

MAP-3121 - Terceira Tarefa Computacional - 2016
data de entrega: 20/05

Método de Romberg para Integração de Funções

No projeto deste semestre será necessário o uso de uma rotina para integração numérica de funções. Nesta tarefa, você deverá desenvolver uma rotina baseada no método de Romberg para o cálculo da integral definida de uma dada função.

O método de Romberg usa como base o método de n-trapézios, cujas propriedades serão analisadas em detalhe nas aulas da disciplina. O cálculo da integral pelo método dos trapézios é muito simples. Subdivide-se o intervalo de integração em n subintervalos de igual tamanho, aproximando-se a área definida pela integral da função em cada subintervalo pela área do trapézio obtido ao se interpolar os valores da função nos extremos do subintervalo por uma reta.

Vamos introduzir alguma notação. Seja $[a, b]$ o intervalo em que queremos integrar a função $f(x)$. Vamos definir os n subintervalos de $[a, b]$ de espaçamento $h = (b-a)/n$, através da introdução dos pontos $x_i = a + ih, i = 0, 1, \dots, n$. Assim,

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \quad .$$

Aproximando, $\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx$ por $h \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2}$ em cada subintervalo obtemos a fórmula dos n-trapézios (com espaçamento $h = (b-a)/n$):

$$\int_a^b f(x)dx = T(h) = \sum_{i=1}^n h \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} = h \left(\frac{f(x_0)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{f(x_n)}{2} \right) \quad .$$

Mostraremos em aula que o erro de aproximação na integral (para funções $f(x)$ em $C^2[a, b]$) é dado por:

$$E(h) = \int_a^b f(x)dx - T(h) = -(b-a)h^2 f''(y)/12 \quad ,$$

para algum y em $[a, b]$. Esta última relação mostra que o método de n-trapézios é convergente de ordem 2. Para funções de classe $C^{2m+2}[a, b]$ mostra-se através da fórmula de Euler-Maclaurin (veja por exemplo Stoer and Bulirsch, Introduction to Numerical Analysis) que:

$$E(h) = \int_a^b f(x)dx - T(h) = \sum_{k=1}^m c_k h^{2k} + \beta(h)h^{2m+2} \quad ,$$

onde os valores c_k são constantes que dependem da função $f(x)$, mas não do espaçamento h . Esta última expressão é uma "expansão assintótica do erro", e através dela podemos derivar esquemas convergentes de ordem mais alta.

Caso calculemos $T(h)$ e $T(h/2)$ (ou seja a fórmula dos trapézios para n e $2n$), podemos combinar estes valores de forma a eliminar o termo proporcional a h^2 na expansão do erro, obtendo:

$$S(h/2) = \frac{4T(h/2) - T(h)}{3} = \int_a^b f(x)dx - \bar{c}_2 h^4 - \bar{c}_3 h^6 - \dots - \beta(h) h^{2m+2},$$

onde as novas constantes \bar{c}_k resultam desta combinação. Este novo método, aproxima a integral de f pelo valor $S(h/2)$ com erro de ordem 4. Esta mesma idéia pode ser generalizada, combinando valores de $S(h/2)$ com $S(h/4)$ de forma a cancelar o erro de ordem 4 (formando a expressão $R(h/4) = \frac{16S(h/4) - S(h/2)}{15}$, verifique!), aumentando o ordem de convergência para 6, etc. O método de Romberg consiste em uma exploração recursiva desta idéia, sintetizada na tabela a seguir:

$$\begin{array}{ccccccc} T(h) & = & T_{00} & & & & \\ T(\frac{h}{2}) & = & T_{10} & & T_{11} & & \\ T(\frac{h}{2^2}) & = & T_{20} & & T_{21} & & T_{22} \\ & \vdots & & & \vdots & & \vdots \\ T(\frac{h}{2^{n-1}}) & = & T_{n-1,0} & & T_{n-1,1} & & T_{n-1,2} & \dots & T_{n-1,n-1} \\ T(\frac{h}{2^n}) & = & T_{n0} & & T_{n1} & & T_{n2} & \dots & T_{n,n-1} & T_{nn} \end{array}$$

Cada coluna k da tabela acima é obtida da coluna anterior pela expressão

$$T_{ik} = \frac{4^k T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{4^k - 1} = T_{i,k-1} + \frac{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{4^k - 1},$$

onde a segunda igualdade é conveniente do ponto de vista numérico por expressar o novo valor calculado como um valor da coluna anterior mais uma correção.

Todas as entradas da tabela representam uma aproximação para a integral, e o erro entre esta e T_{ik} decai proporcionalmente a $(h/2^{i-k})^{2k+2}$. Em particular, o erro entre T_{nn} e a integral decai como h^{2n+2} , o que nos dá um método de integração de ordem alta. Note que a coluna $k = 0$ é construída usando-se a fórmula dos trapézios, com o espaçamento h sendo reduzido por um fator dois a cada passo. Mais adiante mostramos como usar este fato.

O método de Romberg pode ser implementado iterativamente da seguinte forma. Fixe um valor de n (em geral n entre 4 e 6 é suficiente). Construa a tabela acima a partir dos valores $T(h_i)$, $i = 0, \dots, n$, onde $h_i = (b-a)/2^i$. Se o valor T_{nn} obtido for satisfatório (ver abaixo), pare. Senão, descarte h_0 e acrescente h_{n+1} , e repita o processo começando com $T(h_{i+1})$, $i = 0, \dots, n$. E assim sucessivamente.

Um critério de parada que funciona bem na prática consiste em especificar uma tolerância ϵ , e parar a execução do processo caso o erro relativo entre T_{nn} e $T_{n,n-1}$ seja menor do que ϵ . Isto significa que a última entrada da tabela não

difere significativamente, dentro da precisão escolhida, de seu vizinho da coluna anterior, e estamos acreditando que daí em diante não haverá ganho de precisão. Um número máximo de iterações também deve ser especificado.

Implementação

Implemente o método de Romberg conforme descrito acima (em c ou python). O subprograma para o cálculo da integral deve ser da forma

$$\mathbf{romb}(a, b, n, \epsilon, ITMAX)$$

onde os parâmetros são: a e b , extremos do intervalo de integração; n , número inteiro especificando quantos valores são usados na coluna $k = 0$ ($n + 1$ valores); ϵ , tolerância; e $ITMAX$, número máximo de iterações. A execução deve parar quando pelo menos uma das condições abaixo for verificada:

- (i) $|T_{nn} - T_{n,n-1}| \leq \epsilon * |T_{nn}|$;
- (ii) número de iterações = $ITMAX$.

Trapézios

A fórmula dos trapézios pode ser implementada de forma eficiente em um processo iterativo, duplicando-se o número de intervalos a cada passo de modo que valores calculados anteriormente possam ser aproveitados. Se considerarmos $h_0 = (b - a)$, e $h_i = h_{i-1}/2$, $i = 1, 2, \dots$ (i.e. $N_i = 2^i$), então

$$T(h_i) = \frac{1}{2}T(h_{i-1}) + h_i \sum_{j=1}^{2^{i-1}} f[a + (2j - 1)h_i].$$

Note que para obter o próximo passo, precisamos calcular os valores de f apenas nos novos pontos acrescentados. Para o uso da fórmula dos trapézios, implemente uma rotina separada da forma

$$\mathbf{trapz}(a, b, t, i)$$

onde o parâmetro de entrada e saída t recebe o valor calculado pela fórmula dos trapézios com 2^{i-1} intervalos e retorna o valor calculado pela fórmula dos trapézios com 2^i intervalos (no caso $i = 0$, a rotina simplesmente retorna em t o valor calculado pela fórmula dos trapézios com um intervalo). Esta rotina deve ser usada pela rotina do método de Romberg.

Observações:

- Lembre-se que estas rotinas serão usadas como parte de seu projeto.
- O prazo de entrega desta tarefa no graúna é até 20/05.

- Esta tarefa pode ser realizada em dupla. Seu parceiro deve ser o mesmo que realizará o projeto com você, ou seja, deve ser alguém da mesma área de engenharia que a sua. Apontem claramente os nomes compondo a dupla! A tarefa deve ser entregue apenas pelo primeiro (segundo a ordem alfabética) membro da dupla.
- Além do fonte de seu programa entregue uma folha (em pdf) com os resultados dos testes abaixo.

Testes

Para os testes abaixo, use $\epsilon = 10^{-6}$, o que deve dar resultados próximos da precisão simples, e $n = 4$.

- (a) **Integrando regular:** Calcule

$$\int_0^2 x^4 \ln(x + \sqrt{x^2 + 1}) dx$$

pelo método de Romberg. Compare o número de iterações com o que seria necessário usando apenas o método dos trapézios e o custo em termos de quantas avaliações do integrando são requeridas.

- (b) **Crescimento rápido da derivada:** Na integral

$$\int_0^{0.995} \frac{dx}{1-x} = \ln(200)$$

a inclinação do integrando é alta próximo do extremo superior, apesar de ele ser regular. Calcule a integral pelo método de Romberg e veja quantas iterações são necessárias.

- (c) **Integrando periódico:** A função de Bessel de ordem zero pode ser calculada por:

$$J_0(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(x \sin(\theta)) d\theta.$$

Calcule $J_0(1)$ pelo método de Romberg.

- (d) **Derivada infinita:** Use o método de Romberg para calcular

$$\int_0^{\pi/2} \sqrt{x} \cos(x) dx.$$

O integrando não tem derivada na origem e portanto a convergência não deve ser boa. Faça a mudança de variável $y = x^2$ e calcule novamente a integral. O que aconteceu?

- (e) **Elipse:** Determine o perímetro de uma elipse de eixos de comprimento 2 e 3.