Fórmulas de Integração Numérica de Gauss

Tarefa 2 - MAP3121 - **Data de entrega: 05/06/2022**

Regras do Jogo

- Você deve implementar o exercício programa em C/C++ ou Python3.x.
- Python:
  - Pode usar: Matplotlib, NumPy (apenas para trabalhar com aritmética de vetores, matrizes, leitura/escrita de dados), bibliotecas básicas auxiliares: sys, time, datetime, os, math.
  - **Não** pode usar: SciPy ou outras bibliotecas de algebra linear computacional
- C, C++:
  - **Não** pode usar recursos de versões além de C/C++14.
  - Pode usar qualquer biblioteca nativa do gcc/g++ (que não exiga instalção adicional).
- Incluir, obrigatoriamente, um arquivo LEIAME.txt com instruções de compilação e execução, indicando versão de interpretador/compilador necessário.
- O exercício pode ser feito em duplas. A dupla **tem de ser a mesma** da Tarefa 1.
- Apenas um aluno deve entregar o exercício, destacando no relatório e no código o nome de ambos os alunos.
- A entrega deve conter o relatório (em .pdf), contendo a análise do problema estudado, e o código usado para as simulações computacionais (arquivos fonte). A entrega deve ser feita em um arquivo compactado único.
- O relatório deve apresentar resultados e análises de todas as tarefas descritas neste enunciado.
- O seu código deve estar bem documentado, de forma a facilitar a correção. Rodar os testes também deve ser fácil para o usuário do seu programa, sem que este tenha que editar seu código. Ou seja, você deve pedir como entrada qual teste o usuário quer rodar, qual método e os parâmetros para o teste.

Introdução

Neste exercício-programa você irá implementar fórmulas de integração numérica conhecidas como Fórmulas de Integração de Gauss e aplicá-las ao cálculo de algumas integrais duplas. A implementação das fórmulas de Gauss e a resolução de sistemas lineares tridiagonais implementada na Tarefa 1 serão usadas na Tarefa 3.

Fórmulas de Gauss

Uma fórmula geral de integração numérica para se aproximar a integral de uma função f de a até b é dada por

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{j=1}^{n} \omega_j f(x_j) + E_n(f) \tag{1}$$

onde os nós $x_j \in [a, b]$ e os pesos ω_j são determinados impondo-se condições para o erro $E(f)$. No caso das fórmulas de Gauss, os pesos e os nós são escolhidos de forma que a aproximação seja exata ($E(f) = 0$) para polinômios de maior grau possível.

Como há $2n$ incógnitas, impondo-se que a fórmula de integração (1) seja exata para x^k, $0 \leq k \leq 2n-1$, obtemos $2n$ equações e pode-se esperar que o grau desejado é $2n-1$. Em todo caso, a fórmula não pode ser exata para polinômios de grau $2n$, pois neste caso ela daria resultado 0 para o polinômio $f(x) = (x-x_1)^2(x-x_2)^2 \dots (x-x_n)^2$, cuja integral é positiva.

Se existir uma fórmula como (1) exata para polinômios de grau menor ou igual a $2n-1$, então necessariamente

$$\int_a^b (x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)q(x)\,dx = 0 \tag{2}$$

para todo polinômio q de grau menor ou igual a $n-1$ (por que?). Veremos adiante no curso que *existem únicos pontos distintos* $x_1, \dots, x_n$ tais que (2) está satisfeita para todo polinômio q de grau menor ou igual a $n-1$. Estes são os nós da fórmula de integração.

Conhecidos os nós, os coeficientes ω_j, $1 \leq j \leq n$, que garantem a exatidão da fórmula para polinômios de grau menor ou igual $2n-1$ devem necessariamente satisfazer $\omega_j = \int_a^b L_j(x)\,dx$, onde L_j é o polinômio de grau $n-1$ que assume o valor 1 em x_j e 0 em x_i para $i \neq j$.

Pode-se mostrar que estas condições necessárias sobre os nós e os pesos são também suficientes, e portanto existe uma única fórmula de integração numérica do tipo (1) que é exata para polinômios de grau menor ou igual a $2n-1$. O que se espera deste tipo de fórmula é obter aproximações precisas para integrais de funções suaves usando uma quantidade mínima de nós.

Mudança de Variável

Os nós e pesos para aproximar integrais em alguns intervalos fixos, em particular $[-1,1]$, são bem conhecidos e podem ser encontrados em tabelas[1]. Por exemplo, a fórmula

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \frac{5}{9} f\big(-\sqrt{0.6}\big) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\big(\sqrt{0.6}\big)$$

é exata para a integral de -1 a 1 de polinômios de grau menor ou igual a 5 (verifique como exercício). Outros valores de n e seus respectivos nós e pesos podem ser usados. Pode-se mostrar que para as fórmulas no intervalo $[-1,1]$ há uma paridade, de modo que os nós são simétricos em torno da origem e cada par $-x_j$ ex_j de nós simétricos tem o mesmo peso ω_j.

Conhecendo as fórmulas de Gauss para o intervalo $[-1,1]$, podemos obter as fórmulas de Gauss em qualquer intervalo $[a,b]$ usando mudança de variável. Os nós são linearmente transportados do intervalo $[-1,1]$ para o intervalo $[a,b]$ e os pesos são multiplicados por um fator de escala. Como exercício, apresente a fórmula de Gauss exata para polinômios de grau menor ou igual a 5 em um intervalo $[a,b]$.

Integrais Duplas

Deseja-se calcular a integral

$$I = \iint_R f(x,y)\,dx\,dy$$

em uma região R do plano. Vamos supor que R é da forma

$$\{(x,y) \,|\, a \leq x \leq b, c(x) \leq y \leq d(x)\} \text{ ou } \{(x,y) \,|\, c \leq y \leq d, a(y) \leq x \leq b(y)\}$$

o que permite o cálculo da integral por fórmulas iteradas. Por exemplo, no primeiro caso,

$$I = \int_a^b \left[\int_{c(x)}^{d(x)} f(x,y)\,dy \right] dx$$

Usando fórmulas de Gauss com n nós, o valor acima pode ser aproximado como

$$I = \sum_{i=1}^{n} u_i F(x_i)$$

[1] Veja por exemplo a Seção 3.5 da NIST Digital Library of Mathematical Functions (https://dlmf.nist.gov).

com

$$F(x_i) = \sum_{j=1}^{n} v_{ij} f(x_i, y_{ij}),$$

onde x_i e u_i são os nós e os pesos no intervalo $[a, b]$, e y_{ij} e v_{ij} são os nós e os pesos nos intervalos $[c(x_i), d(x_i)]$. O outro caso pode ser deduzido de maneira análoga.

Tarefa

Implemente um programa para o cálculo de integrais duplas em regiões R do plano, como as descritas acima, por fórmulas iteradas. Você deverá usar fórmulas de Gauss com n nós para as integrações numéricas. Os nós e os pesos são fornecidos para o intervalo $[-1, 1]$ e o programa deverá fazer os ajustes necessários para outros intervalos. *Use precisão dupla.* No numpy é o padrão e em C use DOUBLE.

Teste o seu programa nos exemplos abaixo usando fórmulas de Gauss com $n = 6$, 8 e 10. Os nós e os pesos estão no arquivo *dados.txt* (devido à simetria já mencionada, são dados apenas os nós maiores ou iguais a zero).

> **Exemplo 1** Calcule os volumes do cubo cujas arestas tem comprimento 1 e do tetraedro com vértices $(0, 0, 0)$, $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ e $(0, 0, 1)$. Você deve obter resultados exatos, exceto por erros de arredondamento (por que?).
>
> **Exemplo 2** A área A da região no primeiro quadrante limitada pelos eixos e pela curva $y = 1 - x^2$ pode ser obtida por
>
> $$A = \int_0^1 \left[\int_0^{1-x^2} dy \right] dx = \int_0^1 \left[\int_0^{\sqrt{1-y}} dx \right] dy = \frac{2}{3}$$
>
> Calcule numericamente as duas integrais duplas acima e observe os resultados.
>
> **Exemplo 3** Considere a superfície descrita por $z = e^{y/x}$, $0.1 \le x \le 0.5$, $x^3 \le y \le x^2$. Calcule a sua área e o volume da região abaixo dela (a área de uma superfície descrita por $z = f(x, y)$, $(x, y) \in R$ é igual a
>
> $$\iint_R \sqrt{f_x(x, y)^2 + f_y(x, y)^2 + 1}\, dx\, dy \Big).$$
>
> **Exemplo 4** Considere uma região fechada R do plano xy e seja γ uma reta no mesmo plano que não intercepta o interior de R. O volume V do sólido de revolução obtido da rotação da região R em torno de γ é igual a
>
> $$V = 2\pi \iint_R d_\gamma(x, y)\, dx\, dy$$
>
> onde $d_\gamma(x, y)$ é a distância do ponto (x, y) à reta γ. Use esta expressão para calcular o volume da calota esférica de altura $\frac{1}{4}$ da esfera de raio 1, e o volume do sólido de revolução obtido da rotação da região, em torno do eixo y, delimitada por $x = 0$, $x = e^{-y^2}$, $y = -1$ e $y = 1$.

Imprima, para cada n, o valor de n e os valores calculados das integrais. Quando for o caso, imprima também em cada exemplo os valores exatos.