MAP2220 - Fundamentos de Análise Numérica

2° Semestre de 2012 - Noturno

Exercício-Programa de recuperação

Método de Romberg para Integração Numérica

DATA DE ENTREGA: 18/02/2013

Fórmula dos Trapézios

A fórmula dos trapézios para aproximar a integral $\int_a^b f(x)\,dx$ consiste em dividir o intervalo $[a,b]$ em N intervalos de comprimento $h = (b-a)/N$ e somar as áreas dos trapézios definidos pelos pontos $(x_j, f(x_j))$, onde $x_j = a + j * h$, $0 \leq j \leq N$. Pode-se mostrar que se f tem derivadas contínuas até ordem 2 em $[a,b]$, então o erro entre a fórmula dos trapézios e a integral extata decai proporcionalmente a h^2.

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 denotarmos por $T(h)$ a fórmula dos trapézios com espaçamento $h = (b-a)/N$, então temos:

$$T\left(\frac{h}{2}\right) = \frac{1}{2} * T(h) + \frac{h}{2} * \sum_{j=1}^{N} f\left[a + (2*j-1)*\frac{h}{2}\right].$$

Note que para obter a nova aproximação, precisamos calcular os valores de f apenas nos novos pontos acrescentados. O processo iterativo é feito com os espaçamentos $h_i = (b-a)/2^i$, $i = 0, 1, \cdots$, começando-se com $T(h_0) = 0.5 * (b-a) * [f(a) + f(b)]$. Como critérios de parada, podemos usar o erro relativo entre duas aproximações consecutivas dentro de uma tolerância ϵ, e fixar um número máximo de iterações.

A Fórmula de Euller-MacLaurin

Para funções suficientemente diferenciáveis, existe uma expansão assintótica do erro da fórmula dos trapézios conhecida como fórmula de Euller-MacLaurin. Se f tem $2m+2$ derivadas contínuas em $[a,b]$, temos:

$$\begin{aligned} T(h) = \int_a^b f(x)\,dx + \sum_{k=1}^{m} h^{2k} \frac{B_{2k}}{(2k)!}[f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)] \\ + h^{2m+2} \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!}(b-a) f^{(2m+2)}(\xi(h)) \end{aligned}$$

onde B_{2k} são os números de Bernoulli, cuja definição não será apresentada por ser desnecessária para a nossa aplicação.

Uma conseqüência surpreendente desta fórmula é a seguinte: se f é uma função periódica de período $b-a$, com derivadas contínuas de qualquer ordem, então o erro entre a fórmula dos trapézios e a integral de f em um período decai mais rápido do que qualquer potência de h.

Método de Romberg

Se f tem $2m+2$ derivadas contínuas em $[a,b]$, a fórmula de Euler-MacLaurin nos dá uma expansão para o erro da fórmula dos trapézios envolvendo somente potências pares de h, onde os coeficientes que multiplicam h^{2*k}, $1 \leq k \leq m$, independem de h. Uma manipulação algébrica simples mostra que a expressão $[4*T(h/2) - T(h)]/3$ gera uma aproximação para a integral onde o termo dominante do erro proporcional a h^2 desaparece. Portanto esta expressão, que é a fórmula de Simpson com espaçamento $h/2$, aproxima a integral com um erro decaindo proporcionalmente a h^4.

A extensão desta idéia gera o método de Romberg, que pode ser descrito pela seguinte tabela:

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

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 ela 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 onde o espaçamento diminui por um fator de dois entre linhas consecutivas, e portanto podemos usar a fórmula apresentada anteriormente relacionando $T(h/2)$ e $T(h)$.

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 $T(h_i)$, $i = 0, \ldots, n$, 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 $T(h_{i+1})$, $i = 0, \ldots, n$. 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 e Aplicações

Implemente o método de Romberg conforme descrito acima. O subprograma para o cálculo da integral deve ser da forma

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

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 $= ITMAX$.

Para o uso da fórmula dos trapézios, implemente uma rotina separada da forma

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

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 a o valor calculado pela fórmula dos trapézios com um intervalo). Usando esta rotina, faça também um outro programa para o cálculo da integral pela fórmula dos trapézios com o método iterativo descrito anteriormente.

Para os testes abaixo, use $\epsilon = 10^{-6}$ e $n = 4$.

(a) **Integrando regular:** Calcule $\int_0^2 x^4 \ln(x + \sqrt{x^2 + 1})\, dx$ pelo método de Romberg e por trapézios. Compare o número de iterações em cada caso, e o custo em termos de quantas avaliações do integrando foram necessárias.

(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:

$$\mathrm{J}_0(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(x \sin(\theta))\, d\theta.$$

Calcule $\mathrm{J}_0(1)$ pelo método de Romberg e por trapézios. Discuta os resultados obtidos. Faça o mesmo para o cálculo do comprimento da elipse com eixos de comprimentos 1 e 2.

(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 $x = y^2$ e calcule novamente a integral. O que aconteceu?

(e) **Singularidades integráveis:** Para o cálculo da integral

$$\int_0^1 \frac{\cos(x)}{\sqrt{x(1-x)}}\,dx$$

divida a integral em duas, entre 0 e 1/2, e 1/2 e 1. Faça mudanças de variáveis convenientes para que os integrandos fiquem regulares, e use o método de Romberg.

Use precisão dupla na sua implementação. Pense cuidadosamente na saída do seu programa de forma a apresentar claramente os resultados. Não se esqueça de imprimir o número de iterações para o método de Romberg e, quando necessário, para o método dos trapézios, bem como os respectivos valores obtidos para a integral.