Algoritmia Aplicada

Ano lectivo 2011-2012

Aula 8 – Algoritmos Matemáticos: Integração; Ajuste de curvas

Sumário

- Integração
  - Integração simbólica **(última aula)**
  - Métodos de quadratura simples **(última aula)**
    - Método dos rectângulos
    - Método dos trapézios
  - Métodos de quadratura compostos
    - Método de *Simpson*
  - Métodos de quadratura adaptativa
- Ajuste de curvas
  - Interpolação polinomial: Fórmula de *Lagrange*

Métodos de Quadratura Compostos

- **Combinam métodos de quadratura simples, com vista à obtenção de uma melhor precisão no cálculo do integral**

- **De entre estes vamos estudar apenas o seguinte:**

Método de SIMPSON

Método de Simpson

Recordemos o cálculo do integral $\int_a^b f(x)dx$ pelos dois métodos anteriores, para a hipótese do intervalo [a,b] estar dividido em N intervalos iguais

$$R = \sum_{i=1}^{N} w.\underbrace{f\left(a - \frac{w}{2} + iw\right)}_{R_i} = \sum_{i=1}^{N} WR_i$$

$$T = \sum_{i=1}^{N} W.\underbrace{\frac{f(a+(i-1)w) + f(a+iw)}{2}}_{T_i} = \sum_{i=1}^{N} WT_i$$

Método de Simpson

Como ambos os métodos dão apenas uma aproximação do valor exacto do integral, temos:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} W.R_i + E_R$$

Erro cometido quando é usado o Método dos Rectângulos

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} W.T_i + E_T$$

Erro cometido quando é usado o Método dos Trapézios

Método de Simpson

Vamos reescrever as equações (a 1ª é multiplicada por 2):

$$2.\int_a^b f(x)dx = 2.\sum_{i=1}^{N} W.R_i + 2E_R$$

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} W.T_i + E_T$$

Somando membro a membro e dividindo por 3 vem:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} W.\left(\frac{2R_i + T_i}{3}\right) + E_s$$

$$E_s = \frac{2E_R + E_T}{3}$$

Método de Simpson

- **Pode demonstrar-se que o erro cometido é menor do que nos métodos anteriores, isto é:**

$$|E_s| \langle |E_R| \quad \textbf{e} \quad |E_s| \langle |E_T|$$

Então o cálculo do integral é feito, com maior precisão através da fórmula seguinte:

$$S = \sum_{i=1}^{N} W.\left(\frac{2R_i + T_i}{3}\right)$$

Ou seja, com N elevado, temos: $\int_a^b f(x)dx \cong S$

Método de Simpson

- **Temos então:**

$$S = \sum_{i=1}^{N} W.\left(\frac{2R_i + T_i}{3}\right)$$

com $$R_i = f\left(a - \frac{w}{2} + iw\right)$$

$$T_i = \frac{f(a + (i-1)w) + f(a + iw)}{2}$$

Substituindo R_i e T_i pelas expressões, vem finalmente

$$S = \sum_{i=1}^{n} w.\frac{4f\left(a - \frac{w}{2} + iw\right) + f(a + (i-1)w) + f(a + iw)}{6}$$

Método de Simpson

➢ **Algoritmo para cálculo de S**

```
Função IntegralSimpson (a, b, N)
S ⟵ 0
W ⟵ (b-a)/N
DO FOR I=1 TO N
     S⟵S+W*((4*f(a-W/2+I*W)+f(a+(I-1)*W)+
          +f(a+I*W))/6
RETURN (S)
```

Nota: **Este algoritmo efectua o cálculo de f, 3 vezes, em cada volta do ciclo, contra 2 vezes e 1 vez nos métodos anteriores**

Dada uma função f(x), o algoritmo calcula o integral $\int_a^b f(x)dx$ **pelo Mét. Simpson, considerando uma divisão do intervalo [a,b] em N intervalos iguais.**

O valor aproximado do integral é S

Método de Simpson
Exemplo de aplicação

Calcular

$$\int_1^2 \frac{1}{x}dx$$ **pelo *Método de Simpson***

Resultados obtidos pelo algoritmo para 3 casos

Caso	a	b	N	T	Precisão
1º	1	2	10	0,6931473746651	Correcto até 6ª casa
2º	1	2	100	0,6931471805795	Correcto até 10ª casa
3º	1	2	1000	0,6931471805599	Correcto até 13ª casa

Melhor precisão do que a obtida com os métodos anteriores

$$\int_1^2 \frac{1}{x}dx = 0.6931471805599...$$

Métodos de Quadratura Adaptativa

- O problema dos métodos anteriores é que a **precisão do cálculo** é afectada pelos factores seguintes:

  1) Nº de sub-intervalos considerados (N)

  2) Valores das derivadas de ordem mais elevada da função a integrar

Métodos de Quadratura Adaptativa

- Os dois factores referidos estão interligados do seguinte modo:
  - quando as derivadas de ordem mais elevada têm grandes valores, **N deverá ser grande**, sob pena de a precisão ser seriamente afectada
  - pelo contrário, se as derivadas tiverem valores pouco significativos, será suficiente um **pequeno número de intervalos (N)** para garantir um boa precisão de cálculo

Métodos de Quadratura Adaptativa

No entanto:

- **Os métodos anteriores não procedem a qualquer ajuste de N, de acordo com a função a integrar**
- **Assim, é de esperar um mau desempenho (baixa precisão de cálculo do integral) para determinadas funções**

Métodos de Quadratura Adaptativa

- **Utilizam um processo sistemático de adaptação de N (número de sub-intervalos em que é dividido [a,b]) à natureza da função a integrar, por forma a garantir uma boa precisão**
- **Vamos escrever o algoritmo relativo a um destes métodos, que se baseia no "Método de Simpson"**

Métodos de Quadratura Adaptativa

- **Recordemos o algoritmo para o Método de Simpson**

```
Função IntegralSimpson (a, b, N)
S ←—— 0
W ←——(b-a)/N
DO FOR I=1 TO N
    S ←——S+W * ...
RETURN (S)
```

- **E agora o algoritmo recursivo do método:**

```
Função AdaptSimpson (a, b)
    IF ABS(IntegralSimpson(a,b,10)-IntegralSimpson(a,b,5))<TOL
    THEN RETURN(IntegralSimpson(a,b,10))
    ELSE RETURN(AdaptSimpson(a,(a+b)/2)+ AdaptSimpson((a+b)/2,b))
```


Métodos de Quadratura Adaptativa

- **Se a precisão do "método de Simpson" no intervalo original [a,b] é suficientemente boa com a subdivisão em 10 intervalos então terminar (TOL deverá ter um valor baixo).**

  O valor da tolerância, TOL, se for demasiado baixo pode originar um ciclo infinito → Pede-se uma precisão impossível

- **Senão, considerar os intervalos [a,(a+b)/2] e [(a+b)/2, b], sendo que o integral pretendido será a soma dos integrais em cada um dos dois intervalos.**

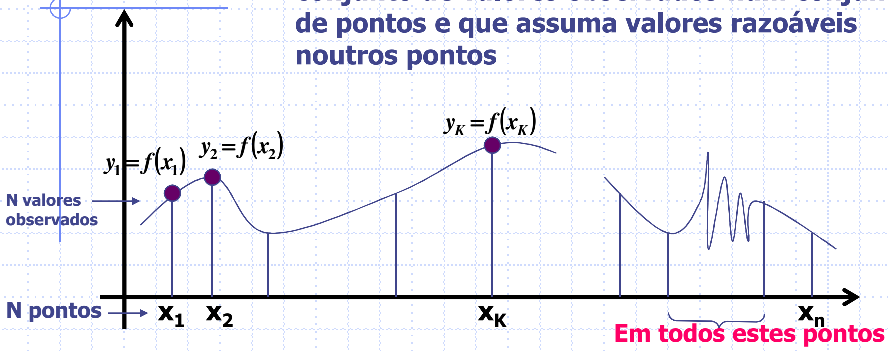
$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^{(a+b)/2} f(x)dx + \int_{(a+b)/2}^b f(x)dx$$

- **Considerando que estes são os novos intervalos originais, regressar aqui**

Ajuste de curvas

Problema:

- **Encontrar uma função que satisfaça um conjunto de valores observados num conjunto de pontos e que assuma valores razoáveis noutros pontos**



Em todos estes pontos temos valores pouco razoáveis

Aplicações:

- **Análise de dados experimentais**
- **Computação gráfica**

Ajuste de curvas

- **Dois tipos de abordagens principais:**
  - **INTERPOLAÇÃO**
    - **Função suave que satisfaz exactamente os valores dados em todos os pontos x_1, x_2, ...x_n**
    - **Iremos ver dois tipos**
      - **Interpolação Polinomial**
      - **Interpolação "Spline"**
  - **MÍNIMOS QUADRADOS**
    - **Os valores dados podem não ser precisos, pelo que não se justifica procurar uma função que os satisfaça exactamente, mas antes uma função que aproxima aqueles valores tanto quanto possível**

Ajuste de curvas
Interpolação Polinomial: Fórmula de Lagrange

- **Interpolação Polinomial**

  Dado um conjunto de N pontos $x_1, x_2, \ldots, x_N$

  e valores associados $y_1, y_2, \ldots, y_N$

determinar o polinómio p(x), de grau N-1, tais que

$$p(x_1)=y_1; p(x_2)=y_2; \ldots ; p(x_n)=y_N$$

Interpolação Polinomial: Fórmula de Lagrange

- **Inconvenientes**
  - **Cálculos pesados para determinação dos vários coeficientes (em nº de N) do polinómio p(x)**
  - **O polinómio p(x) será de elevado grau, se N for elevado**
  - **Os polinómios de grau elevado são funções relativamente complicadas que podem ter comportamentos inesperados, o que não será adequado ao nosso objectivo de ajuste**

Interpolação Polinomial

Fórmula de Lagrange

- **Constitui a solução clássica para o problema da interpolação polinomial**

$$p(x)=\sum_{j=1}^{N} y_j \prod_{\substack{i=1\\ i\neq j}}^{N} \frac{x-x_i}{x_j-x_i}$$

Ou, desenvolvendo:

$$p(x)=y_1\frac{(x-x_2)(x-x_3)\ldots(x-x_N)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)\ldots(x_1-x_N)}+$$
$$y_2\frac{(x-x_1)(x-x_3)\ldots(x-x_N)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)\ldots(x_2-x_N)}+$$
$$\ldots$$
$$y_N\frac{(x-x_1)(x-x_2)\ldots(x-x_{N-1})}{(x_N-x_1)(x_N-x_2)\ldots(x_N-x_{N-1})}$$

N termos, cada um deles sendo um polinómio de grau (N-1)

- **(N-1) factores numerador**
- **(N-1) factores denominador**

Interpolação Polinomial

Fórmula de Lagrange

- **Infelizmente p(x) não está na forma canónica**

$$p(x)=p_0+p_1x+p_2x^2+\ldots+p_{N-1}x^{N-1}$$

- **A conversão da forma dada pela fórmula de Lagrange para a forma canónica não é trivial!**

Exemplo

$$x_1=1, y_1=3;\quad x_2=2, y_2=7;\quad x_3=3, y_3=13$$

Determinar p(x) que passe por y_1, y_2 e y_3 nos pontos x_1, x_2, x_3

Solução $p(x)=x^2+x+1$

Próxima aula

- Ajuste de curvas
  - Interpolação "Spline"
  - Método dos mínimos quadrados
- Matrizes