Integração com singularidades ou derivadas descontínuas

- Os métodos numéricos trabalham bem com integrandos suaves.
- Se existe um pólo ou descontinuidade pode ocorrer problemas.
- Podemos converter a integral original em outra equivalente

Quadratura Gaussiana

- A quadratura gaussiana fornece um resultado bem mais preciso que os métodos vistos anteriormente usando número de pontos semelhantes.
- Neste método, os pontos não são mais escolhidos pela pessoa que utiliza o método, mas segue um critério bem definido.
- O problema consiste em resolver a integral:

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

- A dedução do método de Gauss que será apresentado é para dois pontos.

Quadratura Gaussiana

- O primeiro passo é mudar o intervalo de integração de [a,b] para [-1,1].
- A nova variável de integração "t" se relaciona com x como:

$$x = \frac{1}{2}(b-a)t + \frac{1}{2}(b+a)$$

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \int_{-1}^{1} F(t)\,dt$$

$$F(t) = \frac{1}{2}(b-a)\, f\left(\frac{1}{2}(b-a)t + \frac{1}{2}(b+a)\right)$$

- A fórmula de Gauss fornece valores exatos para a integração de polinômios de grau (2n -1), onde n é o número de pontos

Quadratura Gaussiana

- O primeiro passo é mudar o intervalo de integração de [a,b] para [-1,1].
- A nova variável de integração "t" se relaciona com x como:

$$x = \frac{1}{2}(b-a)t + \frac{1}{2}(b+a)$$

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \int_{-1}^{1} F(t)\,dt$$

$$F(t) = \frac{1}{2}(b-a) f\left(\frac{1}{2}(b-a)t + \frac{1}{2}(b+a)\right)$$

- A fórmula de Gauss fornece valores exatos para a integração de polinômios de grau (2n -1), onde n é o número de pontos

Quadratura Gaussiana

- Para dois pontos a fórmula de Gauss é:

$$I=\int_{-1}^{1} F(t)\,dt = A_0 F(t_0) + A_1 F(t_1)$$

- onde A_0, A_1, t_0 e t_1 são incógnitas a se determinar e independentes da função F escolhida.
- Para determinar estas quatro incógnitas são necessárias quatro equações que podem ser obtidas ao se considerar $F(t) = t^k$, onde k = 0, 1, 2, 3, já que as constantes desconhecidas independem da função F.

$$I=\int_{-1}^{1} t^k\,dt = A_0 F({t_0}^k) + A_1 F({t_1}^k)$$

DEPARTAMENTO de FÍSICA TEÓRICA e EXPERIMENTAL

Quadratura Gaussiana

$$k=0 \rightarrow \int_{-1}^{1} t^0\,dt = 2 = A_0 t_0^{\ 0} + A_1 t_1^{\ 0}$$

$$k=1 \rightarrow \int_{-1}^{1} t^1\,dt = 0 = A_0 t_0^{\ 1} + A_1 t_1^{\ 1}$$

$$k=2 \rightarrow \int_{-1}^{1} t^2\,dt = 2/3 = A_0 t_0^{\ 2} + A_1 t_1^{\ 2}$$

$$k=3 \rightarrow \int_{-1}^{1} t^0\,dt = 0 = A_0 t_0^{\ 3} + A_1 t_1^{\ 3}$$

$$\begin{aligned} A_0 + A_1 &= 2 \\ A_0 t_0^{\ 1} + A_1 t_1^{\ 1} &= 0 \\ A_0 t_0^{\ 2} + A_1 t_1^{\ 2} &= 2/3 \\ A_0 t_0^{\ 3} + A_1 t_1^{\ 3} &= 0 \end{aligned}$$

- Resolvendo o sistema.

$$\begin{aligned} A_0 &= A_1 = 1 \\ t_0 &= t_1 = 1/\sqrt{3} \end{aligned}$$

Quadratura Gaussiana

- Logo a integral I é:

$$I = \int_{-1}^{1} F(t)\,dt = A_0 F(t_0) + A_1 F(t_1)$$

- É bom lembrar que a fórmula que foi deduzida nos slides anteriores é exata para polinômios de até terceiro grau.

- Para ordens superiores e para outras funções o erro de integração é da ordem

$$E = \frac{1}{135} F^{(IV)}(\xi) \qquad onde -1 \leqslant \xi \leqslant 1$$

- A fórmula geral para a quadratura gaussiana é determinada por um processo semelhante ao que foi feito para dois pontos.

Quadratura Gaussiana

- Neste caso a fórmula geral para n pontos é baseada na propriedade dos polinômios de Legendre.

$$I = \int_{-1}^{1} F(t)\,dt = \sum_{i=0}^{n-1} A_i F(t_i)$$

- O erro é dado pela seguinte fórmula.

$$E = \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)((2n)!)^3} F^{(2n)}(\xi) \qquad onde -1 \leqslant \xi \leqslant 1$$

- Para n =1 até 3

n	i	t_i	A_i
1	0	0,00000000	2,00000000
2	0	-0,57735027	1,00000000
	1	0,57735027	1,00000000
3	0	0,77459667	0,55555556
	1	-0,77459667	0,55555556
	2	0,00000000	0,88888889

Quadratura Gaussiana

- de n =4 até 6

n	i	t_i	A_i
4	0	0,86113631	0,34785484
	1	-0,86113631	0,34785484
	2	0,33998104	0,65214516
	3	-0,33998104	0,65214516
5	0	0,90617985	0,23692688
	1	-0,90617985	0,23692688
	2	0,53846931	0,47862868
	3	-0,53846931	0,47862868
	4	0,00000000	0,56888886
6	0	0,93246951	0,17132450
	1	-0,93246951	0,17132450
	2	0,66120939	0,36076158
	3	-0,66120939	0,36076158
	4	0,23861919	0,46791394
	5	-0,23861919	0,46791394

Quadratura Gaussiana

- de n =7 até 8

n	i	t_i	A_i
7	0	0,94910791	0,12948496
	1	-0,94910791	0,12948496
	2	0,74153119	0,27970540
	3	-0,74153119	0,27970540
	4	0,40584515	0,38183006
	5	-0,40584515	0,38183006
	6	0,00000000	0,41795918
8	0	0,96028986	0,10122854
	1	-0,96028986	0,10122854
	2	0,79666648	0,22238104
	3	-0,79666648	0,22238104
	4	0,52553242	0,31370664
	5	-0,52553242	0,31370664
	6	0,18343464	0,36268378
	7	-0,18343464	0,36268378

Quadratura Gaussiana

- Passos para o programa.
  - Mudança de variável x para t, que se relacionam como:

$$x=\frac{1}{2}(b-a)t+\frac{1}{2}(b+a)$$

  - Com esta mudança o intervalo de integração será [-1,1]. Não será necessário variáveis para definir o intervalo inferior e superior na variável t.

$$I=\int_a^b f(x)dx=\int_{-1}^{1} F(t)dt$$

  - A nova função é:

$$F(t)=\frac{1}{2}(b-a)f\left(\frac{1}{2}(b-a)t+\frac{1}{2}(b+a)\right)$$

  - Definir o número de pontos n.

Quadratura Gaussiana

- Para ver valores de A_i e t_i consulte http://www.holoborodko.com/pavel/numerical-methods/numerical-integration/#gauss_quadrature_abscissas_table
- O resultado da integração será:

$$I=\int_{-1}^{1} F(t)\,dt=\sum_{i=0}^{n-1} A_i F(t_i)$$

- Integre numericamente as seguintes funções e compare com os outros métodos de integração.
  - Cos x / (1 + x) no intervalo de 0 a 1;
  - 3x + 2 no intervalo de 3 à 6;
  - $1/x^2$ no intervalo de 4 à 4,5;

Integração com singularidades ou derivadas descontínuas

- Se existem descontinuidades nas derivadas, separe a integral em duas partes

$$\int_{-1}^{1} |x|\, f(x)\, dx = \int_{-1}^{0} (-x)\, f(x)\, dx + \int_{0}^{1} x\, f(x)\, dx$$

- Se existe um fator do tipo $x^{1/n}$ com n>1, pode fazer a transformação $x = y^n$ obtendo

$$\int_{0}^{1} x^{1/n}\, f(x)\, dx = \int_{0}^{1} n y^n\, f(y^n)\, dy$$

Integração com singularidades ou derivadas descontínuas

- Se existe um pólo ou outra singularidade

$$\mathcal{P}\int_{-1}^{2}\frac{f(x)}{x}\,dx = \int_{-1}^{2}\frac{f(x)-f(0)}{x}\,dx + f(0)\,\mathcal{P}\int_{-1}^{2}\frac{1}{x}\,dx$$

Se f(x) é analítica em x=0, a primeira integral do lado direito pode ser calculada numericamente, tratando com cuidado o caso x=0. A segunda pode ser calculada analiticamente.

Integração com singularidades ou derivadas descontínuas

- Exemplos: Tente calcular as integrais abaixo utilizando os métodos diretos e utilizando os “truques” dos slides anteriores

$$\int_0^1 x^{1/3}\,dx = 0.75\ ,$$

$$\int_0^1 x^{1/4}\,e^{-x}\,dx = 0.4769591535856598\ ,$$

$$\int_{-1}^{+1} |x-0.5|\,\sin x\,dx = -0.4185487713402663$$

$$\mathcal{P}\int_{-1}^{2} \frac{e^{-x^2}}{x}\,dx = 0.1078022909928357$$