Exercício Programa 2 - Fórmulas de Integração Numérica de Gauss

Mateus Bonelli Salomão 11914789
Pedro Pimentel Fuoco 11804313

Junho de 2022

1 Introdução

Este exercício programa tem como objetivo explorar o método de integração conhecido como Quadratura de Gauss e as chamadas Fórmulas de Integração de Gauss, aplicando-as para a resolução de algumas intgrais duplas. Neste relatório é feita uma breve análise do embasamento teórico e da formulação que origina estas fórmulas.

2 Quadratura de Gauss

Sucintamente, a motivação de um método de integração é aproximar a integral de uma função $f(x)$, dada direta ou indiretamente (por meio de valores tabelados, por exemplo), pela integral de uma função mais simples que a aproxima. Como os polinômios são escolhas convenientes do ponto de vista computacional, o primeiro passo é encontrar uma representação adequada de *polinômios interpoladores* para f.

2.1 Polinômios de Lagrange

Dada uma função $f(x)$ e $n+1$ pontos $((x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \ldots, (x_n, f(x_n)))$, o enésimo polinômio de Lagrange é definido como $P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f(x_i)$, com

$$L_i = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} \tag{1}$$

onde L_i são os chamados *coeficientes de Lagrange.* A definição acima garante que $L_i = \begin{cases} 1, & \text{se } x = x_i; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$

2.2 Aplicação a integrais

Portanto, a integral de uma função genérica pode ser aproximada pela integral de seu polinômio de Lagrange de ordem n, a saber:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x)dx = \int_a^b (\sum_{i=0}^{n} L_i(x) f(x_i))dx$$

Pela propriedade distributiva da integral definida segue:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} (\int_a^b L_i(x) f(x_i)dx) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)(\int_a^b L_i(x)dx)$$

Para cada i $\in (0, 1, \ldots, n)$ o coeficiente de Lagrange de ordem L_i é uma constante, de forma que a integral entre parênteses atua como um peso associado a cada valor da função:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) \tag{2}$$

2.3 Escolha dos nós e polinômios de Legendre

De posse de um polinômio interpolador de ordem n, há diversas maneiras de se escolher os pontos (ou *nós*) $x_i \in [a, b]$ que serão usados na aproximação descrita por (2).

Entretanto, essa escolha pode ser feita de maneira otimizada. Seria desejável, por exemplo, escolher $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ tais que a expressão em (2) fosse exata para f polinômio de ordem $2n - 1$. Isso é possível se os nós corresponderem ás raízes do polinômio de maior ordem de uma base de n polinômios ortogonais.

Isto é, tomando-se $\tilde{P_1}, \tilde{P_2}, \ldots, \tilde{P_n}$ base ortogonal induzida pelo produto interno $< p(x), q(x) >= \int_a^b p(x)q(x)dx$ e com $\tilde{P_n} = (x-x_1)(x-x_2)\ldots(x-x_n)$. Então, para qualquer $q(x)$ menor do que n a integral

$$\int_a^b (x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_n)q(x)dx = 0 \tag{3}$$

De fato, chamando essa integral de I temos

$$I = < \tilde{P_n}, q(x) > = < \tilde{P_n}, \alpha_1\tilde{P_1} + \alpha_2\tilde{P_2} + \cdots + \alpha_n\tilde{P}_{n-1} >$$

Aplicando-se as propriedades do produto interno resulta

$$I = \alpha_1 < \tilde{P_n}, \tilde{P_1} > +\alpha_2 < \tilde{P_n}, \tilde{P_2} > + \ldots \alpha_{n-1} < \tilde{P_n}, \tilde{P}_{n-1} >= 0$$

pois cada produto interno é realizado entre pares de polinômios ortogonais.

Por outro lado, pode-se demonstrar que para uma base de polinômios com a propriedades acima descritas, a aproximação (2) é exata para qualquer polinômio de grau menor do que n.

Mas um polinômio $P(x)$ de grau entre n e $2n - 1$ pode ser escrito como

$$P(x) = Q(x)\tilde{P_n}(x) + R(x)$$

onde Q(x) e R(x) tem grau menor do que n. Então:

$$\int_a^b P(x)dx = \int_a^b Q(x)\tilde{P_n}(x)dx + \int_a^b R(x)dx$$

A primeira integral do lado direito da equação é zero por (3), e pode ser demonstrado que a segunda integral pode ser obtida exatamente utilizando (2). Portanto

$$\int_a^b P(x)dx = \sum_{i=0}^{n} w_i P(x_i) \tag{4}$$

para $P(x) \in \mathcal{P}_{2n-1}$. Uma base de polinômios com propriedades tais como as descritas acima é a dos *polinômios de Legendre*. Essa base é induzida pelo produto interno $< p(x), q(x) >= \int_{-1}^{1} p(x)q(x)dx$, de forma que a fórmula (2) fica:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) \tag{5}$$

Uma mudança de coordenadas deve ser feita para que se possa aplicar eesta equação para aproximar uma integral em um intervalo qualquer.

3 Mudança de variável

Aqui será apresentado a fórmula de Gauss exata para polinômios de grau menor ou igual a 5 em um intervalo [a,b] A transformação que leva [a,b] em [-1,1] é: $t = \frac{2x-a-b}{b-a}$ e portanto $x = \frac{1}{2}[(b-a)t+a+b]$. Dessa forma, a integral $\int_a^b f(x)dx$ se transforma em $\frac{1}{2}(b-a)\int_{-1}^{1} f(\frac{(b-a)t+a+b}{2})dt$. Com isso, para $n = 3$, que está sendo estudado nessa seção, temos: $(x_1, x_2, x_3) = (-\sqrt{0.6}, 0, \sqrt{0.6})$ e $(w_1, w_2, w_3) = (\frac{5}{9}, \frac{8}{9}, \frac{5}{9})$, resultando na seguinte equação final:

$$\int_a^b p(x)dx = \frac{1}{2}(b-a)[\frac{5}{9}p(\frac{-(b-a)\sqrt{0.6}+a+b}{2})+\frac{8}{9}p(\frac{a+b}{2})+\frac{5}{9}p(\frac{(b-a)\sqrt{0.6}+a+b}{2})]$$

4 Construção da fórmula para integrais duplas

Como mencionado, o objetivo prático deste exercício programa é a aplicação da quadratura de Gauss ao cálculo de integrais duplas. Para isso, algumas adaptações devem ser realizadas. Dada uma integral $I = \int_a^b \int_{c(x)}^{d(x)} f(x,y)dydx$, deve-se primeiro transformar a variável y no intervalo $[c(x), d(x)]$ para a variável t no intervalo $[-1, 1]$ e aplicar (5) para a integral interna para cada valor de x $\in [a, b]$ fixo. Assim

$$\int_{c(x)}^{d(x)} f(x,y)dy = \int_{-1}^{1} f(x, \frac{(d(x)-c(x))t + d(x) + c(x)}{2})dt$$

A integral interna fica então

$$I(x) = \frac{d(x)-c(x)}{2} \sum_{i=1}^{n} w_i f(x, \frac{(d(x)-c(x))t + d(x) + c(x)}{2})$$

Portanto,

$$I = \int_a^b \frac{d(x)-c(x)}{2} \sum_{i=1}^{n} w_i f(x, \frac{(d(x)-c(x))r_i + d(x) + c(x)}{2})dx$$

onde r_i corresponde ao i-ésimo nó. Aplicando a transformação de coordenadas da seção 3 para x e definindo-se $x(t) = \frac{1}{2}((b-a)t + a + b)$,

$$I = \int_{-1}^{1} \frac{d(x(t)) - c(x(t))}{2} \sum_{i=1}^{n} w_i f(x, \frac{(d(x(t)) - c(x(t))r_i + d(x(t)) + c(x(t)}{2})dt$$

o que fornece por (5)

$$I = \sum_{j=1}^{n} \frac{d(x_t(j)) - c(x_t(j))}{2} \sum_{i=1}^{n} w_i f(x, \frac{(d(x_t(j)) - c(x_t(j))r_i + d(x_t(j)) + c(x_t(j)}{2})$$

com $x_t(j) = \frac{1}{2}((b-a)r_j + a + b)$. Implemetou-se a fórmula acima para resolver as integrais propostas.

Para integrais nas quais o domínio de integração possui extremos fixos em y, o argumento da função em x deve ser transformado pela mudança de variaveis mais interna, envolvendo c(y) e d(y), enquanto y é transformado apenas pela mudança que envolve a e b. Portanto a ordem das variáveis teve de ser invertida na função lambda f do código para que o metodo proposto funcionasse.

5 Tarefas

Para testar o programa, foram utilizados os exemplos fornecidos no enunciado do exercício programa usando a Fórmula de Gauss para n= 6, 8 e 10. Os resultados podem ser verificados rodando o programa, mas aqui estão descritos as integrais duplas que resolvem os problemas propostos e foram colocadas no código:

5.1 Exemplo 1

Cálculo do volume do cubo cujas arestas tem comprimento 1:

$$V_{cubo} = \int_0^1 \int_0^1 (1) dx dy$$

Cálculo do volume do tetraedro de vertices (0,0,0), (1,0,0), (0,1,0) e (0,0,1):

$$V_{tetraedro} = \int_0^1 \int_0^{1-x} (1 - x - y) dy dx$$

As fórmulas de integração de Gauss garantem exatidão nos resultados para polinômios de grau até $2n + 1$. Como a função integrada é, em ambas as variáveis, polinômio de grau menor que $2n + 1$ com $n \geq 6$, o resultado é exato.

5.2 Exemplo 2

A área A da região no primeiro quadrante limitada pelos eixos e pela curva $y = 1 - x^2$:

$$\int_0^1 \int_0^{1-x^2} (1) dy dx$$

Ou, mudando o domínio de integração:

$$\int_0^1 \int_0^{\sqrt{1-y}} (1) dx dy$$

Há uma diferença notável entre as precisões obtidas nos cálculos dessas integrais: a que envolve $\sqrt{1 - y}$ é significativamente menos precisa. Isso é atribuido ao fato do método utilizado garantir precisão apenas para funções polinomiais de graus $2n + 1$, como não se trata de uma função polinomial, o resultado é mais incerto.

5.3 Exemplo 3

Área da superficie descrita por $z = e^{\frac{y}{x}}$, $0.1 \leq x \leq 0.5$, $x^3 \leq y \leq x^2$:

$$\int_{0.1}^{0.5} \int_{x^3}^{x^2} (\sqrt{\frac{x^2}{y^4} e^{2\frac{y}{x}} + \frac{1}{x^2} e^{2\frac{y}{x}} + 1}) dydx$$

Volume debaixo da superficie descrita por $z = e^{\frac{y}{x}}$, $0.1 \leq x \leq 0.5$, $x^3 \leq y \leq x^2$:

$$\int_{0.1}^{0.5} \int_{x^3}^{x^2} (e^{\frac{y}{x}}) dydx$$

5.4 Exemplo 4

Volume da calota esférica de altura 0.25 da esfera de raio 1:

$$\int_{0.75}^{1} \int_{0}^{\sqrt{1-x^2}} (2\pi y) dydx$$

Volume do sólido de revolução obtido da rotação da região delimitada por $x = 0$, $x = e^{-y^2}$, $y = -1$ e $y = 1$ no eixo y:

$$\int_{-1}^{1} \int_{0}^{e^{-y^2}} (2\pi x) dxdy$$