

Métodos Computacionais em Física I (FIW234)

Turmas IFA e IFB

Integração numérica de funções

Edivaldo M. Santos e João R. T. de Mello Neto

Aula 8

- Introdução
- Método de Simpson
- Integração de Romberg
- Quadratura de Gauss

Introdução

- Vamos trabalhar hoje com o problema de integrar numericamente uma função dada. Nem sempre é possível se obter uma solução analítica ao problema:

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

- Por outro lado, o problema acima é precisamente equivalente a se resolver $I \equiv y(x)$ com a equação diferencial

$$\frac{dy}{dx} = f(x)$$

junto com a condição de contorno $y(a) = 0$. Portanto os métodos que vamos apresentar a seguir são complementares aos apresentados na aula de integração de equações diferenciais. Se a função a ser integrada for muito concentrada numa região pequena (tiver um pico no intervalo $[a, b]$) ou se a forma dela não for caracterizada por uma escala espacial única, então é mais conveniente utilizar os métodos de integração de equações diferenciais.

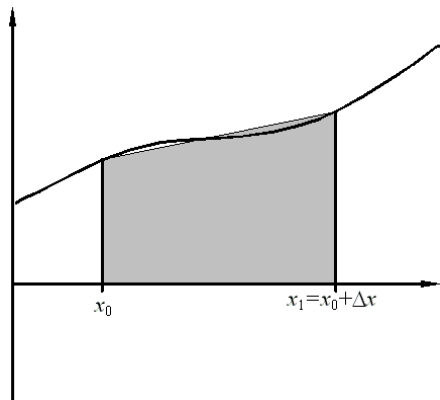
Regra do Trapézio

- Considere uma expansão em série de Taylor integrada de x_0 até $x_0 + \Delta x$:

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_0+\Delta x} f(x)dx &= \int_{x_0}^{x_0+\Delta x} \left[f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!}f''(x_0) + \dots \right] dx \\&= f(x_0)\Delta x + \frac{1}{2}f'(x_0)(\Delta x)^2 + \frac{1}{6}f''(x_0)(\Delta x)^3 \\&= \left[\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2} \left(f(x_0) + f'(x_0)\Delta x + \frac{1}{3}f''(x_0)(\Delta x)^2 + \dots \right) + \dots \right] \Delta x \\&= \frac{1}{2} (f(x_0) + f(x_0 + \Delta x)) \Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^3)\end{aligned}$$

- A interpretação geométrica é óbvia: estamos aproximando a integral da função no intervalo $[x_0, x_0 + \Delta x]$ pela área de um trapézio.
- Podemos ver da expressão acima que o erro na regra do trapézio é proporcional a $(\Delta x)^3$. Assim, **se reduzimos o intervalo à metade**, o erro diminui por um fator 8. No entanto, o domínio de integração seria reduzido à metade e portanto a regra do trapézio teria que ser utilizada duas vezes e as duas contribuições se somariam. **O resultado final teria um erro reduzido por um fator 4.**

Regra do Trapézio



Regra do Trapézio

- A regra do trapézio composta é a integração sucessiva utilizando-se um intervalo Δx pequeno para se obter um erro menor. Assim, suponha que precisamos integrar de x_0 até x_1 . Dividimos então este intervalo em n intervalos de tamanho $\Delta x = \frac{x_1 - x_0}{n}$. A integral neste intervalo será aproximada por:

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx &= \frac{\Delta x}{2} \sum_{i=0}^{n-1} (f(x_0 + i\Delta x) + f(x_0 + (i+1)\Delta x)) \\ &= \frac{\Delta x}{2} [f(x_0) + 2f(x_0 + \Delta x) + 2f(x_0 + 2\Delta x) + \dots \\ &\quad + 2f(x_0 + (n-1)\Delta x) + f(x_1)]\end{aligned}$$

- Aqui vemos que enquanto o erro em cada passo é $\mathcal{O}(\Delta x^3)$, o erro acumulado é n vezes maior.
- A análise acima supõe que Δx seja constante no intervalo sendo integrado. Isso não é necessário e um aperfeiçoamento do método poderia utilizar Δx que variasse inversamente com a curvatura da função. Podemos ver na página anterior que a série de Taylor foi truncada no termo proporcional a $f''(x)$.

Regra do Trapézio: Análise do erro

- Na transparência anterior mencionou-se que o erro no método do trapézio é de ordem $(\Delta x)^3$. Analisemos com um pouco mais de detalhe essa afirmação.

Regra do Trapézio: Análise do erro

- Na transparência anterior mencionou-se que o erro no método do trapézio é de ordem $(\Delta x)^3$. Analisemos com um pouco mais de detalhe essa afirmação.
- De fato, podemos escrever

$$\int_a^b f(x) dx = T_n + E_n$$

onde

$$T_n = \frac{\Delta x}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

com $x_0 = a$, $x_n = b$ e $x_i = x_0 + i\Delta x$, $\Delta x = \frac{b-a}{n}$ e

$$E_n = \frac{(\Delta x)^3}{12n^2} f''(c)$$

para algum $c \in [a, b]$.

Regra do Ponto Médio

- Uma variante da regra do trapézio é obtida ao se integrar a série de Taylor de $x_0 - \Delta x/2$ a $x_0 + \Delta x/2$:

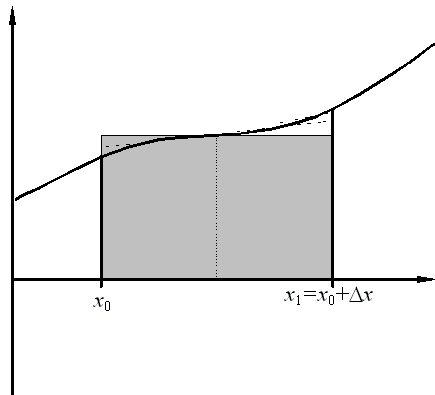
$$\int_{x_0 - \frac{1}{2}\Delta x}^{x_0 + \frac{1}{2}\Delta x} f(x)dx = f(x_0)\Delta x + \frac{1}{24}f''(x_0)(\Delta x)^3 + \dots$$

- Assim, só o fato de se avaliar a função no meio do intervalo reduz ligeiramente o erro (o fator na frente do termo de curvatura é agora $1/24$ comparado com $1/12$ na regra do trapézio, mas o método continua da mesma ordem. Aplicando a regra do ponto médio num intervalo x_0 a x_1 resulta em:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \Delta x \sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_0 + \left(i + \frac{1}{2}\right)\Delta x\right)$$

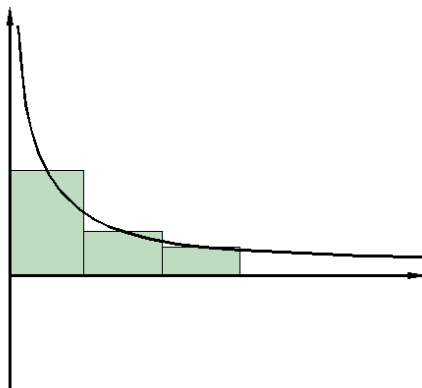
- A expressão é muito similar à expressão equivalente da regra do trapézio. Ela tem duas vantagens: requer uma avaliação de função a menos para um dado número de subintervalos e ela pode ser utilizada mais efetivamente para se determinar o valor da integral perto de uma singularidade integrável.

Regra do Ponto Médio



Regra do Ponto Médio

- A regra do ponto médio pode ser utilizada em determinados tipos de singularidades integráveis onde a regra do trapézio não funciona.



A regra de Simpson

- Uma abordagem alternativa para decrescer o tamanho do passo de integração Δx é aumentar a acurácia das funções utilizadas para aproximar o integrando. Assim, ao se integrar a expansão de Taylor num intervalo $2\Delta x$ obtemos:

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_0+2\Delta x} f(x) dx &= 2f(x_0)\Delta x + 2f'(x_0)\Delta x^2 + \frac{4}{3}f''(x_0)\Delta x^3 + \frac{2}{3}f'''(x_0)\Delta x^4 + \frac{4}{15}f^{iv}(x_0)\Delta x^5 + \dots \\ &= \frac{\Delta x}{3} \left[f(x_0) + 4 \underbrace{\left(f(x_0) + f'(x_0)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x_0)\Delta x^2 + \frac{1}{6}f'''(x_0)\Delta x^3 + \frac{1}{24}f^{iv}(x_0)\Delta x^4 + \dots \right)}_{f(x_0+\Delta x)} \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{\left(f(x_0) + 2f'(x_0)\Delta x + 2f''(x_0)\Delta x^2 + \frac{4}{3}f'''(x_0)\Delta x^3 + \frac{2}{3}f^{iv}(x_0)\Delta x^4 + \dots \right)}_{f(x_0+2\Delta x)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{17}{30}f^{iv}(x_0)\Delta x^4 + \dots \right] \\ &= \frac{\Delta x}{3} (f(x_0) + 4f(x_0 + \Delta x) + f(x_0 + 2\Delta x)) + \mathcal{O}(\Delta x^5) \end{aligned}$$

Regra de Simpson

- Enquanto o erro na regra do trapézio era de ordem $\mathcal{O}(\Delta x^3)$, a regra de Simpson é duas ordens mais acurada, $\mathcal{O}(\Delta x^5)$, fornecendo uma integração exata para funções cúbicas.
- Na integração entre x_0 e x_1 , o intervalo pode de novo ser dividido entre n passos. Como a função é avaliada em três pontos para cada passo, temos que dividir o intervalo em um número par de passos: $n = 2m$. A regra de Simpson composta é:

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx &\approx \frac{\Delta x}{3} \sum_{i=0}^{m-1} [f(x_0 + 2i\Delta x) + 4f(x_0 + (2i+1)\Delta x) + f(x_0 + (2i+2)\Delta x)] \\ &= \frac{\Delta x}{3} [f(x_0) + 4f(x_0 + \Delta x) + 2f(x_0 + 2\Delta x) + \dots + 4f(x_0 + (n-1)\Delta x) \\ &\quad + f(x_1)]\end{aligned}$$

- e o erro correspondente é $\mathcal{O}(n\Delta x^5)$ ou $\mathcal{O}(\Delta x^4)$.

Integração pelo método de Romberg

- Com o método do trapézio vimos que o erro em uma certa aproximação $T(\Delta x)$ da integral I usando-se um passo Δx é proporcional a $c\Delta x^2$ para uma dada constante c . Da mesma forma, o erro em $T(\Delta x/2)$ terá a forma $c\Delta x^2/4$. Assim, se pode construir uma aproximação melhor da integral $T^{(1)}(\Delta x/2)$ como a média ponderada entre $T(\Delta x)$ e $T(\Delta x/2)$:

$$\begin{aligned}T^{(1)}(\Delta x/2) &= aT(\Delta x/2) + (1-a)T(\Delta x) \\&= a[I + c\Delta x^2/4 + \mathcal{O}(\Delta x^4)] + \\&\quad + (1-a)[I + c\Delta x^2 + \mathcal{O}(\Delta x^4)]\end{aligned}$$

- ao escolhermos o peso $a = 4/3$ eliminamos o termo de erro de ordem $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ e a aproximação agora é de ordem $\mathcal{O}(\Delta x^4)$. Assim:

$$T^{(1)}(\Delta x/2) = [4T(\Delta x/2) - T(\Delta x)]/3$$

- É simples mostrar que a expressão acima é exatamente a regra de Simpson.
- O mesmo processo pode ser repetido em ordens mais altas utilizando-se $\Delta x/4$, $\Delta x/8$, ... com o fim de se eliminar o termo de erro dominante (sempre o de ordem mais baixa). Para a regra do Trapézio os erros são todos potências pares de Δx e pode-se mostrar que

$$T^{(m)}(\Delta x/2) = [2^{2m} T^{(m-1)}(\Delta x/2) - T^{(m-1)}(\Delta x)]/(2^{2m} - 1)$$

- Um procedimento semelhante pode ser aplicado à regra de Simpson.

Quadratura de Gauss

- A seleção cuidadosa dos pontos nos quais a função será avaliada permite aumentar a precisão para um dado número de avaliações da função. A regra do ponto médio é um exemplo disso: com apenas uma avaliação da função se obtém a mesma ordem de acurácia que a regra do trapézio que exige duas avaliações.
- Um exemplo muito utilizado disso é a quadratura de Gauss que permite a integração exata de funções cúbicas com apenas duas avaliações de função (em contraste com a regra de Simpson, que é também exata para funções cúbicas mas que demanda três avaliações de função). A quadratura de Gauss é dada por:

$$\int_{x_0}^{x_0+\Delta x} f(x)dx \approx \frac{\Delta x}{2} \left[f\left(x_0 + \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}\right)\Delta x\right) + f\left(x_0 + \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}\right)\Delta x\right) \right] + \mathcal{O}(\Delta x^4)$$

- Em geral é possível se escolher M avaliações de função por intervalo para se obter a fórmula exata para todos os polinômios de grau $2M - 1$ e menores.

Quadratura de Gauss

- A quadratura de Gauss acurada até ordem $2M - 1$ pode ser determinada utilizando-se a mesma abordagem que o esquema de dois pontos (acima), que será obtido a seguir. A fórmula acima pode ser obtida comparando-se a expansão em série de Taylor da integral com as expansões nos pontos $x_0 + a\Delta x$ e $x_0 + b\Delta x$:

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_1=x_0+\Delta x} f(x)dx &= \Delta x f(x_0) + \frac{\Delta x^2}{2} f'(x_0) + \frac{\Delta x^3}{6} f''(x_0) + \frac{\Delta x^4}{24} f'''(x_0) + \mathcal{O}(\Delta x^5) \\&= \frac{\Delta x}{2} [f(x_0) + a\Delta x f'(x_0) + \frac{(a\Delta x)^2}{2} f''(x_0) + \frac{(a\Delta x)^3}{6} f'''(x_0) + \dots \\&\quad + f(x_0) + b\Delta x f'(x_0) + \frac{(b\Delta x)^2}{2} f''(x_0) + \frac{(b\Delta x)^3}{6} f'''(x_0) + \dots] \\&= \Delta x f(x_0) + (a+b) \frac{(\Delta x)^2}{2} f'(x_0) + (a^2+b^2) \frac{(\Delta x)^3}{4} + \\&\quad + (a^3+b^3) \frac{(\Delta x)^4}{12} + \dots\end{aligned}$$

- Igualando-se os vários termos obtém-se:

$$\begin{aligned}a + b &= 1 \\(a^2 + b^2)/4 &= 1/6\end{aligned}$$

cuja solução fornece os coeficientes explicitados na quadratura de Gauss explicitados acima.

- Integre numericamente a função $f(x) = x^2(x^2 - 2)\text{sen}(x)$ de $x_0 = 0.0$ a $x_1 = \pi/2$ adaptando o código `integra.c`. Compare com o valor exato da integral $I(x) = 4x(x^2 - 7)\text{sen}x - (x^4 - 14x^2 + 28)\text{cos}x$ imprimindo $I(B) - I(A)$.