_{-h}^{h} - \cancel{\left. h\frac{x^2}{2}\right|_{-h}^{h}}^{\,0} = \frac{2}{3}h^3$$

$$\int_{-h}^{h}(x+h)(x-h)\,dx = \int_{-h}^{h}(x^2-h^2)\,dx = \left.\frac{x^3}{3}\right|_{-h}^{h} - \left. h^2x\right|_{-h}^{h} = \frac{2}{3}h^3 - 2h^3 = -\frac{4}{3}h^3$$

$$\int_{-h}^{h} x(x+h) = \int_{-h}^{h}(x^2+hx)\,dx = \left.\frac{x^3}{3}\right|_{-h}^{h} + \left. h\frac{x^2}{2}\right|_{-h}^{h} = \frac{2}{3}h^3$$

Susbstituindo temos

$$\int_{-h}^{h} p(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(y_i + 4y_{i+1} + y_{i+2}\right), \qquad y_i = f(x_i) = f_i$$

Somando a integral de todos os polinômios

$$S = \frac{h}{3}\Big[(f_1 + 4f_2 + f_3) + (f_3 + 4f_4 + f_5) + \dots + (f_{n-1} + 4f_n + f_{n+1})\Big]$$

$$= \frac{h}{3}\Big[f_1 + 4f_2 + 2f_3 + 4f_4 + 2f_5 + 4f_6 + \quad + 2f_{n-1} + 4f_n + f_{n+1}\Big]$$

$$= \frac{h}{3}\Big[f_1 + f_{n+1} + 4\sum_{\substack{i=2\\ \text{pares}}}^{n} f_i + 2\sum_{\substack{i=3\\ \text{ímpares}}}^{n-1} f_i\Big]$$

Erro no Método de Simpson

$F'(x) = f(x)$

$$I - S = \int_{x_i}^{x_{i+2}} F'(x)\,dx - \frac{1}{3}h\left\{f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})\right\}$$

$$= F(x_i+2h) - F(x_i) - \frac{1}{3}h\left\{f(x_i) + 4f(x_i+h) + f(x_i+2h)\right\}$$

$$= F(x_i) + (2h)f(x_i) + \frac{(2h)^2}{2}f'(x_i) + \frac{(2h)^3}{6}f''(x_i) + \frac{(2h)^4}{4!}f'''(x_i) + \frac{(2h)^5}{5!}f^{IV}(x_i) + \dots$$

$$- F(x_i)$$

$$- \frac{h}{3}f(x_i)$$

$$- \frac{4}{3}h\left\{f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!}f''(x_i) + \frac{h^3}{3!}f'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}f^{IV}(x_i) + \dots\right.$$

$$- \frac{1}{3}h\left\{f(x_i) + 2hf'(x_i) + \frac{(2h)^2}{2!}f''(x_i) + \frac{(2h)^3}{3!}f'''(x_i) + \frac{(2h)^4}{4!}f^{IV}(x_i) + \dots\right.$$

$$= \left\{\frac{(2h)^5}{5!} - \left(\frac{4}{3}\frac{h^5}{4!} + \frac{1}{3}\frac{16h^5}{4!}\right)\right\}f^{IV}(x_i) = \frac{h^5}{4!}\left[\frac{32}{5} - \left(\frac{4}{3} + \frac{16}{3}\right)\right]f^{IV}(x_i)$$

$$= \frac{h^5}{4!}\left[\frac{32}{5} - \frac{20}{3}\right]f^{IV}(x_i) = \frac{h^5}{4!}\left[\frac{96-100}{15}\right]f^{IV}(x_i) = -\frac{1}{90}h^5 f^{IV}(x_i) + \dots$$

ERRO TOTAL $S = O(h^4)$

Exemplo: Calcule $\int_0^1 e^{-x^2}dx$ pelo método de Simpson

$N=2$, $h=0.5$, $f(x)=e^{-x^2}$

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\left[f_1 + 4f_2 + f_3\right] = \frac{h}{3}\left[f(0) + 4f(0.5) + f(1)\right] = 0.747180$$

$N=4$, $h=0.25$

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\left[f_1 + 4f_2 + 2f_3 + 4f_4 + f_5\right]$$

$$\approx \frac{h}{3}\left[f(0) + 4f(0.25) + 2f(0.5) + 4f(0.75) + f(1)\right] = 0.746855$$

Observação: Os métodos do Trapézio e de Simpson são dois casos de uma serie de fórmulas de integração chamadas de métodos de <u>Newton-Cotes</u>. Usando o método do trapézio aproximamos segmentos de curva f(x) por linhas retas que então definem trapezóides; no método de Simpson aproximamos a função f(x) por parábolas. Para melhores aproximações podemos usar curvas cúbicas, quárticas e assim por diante e todos esses são Newton-Cotes.

trapézio → dois pontos, 1 intervalo, reta

Simpson → três pontos, 2 intervalos, parábola, nº ímpar de pontos.

aprox. cúbica → quatro pontos, 3 intervalos, cúbica (Simpson 3/8)

nº de pontos $3n+1$
4, 7, 10...

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

<u>Regra de Spline</u>

- Obtendo-se $n+1$ pontos de $f(x)$ no intervalo $[a,b]$, substitui-se a função pela curva de spline passando por esses pontos

- No subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$ temos

$$f(x) \approx P_{3,i} = f_i + \alpha_i(x-x_i) + \beta_i(x-x_i)^2 + \gamma_i(x-x_i)^3$$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx \approx \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_{3,i}(x)\,dx = h_i y_i + \frac{1}{2}h_i^2\alpha_i + \frac{1}{3}h_i^3\beta_i + \frac{1}{4}h_i^4\gamma_i$$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{n}\left\{h_i y_i + \frac{1}{2}h_i^2\alpha_i + \frac{1}{3}h_i^3\beta_i + \frac{1}{4}h_i^4\gamma_i\right\}$$

onde $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ são determinados pela interpolação de SPLINE.

- O erro é da ordem de h^5, semelhante à regra de Simpson.

- Vantajoso quando ñ temos pontos equidistantes fornecidos.

RESUMO - FÓRMULAS DE NEWTON-COTES

	Integral	Método	fórmula	ERRO	ERRO TOTAL
	$\int_{x_i}^{x_{i+1}}$	Retângulos	$h_i f(x_i)$	$O(h_i^2)$	$O(h)$
	$\int_{x_i}^{x_{i+1}}$	Trapézios	$h_i \frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}$	$O(h_i^3)$	$O(h^2)$
nº impar de pontos	$\int_{x_i}^{x_{i+2}}$	Simpson 1/3 nº ímpar de pontos	$\frac{h_i}{3}\left[f(x_i)+4f(x_{i+1})+f(x_{i+2})\right]$	$O(h_i^5)$	$O(h^4)$
nº par de pontos	$\int_{x_i}^{x_{i+3}}$	Simpson 3/8 3n+1 pontos	$\frac{3h_i}{8}\left[f(x_i)+3f(x_{i+1})+3f(x_{i+2})+f(x_{i+3})\right]$	$O(h_i^5)$	$O(h^4)$

— Até aqui só apresentamos as fórmulas fechadas de Newton-Cotes ("closed Newton-Cotes formulas") onde a função é bem definida nas extremidades de $[a,b]$. Para os casos em que a função $f(x)$ não é bem definida em a e/ou b (e.g. divergência $\pm\infty$) existem outras fórmulas chamadas abertas ("Open Newton-Cotes formulas). Mais detalhes e as expressões destas fórmulas veja em Numerical Recipes (Press et al.)

Método de Romberg

"Romberg Integration"
"Romberg Extrapolation"

Vimos que o erro total para trapézios é da ordem de $\mathcal{O}(h^2)$. Um exame mais detalhado fornece

$$E_T(h) = Ah^2 + Bh^4 + \dots$$

A e B dependem de f e das suas derivadas mas não de h.

ou

$$I - T(h) = Ah^2 + Bh^4 + \dots \quad (1)$$

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

~~multiplicando (1) por 4 e subtraindo (2) temos~~

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

$$- \quad I - T(2h) = A(2h)^2 + 16Bh^4 + \dots$$

$$3I - [4T(h) - T(2h)] = -12Bh^4 + \dots$$

$$I - \underbrace{[4T(h) - T(2h)]/3}_{\equiv T_1(h)} = -4Bh^4 + \dots$$

Essa aproximação $T_1(h) = [4T(h) - T(2h)]/3 = T(h) + \frac{T(h) - T(2h)}{3}$ difere do valor exato da integral por um termo h^4 enquanto $T(h)$ e $T(2h)$ diferem por um termo $\mathcal{O}(h^2)$

Claramente esse processo pode ser repetido

$$I - T_1(h) = -4Bh^4 + Ch^6 \quad (3)$$

$$I - T_1(2h) = -4B(2h)^4 + C(2h)^6 \quad (4)$$

Fazendo $16 \times (3) - (4)$ temos

$$
\begin{array}{rl}
- & 16\,I - 16\,T_1(h) = -4B\,16\,h^4 + 16\,C\,h^6 + \dots \\
 & I - T_1(2h) = -4B\,(2h)^4 + C\,(2h)^6 + \dots \\
\hline
 & 15I - \left[16\,T_1(h) - T_1(2h)\right] = -48\,C\,h^6 + \dots
\end{array}
$$

$$I - \left[16\,T_1(h) - T_1(2h)\right]/15 = -\frac{48}{15}\,C\,h^6 + \dots$$

$$T_2(h) = \left[16\,T_1(h) - T_1(2h)\right]/15 = T_1(h) + \frac{T_1(h) - T_1(2h)}{15}$$

De forma geral T_n é dado pela relação de recorrência

$$T_n(h) = T_{n-1}(h) + \frac{T_{n-1}(h) - T_{n-1}(2h)}{2^{2n} - 1}$$

que é a fórmula de Romberg com erro proporcional a $h^{2(n+1)}$.

Exemplo: Cálculo de $\int_0^1 e^{-x^2}dx$ usando trapézios e Romberg

h	$T(h)$	$T_1(h)$	$T_2(h)$
0.5	0.7313702		
0.25	0.7429841	0.7468554	
0.125	0.7458656	0.7468261	0.7468241
0.0625	0.7465846	0.7468241	0.7468241

Exercício: Se $S(h)$ é uma aproximação p/ uma integral definida que é determinada pela regra de Simpson, mostre que $S_1(h) = \left[16\,S(h) - S(2h)\right]/15$ que difere de I por $O(h^6)$.

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

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

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

$$I - T(h) = A h^{3/2} \log h + B h^{3/2} + C h^2 + D h^4 + \dots$$

ver Quinney

<u>Exercício</u>: Usando valores de $h = 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$ calcule um valor acurado para I eliminando os termos principais na expressão acima.

Quadratura de Gauss

REFERÊNCIA - CARNAHAN ET. AL (1969)

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

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) \quad , \quad \begin{array}{l} n+1 \text{ valores } w_i \text{ - weight} \\ n+1 \text{ valores } f(x_i) \end{array}$$

Se x_i igualmente espaçados $\rightarrow$ $n+1$ parâmetros w_i a serem determinados

Se x_i não determinados a priori $\rightarrow$ $2n+2$ parâmetros indeterminados

A Quadratura de Gauss também tem a forma acima ~~mas os pontos não são escolhidos equidistantes mas~~ são escolhidos de forma que a soma ponderada forneça exatamente a integral se $f(x)$ é um polinômio de grau $2n+1$ ou menos.

Antes de iniciar o desenvolvimento vamos estudar polinômios ortogonais de Legendre:

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

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

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

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) \quad ; \quad P_n(x) = \frac{2n-1}{n}\, x\, P_{n-1}(x) - \frac{n-1}{n} P_{n-2}(x)$$

que tem propriedades de ortogonalidade

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

$$\int_{-1}^{+1} \left[P_n(x)\right]^2 dx = c(n) \neq 0 \qquad c \text{ é uma cte que depende de } n$$

Um polinômio de ordem arbitrária $p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$ pode ser representado como função linear dos polinômios ortogonais

Exemplo: Expanda um polinômio de quarta ordem $p_4(x)$ em termos de um polinômio de Legendre

$$p_4(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4$$

$$= b_0 P_0(x) + b_1 P_1(x) + b_2 P_2(x) + b_3 P_3(x) + b_4 P_4(x)$$

$$= b_0 1 + b_1 x + b_2 \left(\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}\right) + b_3 \left(\frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x\right) + b_4 \left(\frac{35}{8}x^4 - \frac{15x^2}{4} + \frac{3}{8}\right)$$

igualando os termos de mesma potência

$$b_4 = \frac{8}{35} a_4$$

$$b_3 = \frac{2}{5} a_3$$

$$b_2 = \frac{2}{3}\left(a_2 + \frac{15}{4} b_4\right) = \frac{2}{3}\left(a_2 + \frac{6}{7} a_4\right)$$

$$b_1 = a_1 + \frac{3}{2} b_3 = a_1 + \frac{3}{5} a_3$$

$$b_0 = a_0 + \frac{1}{2} b_2 - \frac{3}{8} b_4 = a_0 + \frac{1}{3} a_3 + \frac{1}{5} a_4$$

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

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