MAP3122: Métodos numéricos e aplicações

Quadrimestral 2020

Antoine Laurain

Integração numérica

Introdução

- Integração explícita é possível apenas para um numero restrito de funções. Por exemplo

$$\int_0^1 e^x \, dx = [e^x]_0^1 = e - 1, \qquad \int_0^1 \cos x \, dx = -\sin(1).$$

- Na maioria dos casos, não é possível calcular $\int_a^b f(x)\,dx$ explicitamente.
- **Idéia principal da integração numérica:** aproximar $\int_a^b f(x)\,dx$ por $\int_a^b p(x)\,dx$, onde $p(x)$ é uma aproximação polinomial de $f(x)$.
- Precisamos:
    1. saber como aproximar f com um polinômio p ou um spline s,
    2. calcular o erro de approximação

$$E = \left| \int_a^b f(x)\,dx - \int_a^b p(x)\,dx \right|.$$

- Podemos usar qualquer tipo de interpolação polinomial de f. Assim obtemos varios tipos de formulas de integração numérica.

Formula de Newton-Cotes

- Se usarmos um polinômio de Lagrange para aproximar $f(x)$, podemos considerar a aproximação numérica seguinte para a integral:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b p_n(x)\,dx = \int_a^b \sum_{k=0}^{n} L_k(x) f(x_k)\,dx.$$

- Os pontos x_k são equidistantes: $x_k = a + kh$, $k = 0, 1, \ldots, n$, com $h = (b-a)/n$.
- Recordação: polinômio interpolador de Lagrange de f relativamente aos pontos $\{x_k\}_{k=0}^{n}$:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} L_k(x) f(x_k), \qquad L_k(x) = \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}.$$

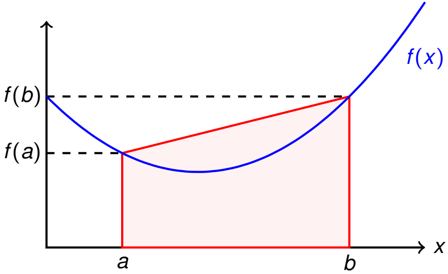
- Assim obtemos a formula de Newton-Cotes de ordem n:

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k) \qquad \text{com} \qquad w_k = \int_a^b L_k(x)\,dx, \quad k = 0, \ldots, n.}$$

  onde os w_k são pesos de quadratura.
- **Observação:** os pesos w_k dependem do grau n do polinômio interpolador p_n.

Formula dos trapézios (simples)

- A formula (ou regra) dos trapézios (simples) é o caso particular da formula de Newton-Cotes para $n = 1$.
- A integral $\int_a^b f(x)\,dx$ é aproximada por a area de um trapézio.



- A formula dos trapézios é

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx w_0 f(a) + w_1 f(b)$$

- Os polinômios de Lagrange são

$$L_0(x) = \frac{x-b}{a-b}, \qquad L_1(x) = \frac{x-a}{b-a}.$$

Formula dos trapézios (simples)

- Os pesos de quadratura w_0 e w_1 na formula de Newton-Cotes são dados por

$$w_0 = \int_a^b L_0(x)\,dx = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}\,dx = \frac{b-a}{2},$$
$$w_1 = \int_a^b L_1(x)\,dx = \int_a^b \frac{x-a}{b-a}\,dx = \frac{b-a}{2}.$$

- Então a formula dos trapézios é

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{2} f(a) + \frac{b-a}{2} f(b)}$$

- O erro de aproximação usando a formula dos trapézios é

$$E := \int_a^b f(x)\,dx - \frac{b-a}{2} f(a) - \frac{b-a}{2} f(b)$$

Estimativa de erro para a formula de Newton-Cotes

Teorema: Seja $f \in \mathcal{C}^{n+1}([a,b])$ com $n \geq 1$, e

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} L_k(x) f(x_k),$$

onde os L_k são polinômio de Lagrange e $x_i = a + ih$, $h = (b-a)/n$, $i = 0, 1, \ldots, n$. Definimos o erro

$$E_n(f) = \int_a^b f(x) - \int_a^b p_n(x).$$

Então

$$|E_n(f)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \int_a^b |\pi_{n+1}(x)|\, dx,$$

onde

$$M_{n+1} = \max_{x \in [a,b]} |f^{(n+1)}(x)|, \qquad \pi_{n+1}(x) = \prod_{k=0}^{n} (x - x_k).$$

Demonstração: Já sabemos que (ver o capitulo sobre estimativa de erro para interpolação de Lagrange)

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \pi_{n+1}(x), \qquad \text{com } \xi \in [a,b].$$

Integrando esta expressão no intervalo $[a,b]$, obtemos o resultado do teorema.

Estimativa de erro para a formula dos trapézios (simples)

Aplicamos o teorema sobre estimativa de erro para a formula de Newton-Cotes com $n = 1$ e obtemos, com $M_2 = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$:

$$|E_1(f)| \leq \frac{M_2}{2} \int_a^b |(x-a)(x-b)| \, dx \leq \frac{M_2}{2} \int_a^b (b-x)(x-a) \, dx \leq \frac{(b-a)^3}{12} M_2.$$

Exemplo: Vamos aproximar a integral de $f(x) = \sqrt{6x-5}$ em $[a,b] = [1,9]$ usando a regra do trapézio.

$$\int_a^b f(x) \, dx = \int_1^9 \sqrt{6x-5} \approx \frac{b-a}{2} f(a) + \frac{b-a}{2} f(b) = 32.$$

Agora vamos calcular a estimativa de erro. Primeiro calculamos

$$M_2 = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)| = \max_{x \in [1,9]} |-9(6x-5)^{-3/2}| = 9,$$

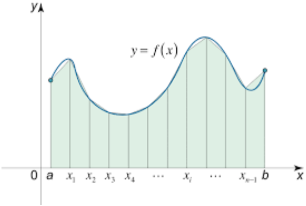
e depois

$$|E_1(f)| \leq \frac{(b-a)^3}{12} M_2 = \frac{9(9-1)^3}{12} = 384.$$

Exemplo: Neste exemplo, a estimativa não fornece uma informação útil sobre o erro, pois $384 \gg 32$. É importante entender que é apenas uma *estimativa* do erro, mas é possível que o valor exato de $|E_1(f)|$ seja bem menor que 384. Este tipo de estimativa não funciona bem quando $(b-a)$ é grande, o que é justamente o caso aqui.

Formula dos trapézios composta

Para reduzir o erro cometido, podemos dividir o intervalo $[a, b]$ em m subintervalos de mesmo comprimento $h = (b - a)/m$ e considerar como aproximação da integral a soma das areas dos trapézios obtidos em cada um dos n subintervalos.



Sejam os pontos equidistantes $x_k = a + kh$, $k = 0, 1, \dots, m$. Temos

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_m} f(x)\,dx = \sum_{k=1}^{m} \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)\,dx.$$

Usando a formula do trapézio em cada intervalo $[x_{k-1}, x_k]$, obtemos (pois $x_k - x_{k-1} = h$)

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)\,dx = \frac{h}{2} f(x_{k-1}) + \frac{h}{2} f(x_k) + E_k, \text{ onde o erro } E_k \text{ satisfaz } |E_k| \leq \frac{h^3}{12} \max_{x \in [x_{k-1}, x_k]} |f''(x)|.$$

Formula dos trapézios composta

Assim obtemos

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{k=1}^{m} \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)\,dx = \frac{h}{2}\sum_{k=1}^{m}[f(x_{k-1}) + f(x_k)] + \sum_{k=1}^{m} E_k.$$

Então a formula dos trapézios composta ou formula dos trapézios repetida para m subintervalos é:

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\sum_{k=1}^{m}[f(x_{k-1}) + f(x_k)]}$$

Podemos escrever esta formula de maneira equivalente como:

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{m-1}) + f(x_m)].}$$

O erro cometido ao usar a formula dos trapézios composta é $E_T := \sum_{k=1}^{m} E_k$.

Estimativa de erro na formula dos trapézios composta

Proposição: O erro E_T cometido ao calcular a integral da função f em $[a, b]$ pela formula dos trapézios repetida para m subintervalos satisfaz

$$|E_T| \leq \frac{(b-a)^3}{12m^2} \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|.$$

Demonstração: Em cada $[x_{k-1}, x_k]$ temos

$$|E_k| \leq \frac{h^3}{12} \max_{x \in [x_{k-1}, x_k]} |f''(x)|.$$

Usando $h = (b-a)/m$, obtemos

$$\begin{aligned} |E_T| = \left| \sum_{k=1}^{m} E_k \right| \leq \sum_{k=1}^{m} |E_k| \leq \sum_{k=1}^{m} \frac{h^3}{12} \max_{x \in [x_{k-1}, x_k]} |f''(x)| \\ \leq \frac{(b-a)^3}{12m^3} m \max_{x \in [a,b]} |f''(x)| = \frac{(b-a)^3}{12m^2} \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|. \end{aligned}$$

Exemplo de aplicação da formula dos trapézios composta

Exemplo: $f(x) = \sqrt{6x-5}$, $h = 1$, $[a, b] = [1, 9]$.

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$f(x_i)$	1	2.65	3.61	4.36	5.0	5.57	6.08	6.56	7.0

Usando a formula dos trapezios composta e os valores da tabela, obtemos

$$\begin{aligned}
&\int_1^9 \sqrt{6x-5}\,dx \\
&\quad\approx \frac{1}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + 2f(x_3) + 2f(x_4) + 2f(x_5) + 2f(x_6) + 2f(x_7) + 2f(x_8) + f(x_9)] \\
&\quad\approx 37.8
\end{aligned}$$

O erro E_T satisfaz a estimativa:

$$|E_T| \leq \frac{(b-a)^3}{12m^2} \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| = \frac{(9-1)^3}{12\times 8^2} \underbrace{\max_{x\in[1,9]} |-9(6x-5)^{-3/2}|}_{=9} = 6.$$

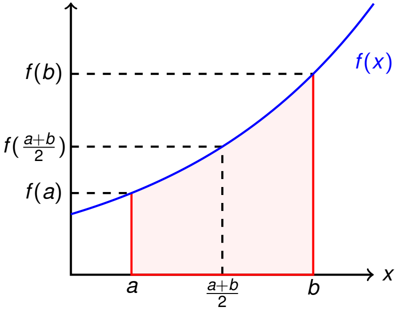
Observação: Esta estimativa de erro $|E_T| \leq 6$ é melhor que a estimativa de erro obtida pela formula do trapézio simples (obtivemos $|E_T| \leq 384$). Esta estimativa significa que o valor exato da integral pertence ao intervalo $[37.8-6, 37.8+6] = [31.8, 43.8]$. Podemos calcular o valor exato da integral: $\int_1^9 \sqrt{6x-5}\,dx = 38$. Então temos $|E_T| = 38 - 37.8 = 0.2 \leq 6$.

Formula de Simpson

- A formula de Simpson é o caso particular da formula de Newton-Cotes para $n = 2$, isto é, usamos polinômios de grau 2 para aproximar a função f a integrar.
- A formula de Simpson é

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2),$$

onde $x_0 = a$, $x_1 = (a+b)/2$, $x_2 = b$.



Exemplo de aproximação da integral da função $f(x) = e^{0.3x}$ em $[a, b] = [1, 4]$, usando o polinômio interpolador

$$p_2(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + f(x_2)L_2(x).$$

A area vermelha representa a aproximação da integral. A aproximação é visivelmente melhor que usando a formula do trapézio.

Formula de Simpson

- O peso de quadratura w_0 na formula de Newton-Cotes é dado por (usando uma mudança de variaveis na integral)

$$w_0 = \int_a^b L_0(x)\,dx = \int_a^b \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\,dx = \int_{-1}^{1} \frac{t(t-1)}{2}\,\frac{b-a}{2}\,dt = \frac{b-a}{6}.$$

- De maneira semelhante, os pesos de quadratura w_1 e w_2 são dados por

$$w_1 = \int_a^b L_1(x)\,dx = \frac{4(b-a)}{6}.$$

$$w_2 = \int_a^b L_2(x)\,dx = \frac{b-a}{6}.$$

- Então a formula de Simpson é

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]}$$

- O erro de aproximação usando a formula de Simpson é

$$E_2(f) := \int_a^b f(x)\,dx - \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]$$

Estimativa de erro para a formula de Simpson

Recordação: Estimativa de erro para a formula de Newton-Cotes:

$$\text{Erro:}\ \ E_n(f) := \int_a^b f(x) - \int_a^b p_n(x), \qquad |E_n(f)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \int_a^b |\pi_{n+1}(x)|\, dx,$$

onde

$$M_{n+1} = \max_{x\in[a,b]} |f^{(n+1)}(x)|, \qquad \pi_{n+1}(x) = \prod_{k=0}^{n} (x - x_k).$$

Então no caso $n = 2$ obtemos, com $M_3 = \max_{x\in[a,b]} |f^{(3)}(x)|$:

$$|E_2(f)| \leq \frac{M_3}{3!} \int_a^b \left| (x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)(x-b) \right| dx = \frac{(b-a)^4}{196} M_3.$$

Observação: De fato, não é uma estimativa de erro muito boa para $|E_2(f)|$. Por exemplo, temos $E_2(f) = 0$ se f for um polinômio de grau ≤ 3, enquanto $\frac{(b-a)^4}{196} M_3 > 0$ neste caso.

Observação: Podemos mostrar que se n for impar, então a formula de Newton-Cotes é exata para polinômios de grau n. Se n for par, então a formula de Newton-Cotes é exata para polinômios de grau $n + 1$.

Estimativa de erro para a formula de Simpson

Teorema: Seja $f \in \mathcal{C}^4([a,b])$, então

$$E_2(f) := \int_a^b f(x) - \int_a^b p_2(x) = \int_a^b f(x)\,dx - \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]$$
$$= -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi),$$

com $\xi \in (a,b)$. Temos então

$$|E_2(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{2880} \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|.$$

Observação: Se f for um polinômio de grau ≤ 3, então $f^{(4)}(x) = 0$ para todos $x \in [a,b]$, e consequentemente $E_2(f) = 0$. Isso mostra que a estimativa obtida neste teorema é mais precisa que a estimativa que segue da formula de Newton-Cotes (compare com a estimativa no slide anterior).

Formula de Simpson

Exemplo: Vamos calcular $\int_6^{10} \log_{10}(x)\,dx$. Então

$$a = 6, \quad b = 10, \quad \frac{a+b}{2} = 8.$$

Usando a formula de Simpson obtemos

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &\approx \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] \\ &= \frac{2}{3}\left[\log_{10}(6) + 4\log_{10}(8) + \log_{10}(10)\right] \approx 3.5936742.\end{aligned}$$

O erro de aproximação satisfaz

$$|E_2(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{2880} \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)| = \frac{4^5}{2880} \max_{x\in[a,b]} \left|-\frac{6}{x^4}\log_{10} e\right| = 7.1488783 \times 10^{-4}.$$

Observação: A estimativa de erro usando a formula de Simpson simples esta menor que a estimativa de erro usando a regra dos trapézios repetida 8 vezes.

Formula de Simpson composta

- Dividindo $[a, b]$ em $2n$ intervalos igualmente espaçados, podemos aplicar a formula de Simpson n vezes, com $x_i = x_0 + ih$, $i = 1, \ldots, 2n$, $h = (b-a)/(2n)$ e $x_0 = a$.
- Para cada subintervalo $[x_{2i-2}, x_{2i}]$, a formula de Simpson fornece:

$$\int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\left[f(x_{2i-2}) + 4f\left(x_{2i-1}\right) + f(x_{2i})\right].$$

- Juntando todos os intervalos, obtemos

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_{2n}} f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\sum_{i=1}^{n}\left[f(x_{2i-2}) + 4f\left(x_{2i-1}\right) + f(x_{2i})\right].$$

Então a formula de Simpson composta ou formula de Simpson repetida n vezes é:

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\sum_{i=1}^{n}\left[f(x_{2i-2}) + 4f\left(x_{2i-1}\right) + f(x_{2i})\right]}$$

Podemos escrever esta formula de maneira equivalente como:

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 2f(x_{2n-2}) + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n})].}$$

Estimativa de erro na formula de Simpson composta

Proposição: O erro cometido ao calcular $\int_a^b f(x)\,dx$ pela formula de Simpson composta é

$$|E_2(f)| = \left| \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)\,dx - \frac{h}{3}\left[f(x_{2i-2}) + 4f\left(x_{2i-1}\right) + f(x_{2i})\right] \right|.$$

Usando a estimativa da formula de Simpson simples em cada $[x_{2i-2}, x_{2i}]$, obtemos

$$|E_2(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{2880 n^4} M_4, \qquad \text{com} \qquad M_4 = \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|.$$

Formula de Simpson composta

Exemplo: Vamos calcular $\int_6^{10} \log_{10}(x)\, dx$ usando a Formula de Simpson repetida $n = 4$ vezes (8 subintervalos). Temos $h = (b-a)/2n = (10-6)/8 = 0.5$. Calculamos

$$\begin{aligned}\int_6^{10} \log_{10}(x)\, dx &\approx \frac{0.5}{3} [\log_{10}(6) + 4\log_{10}(6.5) + 2\log_{10} 7 + 4\log_{10}(7.5) + 2\log_{10}(8) \\ &\qquad +4\log_{10}(8.5) + 2\log_{10}(9) + 4\log_{10}(9.5) + \log_{10}(10)] \\ &\approx 3.5939136.\end{aligned}$$

O erro de aproximação satisfaz

$$|E_2(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{2880 n^4} \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)| = \frac{4^5}{2880 \times 4^4} \max_{x\in[a,b]} \left| -\frac{6}{x^4} \log_{10} e \right| = 2.7925 \times 10^{-6}.$$

O erro é menor que usando a regra de Simpson simples.

Formulas de Gauss

- Formulas de Newton-Cotes são exatas para integração de polinômios de grau $\leq n$, onde n é o grau do polinômio interpolador.
- As formulas de Newton-Cotes são limitadas pelo uso de pontos x_i equidistantes.
- Vamos apresentar as formulas de Gauss, que usam pontos x_i que não são equidistantes, e que são exatas para polinômios de grau $\leq 2n+1$.
- Idéia principal das formulas de Gauss: Usamos também polinômios de Lagrange para aproximar a função f a integrar, mas em vez de escolher pontos x_i equidistantes, os x_i são as raizes de um polinômio de uma familia de polinômios ortogonais.
- Precisaremos do resultado seguinte:

Teorema: Seja $\{p_\ell\}_{\ell=0}^{n}$ uma familia de polinômios ortogonais, com p_ℓ de grau ℓ, em relação ao produto escalar

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)\,dx.$$

Então p_ℓ possui ℓ raizes reais e distintas em (a, b), para todos $\ell = 1, 2, \ldots, n$.

Formula de Gauss

- Seja $\{p_\ell\}_{\ell=0}^{n+1}$ uma familia de polinômios ortogonais, com p_ℓ de grau ℓ, em relação ao produto escalar

$$\langle f, g\rangle = \int_a^b f(x)g(x)\,dx.$$

- Sejam $\{x_k\}_{k=0}^{n}$ as raizes do polinômio p_{n+1}. Sabemos, usando o teorema do slide anterior, que p_{n+1} tem $n+1$ raizes reais distintas em (a, b).
- A formula de Gauss é dada por

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k) \qquad \text{onde} \qquad \begin{cases} w_k = \displaystyle\int_a^b L_k(x)\,dx, & k = 0, \dots, n, \\ \{x_k\}_{k=0}^{n} \text{ são as raizes de } p_{n+1}. \end{cases}$$

- Aqui os w_k são pesos de quadratura e os L_k são polinômios de Lagrange

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}.$$

Proposição: A formula de Gauss é exata quando f é um polinômio de grau $\leq 2n+1$.

Formula de Gauss-Legendre

- Vamos mostrar como usar os polinômios de Legendre, que são ortogonais em $[-1, 1]$, para calcular formulas de quadratura de Gauss em qualquer intervalo $[a, b]$, usando uma mudança de variaveis.
- Consideramos a mudança de variaveis seguinte

$$x = \frac{(b-a)t + (b+a)}{2} \Longrightarrow dx = \frac{b-a}{2} dt.$$

- Aplicamos esta mudança de variaveis a:

$$\int_a^b f(x)\, dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{(b-a)t + (b+a)}{2}\right)\, dt \approx \sum_{k=0}^{n} w_k F(t_k)$$

  onde

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

  e $\{t_k\}_{k=0}^n$ são as raizes de p_{n+1}, onde p_{n+1} é o polinômio de Legendre de grau $n+1$.
- **Polinômios de Legendre:** $p_0(x) = 1$, $p_1(x) = x$, $p_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$, $p_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$, etc ...
- **Raizes de polinômios de Legendre:** As raizes de p_2 são $\{\pm 0.5773502691896\}$. As raizes de p_3 são $\{0, \pm 0.77459666924148\}$, etc ... existem tabelas de raizes de polinômios de Legendre.

Formula de Gauss-Legendre

Exemplo: Seja $f(x) = 1 + x^4$, vamos calcular a integral de f em $[-1, 1]$ usando uma formula de Gauss-Legendre com $n = 2$. A formula de Gauss-Legendre é

$$\int_{-1}^{1} f(x) \approx \sum_{i=0}^{2} w_k f(x_k).$$

Para $n = 2$, usamos as raizes do polinômio de Legendre $p_{n+1}(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$. As raizes $\{x_0, x_1, x_2\}$ de p_3 e os pesos de quadratura w_k são, usando 8 algarismos,

$$\begin{aligned} x_0 &= -0.77459667, & w_0 &= 0.55555556, \\ x_1 &= 0.0, & w_1 &= 0.88888889, \\ x_2 &= 0.77459667, & w_2 &= 0.55555556, \end{aligned}$$

Então calculamos

$$\int_{-1}^{1} 1 + x^4 \, dx \approx w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2) = 2.400000014766.$$

Observamos que o valor exato é $\int_{-1}^{1} 1 + x^4 \, dx = \left[x + \frac{x^5}{5} \right]_{-1}^{1} = 2.4$. Então o erro na aproximação da integral usando a formula de Gauss-Legendre é

$$E_{GL} = |2.4 - 2.400000014766| \approx 1.4766 \times 10^{-8}.$$

Formula de Gauss-Legendre

Exemplo (continuação do slide anterior): Vamos comparar com a formula de Simpson:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right],$$

com $h = 1$, $x_0 = -1$, $x_1 = 0$ e $x_2 = 1$. Obtemos

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \frac{1}{3}\left[2 + 4 + 2\right] = 2.6666667.$$

Então o erro na aproximação da integral usando a formula de Simpson é

$$E_S = |2.4 - 2.6666667| = 0.2666667.$$

Observamos que $E_{GL} = 1.4766 \times 10^{-8} \ll E_S = 0.2666667$.

Observação: A formula de Gauss é exata quando f é um polinômio de grau $\leq 2n+1$. Neste exemplo, temos $n = 2$ então a formula de Gauss-Legendre deveria ser exata quando f é um polinômio de grau ≤ 5. Como $f(x) = 1 + x^4$ é um polinômio de grau 4, a formula de Gauss-Legendre deveria dar o resultado exato, mas o erro é $E_{GL} = 1.4766 \times 10^{-8} \neq 0$. De fato, este pequeno erro é devido ao fato que estamos usando aproximações das raizes x_0, x_1, x_2 e dos pesos de quadratura w_0, w_1, w_2.

Formula de Gauss

Exemplo: Vamos aplicar a formula de Gauss-Legendre com $n = 1$ e $[a, b] = [0, 1]$. Os polinômios ortogonais neste intervalo são

$$p_0(x) = 1, \quad p_1(x) = x - \frac{1}{2}, \quad p_2(x) = x^2 - x + \frac{1}{6} = (x - x_0)(x - x_1),$$

onde

$$x_0 = \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{12}} \quad \text{e} \quad x_1 = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{12}}.$$

Calculamos

$$w_0 = \int_0^1 L_0(x)\,dx = \int_0^1 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\,dx = \frac{1}{2},$$
$$w_1 = \int_0^1 L_1(x)\,dx = \int_0^1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\,dx = \frac{1}{2}.$$

Assim obtemos a formula de integração de Gauss seguinte:

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx \frac{1}{2} f\left(\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{12}}\right) + \frac{1}{2} f\left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{12}}\right).$$

Extrapolação de Richardson e integração de Romberg

- Seja $f \in \mathcal{C}^{2k+2}([a,b])$. Dividimos $[a,b]$ em m subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, \ldots, m$, onde $x_i = a + ih$ e $h = (b-a)/m$.
- A formula dos trapézios composta é:

$$\int_a^b f(x)dx = T(m) + E,$$

onde E é o erro de aproximação e

$$T(m) := \frac{h}{2}\sum_{i=1}^{m}[f(x_{i-1}) + f(x_i)].$$

- Podemos mostrar que o erro de aproximação tem a propriedade seguinte:

$$E = \int_a^b f(x)dx - T(m) = \sum_{r=1}^{k} c_r h^{2r} + O(h^{2k+2}),$$

onde os c_r são constantes que dependem de f.

Extrapolação de Richardson e integração de Romberg

- Usando varios níveis de discretização $m, 2m, 4m$, etc ..., podemos zerar os primeiros termos $c_1 h^2, c_2 h^4$, etc ... aparecendo no erro, e obter assim uma aproximação de $\int_a^b f(x)dx$ mais precisa.
- Por exemplo, com $k = 2$ temos

$$\int_a^b f(x)dx - T(m) = c_1 h^2 + c_2 h^4 + O(h^6)$$

$$\int_a^b f(x)dx - T(2m) = c_1 \left(\frac{h}{2}\right)^2 + c_2 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + O(h^6)$$

- Combinando essas duas equações, obtemos

$$\int_a^b f(x)dx - \frac{4T(2m) - T(m)}{3} = -\frac{c_2}{4} h^4 + O(h^6).$$

- Este procedimento chama-se “extrapolação de Richardson”.
- Podemos repetir a extrapolação de Richardson para eliminar termos de ordem mais alto no erro, e obtemos o resultado seguinte, usando a notação $T_0(m) = T(m)$.

Extrapolação de Richardson e integração de Romberg

Proposição: Seja $f \in \mathcal{C}^{2k+2}([a,b])$, $x_i = a + ih$ e $h = (b-a)/m$. O método de integração de Romberg consiste na aproximação

$$\int_a^b f(x)dx \approx T_k(m),$$

onde $T_k(m)$ é definido pela formula de indução

$$T_k(m) := \frac{4^k T_{k-1}(2m) - T_{k-1}(m)}{4^k - 1}, \quad k = 1, 2, 3, \ldots, \text{ com } T_0(m) := \frac{h}{2}\sum_{i=1}^{m}[f(x_{i-1}) + f(x_i)].$$

O erro de aproximação E satisfaz

$$E = \int_a^b f(x)dx - T_k(m) = O(h^{2k+2}).$$

Observação: A notação $O(h^{2k+2})$, significa “da ordem h^{2k+2}”. Podemos escrever essa propriedade de maneira equivalente assim: existe um $h_0 > 0$ e uma constante c tal que para todos $0 < h \leq h_0$, temos

$$|E| = \left| \int_a^b f(x)dx - T_k(m) \right| \leq c\, h^{2k+2}.$$

Observação: A condição de regularidade $f \in \mathcal{C}^{2k+2}([a,b])$ é essencial no método de integração de Romberg. Sem essa hipótese, a estimativa de erro

$$E = \int_a^b f(x)dx - T_k(m) = O(h^{2k+2})$$

não é verdadeira. Por exemplo, o método de integração de Romberg não funciona para calcular

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

pois $x^{1/3}$ não é derivável em $x = 0$.

Tabela de Romberg

- Para calcular $T_k(m)$, podemos organizar os calculos numa tabela de Romberg:

m	$T_0(m)$	$T_1(m)$	$T_2(m)$	$T_3(m)$	$T_4(m)$
4	$T_0(4) \rightarrow$	$T_1(4) \rightarrow$	$T_2(4) \rightarrow$	$T_3(4) \rightarrow$	$T_4(4)$
8	$T_0(8) \nearrow$	$T_1(8) \nearrow$	$T_2(8) \nearrow$	$T_3(8) \nearrow$	
16	$T_0(16) \nearrow$	$T_1(16) \nearrow$	$T_2(16) \nearrow$		
32	$T_0(32) \nearrow$	$T_1(32) \nearrow$			
64	$T_0(64) \nearrow$				

- Os termos da coluna $T_0(m)$ são calculados primeiro usando a formula dos trapézios composta.
- Depois, calculamos os termos da coluna $T_1(m)$ seguindo as setas, e usando a formula

$$T_1(m) := \frac{4T_0(2m) - T_0(m)}{4-1}.$$

- Depois, calculamos os termos da coluna $T_2(m)$ seguindo as setas, e usando a formula

$$T_2(m) := \frac{4^2 T_1(2m) - T_1(m)}{4^2-1}.$$

- Continuamos este processo até ter apenas um termo na ultima coluna, neste exemplo o último termo é $T_4(4)$.
- Usamos o termo da última coluna para aproximar a integral de f, neste exemplo seria:

$$\int_a^b f(x)dx \approx T_4(4).$$

Exemplo de tabela de Romberg

- Usando a tabela de Romberg, vamos aproximar a integral

$$\int_0^1 \frac{e^{-2x}}{1+4x}\,dx.$$

m	$T_0(m)$	$T_1(m)$	$T_2(m)$	$T_3(m)$	$T_4(m)$
4	0.248802 $\rightarrow$	0.221038 $\rightarrow$	0.220470 $\rightarrow$	0.2220458 $\rightarrow$	0.220458
8	0.227979 $\nearrow$	0.220505 $\nearrow$	0.220459 $\nearrow$	0.220458 $\nearrow$	
16	0.222374 $\nearrow$	0.220461 $\nearrow$	0.220458 $\nearrow$		
32	0.220940 $\nearrow$	0.220458 $\nearrow$			
64	0.220579 $\nearrow$				

- Por exemplo, calculamos

$$T_1(4) := \frac{4T_0(8) - T_0(4)}{4-1} = \frac{4 \times 0.227979 - 0.248802}{3} = 0.221038.$$

- Obtemos a aproximação seguinte:

$$\int_0^1 \frac{e^{-2x}}{1+4x}\,dx \approx T_4(4) = 0.220458.$$

- Observamos que $T_0(64) = 0.220579$ não é correto a mais que 3 algarismos, enquanto $T_4(4) = 0.220458$ tem 6 algarismos corretos. Então a tabela de Romberg permite aumentar bastante a precisão da aproximação obtida usando a formula dos trapézios composta.