Introdução à Física Computacional (4300218)

Profa. Kaline Coutinho
kaline@if.usp.br
Sala 2056 – Edifício Principal

Aula 8

Programação em Pythom para físicos:
Integração: Quadratura Gaussiana

Integração por Retângulo, Trapézios e Simpson

$$I = \int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{k=1}^{N} w_k f(x_k)$$

$$I_{Ret.} = \Delta x \sum_{k=0}^{N-1} f(a + \Delta x/2 + k\Delta x)$$

pontos: $a + \Delta x/2, a + 3\Delta x/2, a + 5\Delta x/2, \cdots$

$$I_{Trap.} = \frac{1}{2}\Delta x\,(f(a) + f(b)) + \Delta x \sum_{k=1}^{N-1} f(a + k\Delta x)$$

pontos: $a + \Delta x, a + 2\Delta x, a + 3\Delta x, \cdots$

$$I_{Simp.} = \frac{1}{3}\Delta x\,(f(a) + f(b)) + \frac{4}{3}\Delta x \sum_{k=1}^{N/2} f(a + (2k-1)\Delta x) + \frac{2}{3}\Delta x \sum_{k=1}^{(N/2)-1} f(a + 2k\Delta x)$$

pontos: $a + \Delta x, a + 3\Delta x, a + 5\Delta x, a + 7\Delta x, \cdots$

pontos: $a + 2\Delta x, a + 4\Delta x, a + 6\Delta x, \cdots$

Polinômicos de ordem maior

- O método de trapézio usa polinômio de ordem 1 para interpolar os pontos de integração.
- O método de Simpson usa polinômio de ordem 2.
- E para polinômicos de ordens maiores?

(Método Newton-Cotes)

Degree	Polynomial	Coefficients
1 (trapezoidal rule)	Straight line	$\frac{1}{2}, 1, 1, \ldots, 1, \frac{1}{2}$
2 (Simpson's rule)	Quadratic	$\frac{1}{3}, \frac{4}{3}, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \ldots, \frac{4}{3}, \frac{1}{3}$
3	Cubic	$\frac{3}{8}, \frac{9}{8}, \frac{9}{8}, \frac{3}{4}, \frac{9}{8}, \frac{9}{8}, \frac{3}{4}, \ldots, \frac{9}{8}, \frac{3}{8}$
4	Quartic	$\frac{14}{45}, \frac{64}{45}, \frac{8}{15}, \frac{64}{45}, \frac{28}{45}, \frac{64}{45}, \frac{8}{15}, \frac{64}{45}, \ldots, \frac{64}{45}, \frac{14}{45}$

Método de Quadratura Gaussiana

- Polinômio de Legendre de ordem N, $P_N(x)$, com uma interpolação (ϕ_k) de N pontos amostrados (x_k) não uniformemente, ou seja, Δx não é constante.

$$I = \int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{k=1}^{N} w_k f(x_k)$$

$$x_k = \frac{1}{2}(b-a)x_k^{(1)} + \frac{1}{2}(b+a) \text{ onde}$$

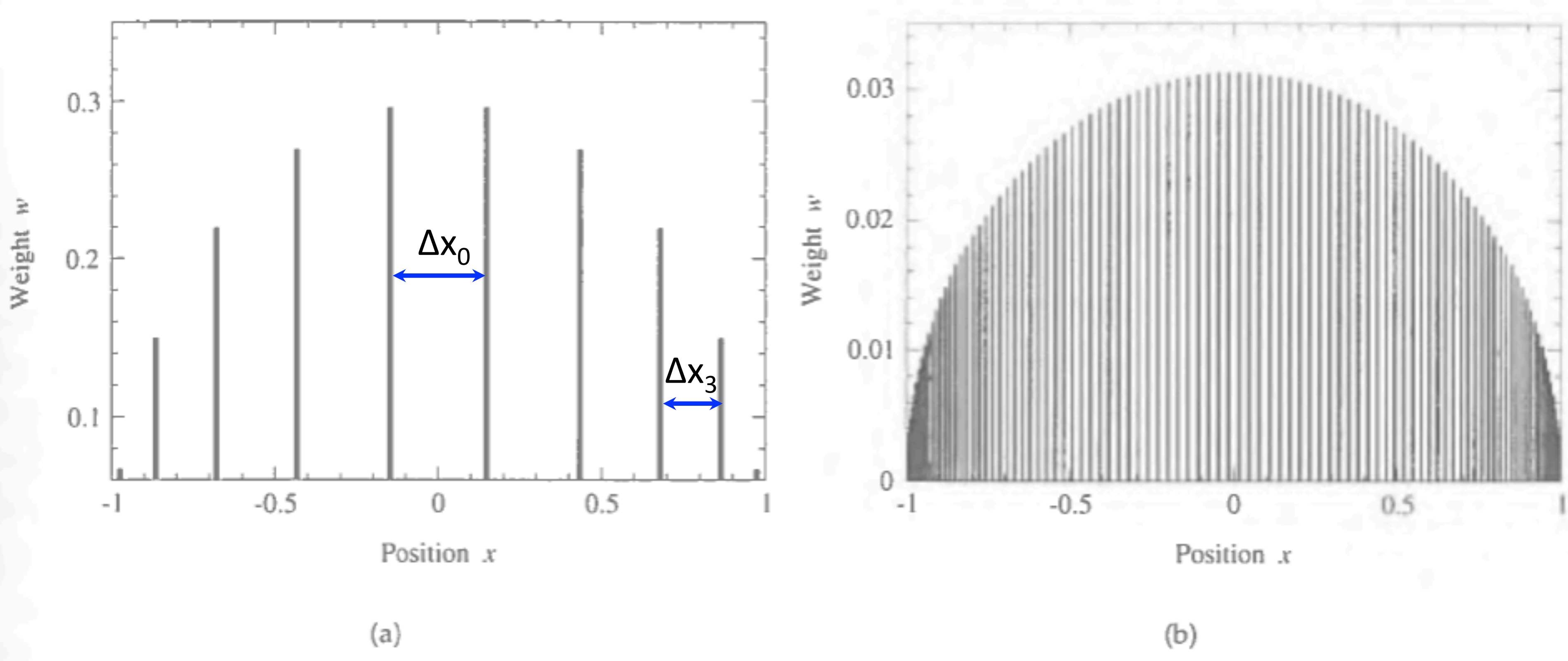
$$P_N\left(x_k^{(1)}\right) = 0 \text{ para } x_k^{(1)} \text{ variando de -1 a 1}$$

Os pontos x_k serão os zeros do polinômio de Legendre de ordem N variando no intervalo (-1,1) e depois reescalonados para o intervalo (a,b).

$$w_k = \int_a^b \phi_k(x)dx = \frac{1}{2}(b-a)w_k^{(1)} \text{ onde } w_k^{(1)} = \left[\frac{2}{(1-x^2)}\left(\frac{dP_N(x)}{dx}\right)^{-2}\right]_{x_k^{(1)}}$$

Os pesos w_k serão calculados nos pontos $x_k^{(1)}$ pela expressão acima com o polinômio de Legendre de ordem N e depois serão reescalonados para o intervalo (a,b).

Exemplo de x_k e w_k calculados para (a) N = 10 e (b) N = 100



Note que os intervalos entre os pontos são diferentes.

Exemplo: $\Delta x_0 \neq \Delta x_3$

Exemplos de programas para calcular integral com Quadratura Gaussiana

```python
from gaussxw import gaussxw

def f(x):
    return x**4 - 2*x + 1

N = 4
a = 0.0
b = 2.0

# Calculate the sample points and weights, then map
# to the required integration domain
x,w = gaussxw(N)
xp = 0.5*(b-a)*x + 0.5*(b+a)
wp = 0.5*(b-a)*w

# Perform the integration
s = 0.0
for k in range(N):
    s += wp[k]*f(xp[k])

print(s)
```

```python
from gaussxw import gaussxwab

def f(x):
    return x**4 - 2*x + 1

N = 4
a = 0.0
b = 2.0

# Calcula os pontos e pesos no intervalo de a e b
x,w = gaussxwab(N,a,b)

# Realiza o somatorio
s = 0.0
for k in range(N):
    s += w[k]*f(x[k])

print('%.4f'%s)
```

É necessário ter o programa gaussxw.py no diretório do seu programa.

Exemplo 1:

Realizar a integral abaixo usando o método dos trapézios com N= 2, 4, 6, ..., 60, onde N é o número de pontos da integração.

$$\int_0^2 (x^4 - 2x + 1)dx = \left[\frac{1}{5}x^5 - x^2 + x\right]_0^2 = 4.4$$

Faça o grafíco de f(x) entre x= 0 e 2, e o gráfico do valor da intergral variando com N com os métodos: Retângulo, Trapézio, Simpson e Quadratura Gaussiana.

Programa

Parte inicial com chamada de bibliotecas

```python
from pylab import *
from numpy import *
from gaussxw import gaussxwab
from matplotlib.font_manager import FontProperties

def f(x):
    return x**4 - 2*x + 1

a   = 0.0
b   = 2.0
xmin= 4
xmax= 60
xint= 2
x0  = [0,xmax+5]
y0  = [4.4,4.4]
```

Resultados

```
 N      Ret.   Trap.  Simp.  Gaus.
4.000  4.070  5.062  4.417  4.400
6.000  4.253  4.695  4.403  4.400
8.000  4.317  4.566  4.401  4.400
10.000  4.347  4.507  4.400  4.400
12.000  4.363  4.474  4.400  4.400
14.000  4.373  4.454  4.400  4.400
16.000  4.379  4.442  4.400  4.400
18.000  4.384  4.433  4.400  4.400
20.000  4.387  4.427  4.400  4.400
```

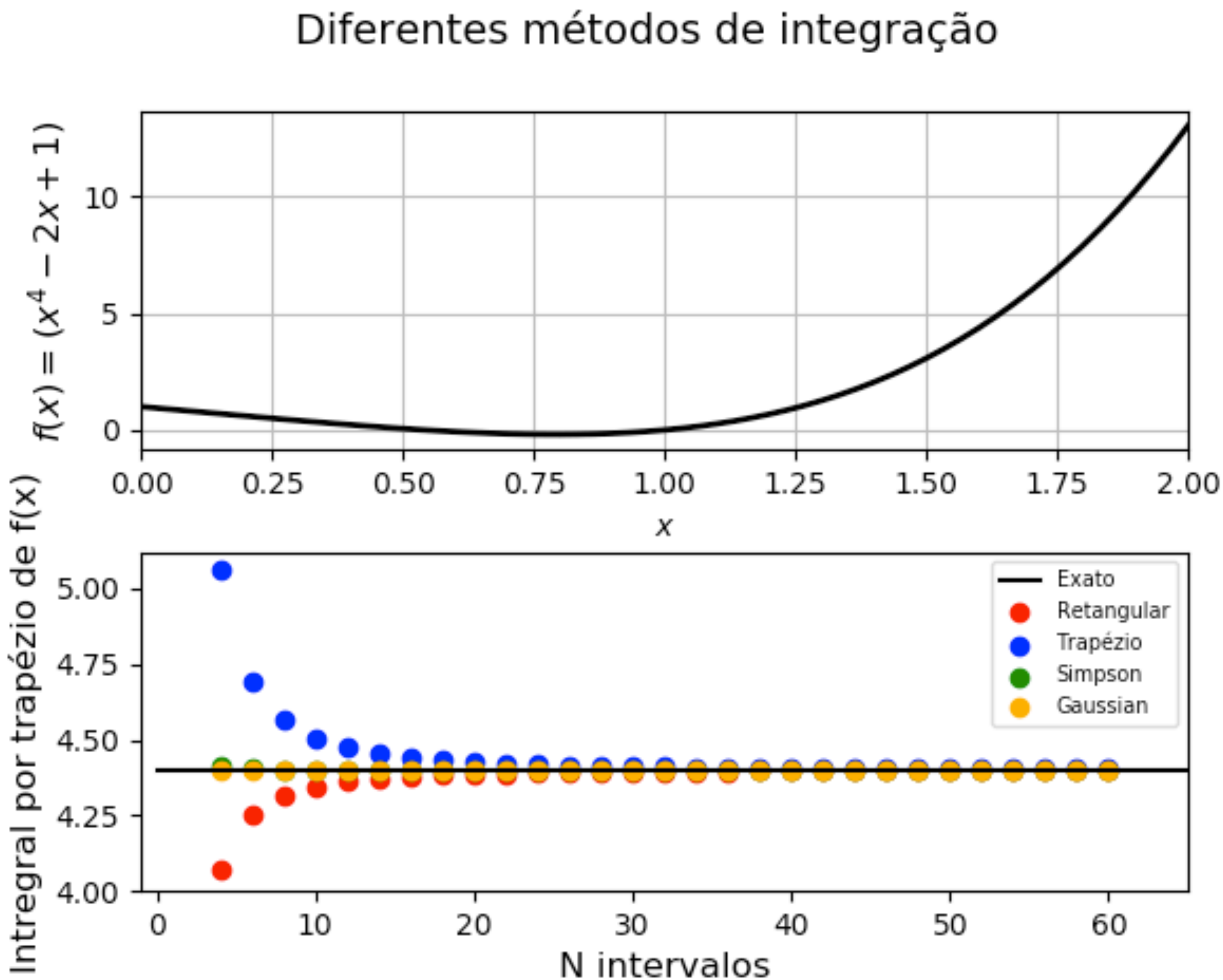
Parte gráfica com legenda

```python
    x.append(N)
    y_r.append(ret_s)
    y_t.append(trap_s)
    y_s.append(simp_s)
    y_g.append(gaus_s)
    print('%.3f'%N,'%.3f'%ret_s,'%.3f'%trap_s, '%.3f'%simp_s,

dx = (b-a)/xmax
for k in arange(a,b+dx,dx):
    fxi.append(f(k))
    xi.append(k)

fontP = FontProperties()
fontP.set_size('x-small')
subplots_adjust(hspace=0.3,wspace=0.2)
subplot(2,1,1)
plot(xi,fxi,color='black',linewidth=2)
xlabel('$x$',fontsize=10)
ylabel('$f(x) = (x^4 -2x + 1)$',fontsize=12)
grid(True)
xlim(a,b)

subplot(2,1,2)
scatter(x,y_r,color='red',label='Retangular')
scatter(x,y_t,color='blue', label='Trapézio')
scatter(x,y_s,color='green', label='Simpson')
scatter(x,y_g,color='orange', label='Gaussian')
plot(x0,y0, color='black', label='Exato')
legend(prop = fontP)
suptitle("Diferentes métodos de integração",fontsize=14)
xlabel("N intervalos",fontsize=12)
ylabel("Intregral por trapézio de f(x)",fontsize=12)
xlim(xmin-5,xmax+5)
show()
```



Diferentes métodos de integração
$f(x) = (x^4 - 2x + 1)$
0
5
10
0.00
0.25
0.50
0.75
1.00
1.25
1.50
1.75
2.00
x
Intregral por trapézio de f(x)
4.00
4.25
4.50
4.75
5.00
0
10
20
30
40
50
60
N intervalos
Exato
Retangular
Trapézio
Simpson
Gaussian

Quando usar cada método?

- O método de quadratura Gaussiana converge muito rápido, mas apenas para funções suaves e bem comportadas no intervalo desejado.
- Se a função for irregular, o melhor método é o mais simples, Trapézio.

Integrais sobre um intervalo infinito

- A forma mais simples é realizar uma mudança de variável e continuar utilizado os métodos já apresentados.

$$I = \int_0^\infty f(x)dx = \int_0^1 \frac{1}{(1-z)^2} f\left(\frac{z}{1-z}\right) dz \text{ onde } z = \frac{x}{1+x} \text{ ou } x = \frac{z}{1-z}$$

$$I = \int_{-\infty}^\infty f(x)dx = \int_{-1}^1 \frac{1+z^2}{(1-z^2)^2} f\left(\frac{z}{1-z^2}\right) dz \text{ onde } x = \frac{z}{1-z^2}$$

Exemplo 2:

Realizar a integral abaixo usando o método dos trapézios com N= 10 e 50, onde N é o número de pontos da integração.

$$I = \int_0^\infty exp(-t^2)dt = \frac{1}{2}\sqrt{\pi} = 0.8862226925453...$$

Use os métodos: Trapézio, Simpson e Quadratura Gaussiana, e compare com o valor exato.