Integração Numérica: O método de Romberg

O método de Romberg baseia-se no método dos trapézios e em uma expansão assintótica do erro que se obtém com esse método. Com $h = (b-a)/n$ e os pontos $x_i = a + ih, i = 0, \ldots, n$ temos a fórmula dos trapézios para a integral de uma função $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ dada por:

$$T(h) = h(\frac{f(x_0)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{f(x_n)}{2}) \quad .$$

A expansão do erro é dada pela fórmula de **Euler-McLaurin**. Quando $f(x)$ tem $m+2$ derivadas contínuas, temos:

$$\int_a^b f(x)\,dx = T(h) - \sum_{k=1}^{m} \beta_{2k} h^{2k} (f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)) - (b-a)\beta_{2m+2} h^{2m+2} f^{(2m+2)}(z) \ ,$$

onde $\beta_i, i = 2, 4, \ldots, 2m+2$ são constantes que não dependem de f e z é algum ponto do intervalo $[a, b]$ que depende de h. A demonstração da fórmula acima requer apenas conhecimentos de cálculo I, mas é um pouco extensa e é apresentada separadamente. O fato importante sobre esta fórmula para o método de Romberg, é que:

$$\int_a^b f(x)\,dx - T(h) = \sum_{k=1}^{m} c_k h^{2k} + c_{m+1}(h) h^{2m+2} \quad ,$$

onde as constantes $c_k, k = 1, \ldots, m$ independem de h ($c_k = -\beta_{2k}(f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a))$).
Observação: os números $B_k = k!\beta_k$ são conhecidos como números de Bernoulli.

A ideia do método de Romberg

Podemos observar da fórmula de Euler-McLaurin, ou da fórmula do erro para o método dos trapézios derivada anteriormente no curso, que o erro se reduz quadraticamente com o espaçamento h, ou seja temos que $E(h) = \int_a^b f(x)\,dx - T(h) = O(h^2)$. Da fórmula acima, temos que:

$$\begin{aligned} T(h) &= \int_a^b f(x) - c_1 h^2 - \sum_{k=2}^{m} c_k h^{2k} - c_{m+1}(h) h^{2m+2} \text{ e} \\ T(h/2) &= \int_a^b f(x) - c_1 \frac{h^2}{4} - \sum_{k=2}^{m} c_k (h/2)^{2k} - c_{m+1}(h/2)(h/2)^{2m+2} \,. \end{aligned}$$

Combinando estas duas expressões de forma a eliminar os termos proporcionais a h^2 obtemos

$$S(h/2) = \frac{4T(h/2) - T(h)}{3} = \int_a^b f(x)dx - \bar{c}_2 h^4 - \bar{c}_3 h^6 - .... - \bar{c}_{m+1}(h) h^{2m+2} \,,$$

onde as novas constantes $\bar{c}_k$ resultam desta combinação (por exemplo, $\bar{c}_2 = -c_2/4$).

Observação: O valor acima $S(h/2)$ coincide com o valor que se obtém ao se calcular a aproximação pelo método de Simpson com espaçamento $h/2$. Note que o termo dominante do erro é de ordem 4. Com uma simples combinação linear de dois valores calculados pelo método dos trapézios, conseguimos elevar a ordem de convergência do método.

Esta mesma idéia pode ser generalizada, combinando valores de $S(h/2)$ com $S(h/4)$ de forma a cancelar o erro de ordem 4, obtendo

$$R(h/4) = \frac{16S(h/4) - S(h/2)}{15} = \int_a^b f(x)dx - \tilde{c}_3 h^6 - \tilde{c}_4 h^8 - .... - \tilde{c}_{m+1}(h) h^{2m+2} \,,$$

com constantes $\tilde{c}_j, j = 3, ..., m$. O método de Romberg consiste na exploração recursiva desta ideia, esquematizada na tabela seguinte:

$$
\begin{array}{rcllllll}
T(h) & = & T_{0,0} \\
T(\frac{h}{2}) & = & T_{1,0} & T_{1,1} \\
T(\frac{h}{2^2}) & = & T_{2,0} & T_{2,1} & T_{2,2} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\
T(\frac{h}{2^{m-1}}) & = & T_{m-1,0} & T_{m-1,1} & T_{m-1,2} & \dots & T_{m-1,m-1} \\
T(\frac{h}{2^m}) & = & T_{m,0} & T_{m,1} & T_{m,2} & \dots & T_{m,m-1} & T_{m,m}
\end{array}
$$

Cada coluna k da tabela acima é obtida da coluna anterior pela expressão

$$T_{i,k} = \frac{4^k\, T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{4^k - 1} = T_{i,k-1} + \frac{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{4^k - 1},$$

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.

Note que os valores na primeira coluna da tabela são obtidos com o método dos trapézios, a cada vez com o novo espaçamento sendo metade do anterior. Os valores na segunda coluna, correspondem a um método de ordem 4, e em geral na k-ésima coluna temos valores correspondentes a um método de ordem $2k$. A cada novo refinamento do método dos trapézios, obtém-se novos valores em cada coluna e pode-se iniciar uma nova. Com funções com $m + 2$ derivadas contínuas, pode-se estender a tabela até a coluna m. Em geral, pode-se parar o processo quando a diferença entre os dois últimos elementos de uma linha tiver módulo dentro da precisão desejada.

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 considerarmos $h_0 = (b - a)$, e $h_i = h_{i-1}/2$, $i = 1, 2, \dots$ (i.e. $N_i = 2^i$), então

$$T(h_i) = \frac{1}{2} T(h_{i-1}) + h_i \sum_{j=1}^{2^{i-1}} f(a + (2j-1)h_i).$$

Note que para obter o próximo passo, precisamos calcular os valores de f apenas nos novos pontos acrescentados.

Vejamos um exemplo a seguir, aplicando o método de Romberg para o cálculo de $\int_1^2 1/x \; dx$. Os valores obtidos são os seguintes:

0.75				
0.708333333	0.694444444			
0.697023810	0.693253968	0.693174603		
0.694121850	0.693154531	0.693147901	0.693147477	
0.693391202	0.693147653	0.693147194	0.693147183	0.693147182

O valor exato da integral é igual a $\ln(2) = 0.693147181$, com os 9 significativos aqui apresentados. Podemos verificar como se comportam os erros. Na primeira coluna temos os valores referentes ao método dos trapézios, que correspondem a erros de 0.056853, 0.015186, 0.0038766, 0,00097467 e 0.00024402 para $h = 1$, $h = 1/2$, $h = 1/4$, $h = 1/8$ e $h = 1/16$ respectivamente. Note que reduzindo h por um fator 2, o erro cai por um fator aproximadamente 4, evidenciando que o erro é praticamente proporcional a h^2. Na segunda coluna, temos o método de Simpson, com erros de 1.2973×10^{-3}, 1.0679×10^{-4}, 7.3501×10^{-6} e 4.7226×10^{-7} para $h = 0.5$ a $h = 0.0625$ respectivamente, com fatores de redução a cada divisão de h por 2 de 12.14, 14.53 e 15.56, tendendo a 16 ($= 2^4$), evidenciando a ordem 4 de convergência do método de Simpson. O valor da última entrada na tabela apresenta erro em relação ao valor exato da integral de 1.36×10^{-9} (usando mais significativos que o exibido na tabela). A melhor aproximação que havíamos calculado pelo método dos trapézios tinha erro de 2.4402×10^{-4}. Note que o método de Romberg permitiu que obtivéssemos um resultado com erro 179850 vezes menor, apenas avaliando combinações lineares dos valores já calculados, sem que para tal fossem necessárias novas avaliações da função $f(x)$.