

Derivação e Integração Numéricas

INF1608 – Análise Numérica

Waldemar Celes
celes@inf.puc-rio.br

Departamento de Informática, PUC-Rio



Tópicos

Derivação Numérica

Integração Numérica

Integração Adaptativa

Quadratura de Gauss



Derivação Numérica



Derivação Numérica

Derivada analítica:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$



Derivação Numérica

Derivada analítica:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Numericamente

- Do teorema de Taylor

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(c), \quad c \in [x, x+h]$$



Derivação Numérica

Derivada analítica:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Numericamente

- Do teorema de Taylor

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(c), \quad c \in [x, x+h]$$

- Expressando $f'(x)$:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2}f''(c), \quad c \in [x, x+h]$$



Derivação Numérica

- Se h for pequeno:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

$$\text{erro} = \frac{h}{2} f''(c), \quad c \in [x, x+h]$$



Derivação Numérica

- ▶ Se h for pequeno:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

$$\text{erro} = \frac{h}{2} f''(c), \quad c \in [x, x+h]$$

Observação

- ▶ Quando o erro é $O(h^n)$, diz-se que a fórmula é uma aproximação de ordem n
-



Derivação Numérica

- ▶ Se h for pequeno:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

$$\text{erro} = \frac{h}{2} f''(c), \quad c \in [x, x+h]$$

Observação

- ▶ Quando o erro é $O(h^n)$, diz-se que a fórmula é uma aproximação de ordem n

O método apresentado é então de **primeira ordem**

- ▶ Note que c depende de h ; no entanto, ainda assim, podemos afirmar que é de primeira ordem
 - ▶ Quando $h \rightarrow 0$, $f''(c) \rightarrow f''(x)$ que é constante



Derivação Numérica

Exemplo

- Considere $f(x) = \frac{1}{x}$, encontrar o valor de $f'(x)$ em $x = 2$



Derivação Numérica

Exemplo

- ▶ Considere $f(x) = \frac{1}{x}$, encontrar o valor de $f'(x)$ em $x = 2$
 - ▶ Analiticamente

$$f'(x) = -\frac{1}{x^2}$$

$$f'(2) = -0.25$$



Derivação Numérica

Exemplo

- ▶ Considere $f(x) = \frac{1}{x}$, encontrar o valor de $f'(x)$ em $x = 2$
 - ▶ Analiticamente

$$f'(x) = -\frac{1}{x^2}$$
$$f'(2) = -0.25$$

- ▶ Numericamente

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \frac{\frac{1}{x+h} - \frac{1}{x}}{h}$$
$$\text{erro} = \frac{h}{2} f''(c), \text{ onde: } f''(x) = \frac{2}{x^3}$$
$$\text{erro} = \frac{h}{c^3}$$



Derivação Numérica

- ▶ Exemplo: Numericamente
 - ▶ Em $x = 2$, adotando $h = 0.1$, temos:

$$f'(2) = \frac{\frac{1}{2.1} - \frac{1}{2}}{0.1} = -0.2381$$

$$erro \in \left[\frac{0.1}{2.1^3}, \frac{0.1}{2^3} \right] = [0.0108, 0.0125]$$



Derivação Numérica

- ▶ Exemplo: Numericamente
 - ▶ Em $x = 2$, adotando $h = 0.1$, temos:

$$f'(2) = \frac{\frac{1}{2.1} - \frac{1}{2}}{0.1} = -0.2381$$

$$erro \in \left[\frac{0.1}{2.1^3}, \frac{0.1}{2^3} \right] = [0.0108, 0.0125]$$

- ▶ Verificando:

$$\Delta = | -0.25 + 0.2381 | = 0.0119 \in [0.0108, 0.0125]$$



Derivação Numérica

Método de **segunda ordem**

► Taylor

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(c_1)$$

e

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(c_2)$$

► onde: $c_1 \in [x, x+h]$ e $c_2 \in [x-h, x]$



Derivação Numérica

Método de **segunda ordem**

► Taylor

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(c_1)$$

e

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(c_2)$$

► onde: $c_1 \in [x, x+h]$ e $c_2 \in [x-h, x]$

► Subtraindo as equações:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{12}f'''(c_1) - \frac{h^2}{12}f'''(c_2)$$

► Se $f'''(x)$ for contínua, existe um teorema que permite dizer:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}f'''(c), \text{ onde } c \in [x-h, x+h]$$



Derivação Numérica

Derivada de segunda ordem: $f''(x)$

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{iv}(x)$$

e

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{iv}(x)$$

► Somando as equações:

$$f(x+h) + f(x-h) - 2f(x) = h^2f''(x) + \frac{h^4}{12}f^{iv}(c)$$

$$f''(x) = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} - \frac{h^2}{12}f^{iv}(c)$$

com $c \in [x-h, x+h]$



Derivação numérica

Erro de arredondamento

- ▶ Estamos subtraindo dois números muito próximos



Derivação numérica

Erro de arredondamento

- ▶ Estamos subtraindo dois números muito próximos
 - ▶ Analisando a fórmula de segunda ordem:

$$f'(x)_{\text{exata}} = f'(x)_{\text{num}} - \frac{h^2}{6} f'''(c)$$

$$\text{onde: } f'(x)_{\text{num}} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

- ▶ Considerando \hat{f} a representação *double* de f , temos:

$$\hat{f} = f \pm \frac{1}{2}\epsilon, \text{ onde } \epsilon = \epsilon_{\text{maq}}$$

- ▶ Então:

$$\begin{aligned} \hat{f}'(x) &= \frac{\hat{f}(x+h) - \hat{f}(x-h)}{2h} \\ &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \frac{\|\epsilon_1\| + \|\epsilon_2\|}{4h} \end{aligned}$$



Derivação numérica

Erro de arredondamento

$$\frac{\|\epsilon_1\| + \|\epsilon_2\|}{4h} \leq \frac{2\epsilon_{maq}}{4h} = \frac{\epsilon_{maq}}{2h}$$

- Logo, erro total (método + arredondamento) é:

$$E(h) = \frac{h^2}{6} f'''(c) + \frac{\epsilon_{maq}}{2h}$$



Derivação numérica

Erro de arredondamento

$$\frac{\|\epsilon_1\| + \|\epsilon_2\|}{4h} \leq \frac{2\epsilon_{maq}}{4h} = \frac{\epsilon_{maq}}{2h}$$

► Logo, erro total (método + arredondamento) é:

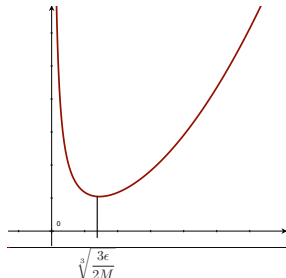
$$E(h) = \frac{h^2}{6} f'''(c) + \frac{\epsilon_{maq}}{2h}$$

Determinando ponto de mínimo:

$$E'(h) = -\frac{\epsilon}{2h^2} + \frac{M}{3}h = 0$$

onde $M = \|f'''(c)\| \approx \|f'''(x)\|$

$$\therefore h = \sqrt[3]{\frac{3\epsilon}{2M}}$$



Derivação numérica

Erro de arredondamento

- ▶ Exemplo: $f(x) = e^x$, no ponto $x = 0 \Rightarrow M = 1$



Derivação numérica

Erro de arredondamento

- ▶ Exemplo: $f(x) = e^x$, no ponto $x = 0 \Rightarrow M = 1$
 - ▶ Precisão *double*: $\epsilon = 2^{-52}$

$$h = \sqrt[3]{\frac{3 \cdot 2^{-52}}{2}} = 0.69 \times 10^{-5}$$

→ Não adianta usar $h < 10^{-5}$, pois o erro irá aumentar



Extrapolação de Richardson

Método de segunda ordem

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(c)}{6}h^2$$



Extrapolação de Richardson

Método de segunda ordem

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(c)}{6}h^2$$

Generalizando:

$$Q \approx F(h) + kh^n, \text{ onde } n \text{ é a ordem do método}$$



Extrapolação de Richardson

Método de segunda ordem

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(c)}{6}h^2$$

Generalizando:

$$Q \approx F(h) + kh^n, \text{ onde } n \text{ é a ordem do método}$$

Objetivo

- ▶ Aumentar a ordem de aproximação usando $F(h)$



Extrapolação de Richardson

Considerando:

$$Q \approx F_n(h) + kh^n$$

- Se tomarmos $h/2$, o erro deve reduzir na razão de 2^n

$$Q - F_n(h/2) \approx \frac{1}{2^n}(Q - F_n(h))$$

$$Q - F_n(h/2) \approx \frac{Q}{2^n} - \frac{F_n(h)}{2^n}$$

$$2^n Q - 2^n F_n(h/2) \approx Q - F_n(h)$$



Extrapolação de Richardson

Considerando:

$$Q \approx F_n(h) + kh^n$$

- Se tomarmos $h/2$, o erro deve reduzir na razão de 2^n

$$Q - F_n(h/2) \approx \frac{1}{2^n}(Q - F_n(h))$$

$$Q - F_n(h/2) \approx \frac{Q}{2^n} - \frac{F_n(h)}{2^n}$$

$$2^n Q - 2^n F_n(h/2) \approx Q - F_n(h)$$

$$Q \approx \frac{2^n F_n(h/2) - F_n(h)}{2^n - 1} = F_{n+1}(h)$$



Extrapolação de Richardson

De fato:

► Se:

$$Q = F_n(h) + kh^n + O(h^{n+1})$$

► Então:

$$Q = F_n(h/2) + \frac{kh^n}{2^n} + O(h^{n+1})$$

► Logo:

$$\begin{aligned} F_{n+1} &= \frac{2^n F_n(h/2) - F_n(h)}{2^n - 1} \\ &= 2^n(Q - kh^n/2^n - O(h^{n+1})) - (Q - kh^n - O(h^{n+1})) \\ &= Q \frac{(2^n - 1)}{2^n - 1} + \frac{-kh^n + kh^n + O(h^{n+1})}{2^n - 1} \\ &= Q + O(h^{n+1}) \end{aligned}$$



Extrapolação de Richardson

Em resumo:

- ▶ Se temos:

$$Q \approx F_n(h) + kh^n$$

- ▶ Podemos avaliar com uma ordem superior:

$$Q \approx \frac{2^n F_n(h/2) - F_n(h)}{2^n - 1}$$



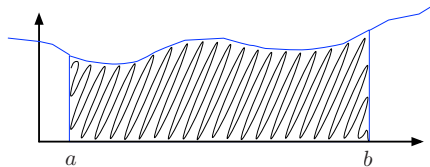
Integração Numérica



Integração Numérica

Objetivo

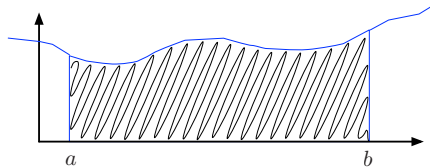
- Dada uma função $f(x)$, calcular $\int_a^b f(x)dx$



Integração Numérica

Objetivo

- ▶ Dada uma função $f(x)$, calcular $\int_a^b f(x)dx$



Métodos

- ▶ Newton-Cotes
 - ▶ Aproxima função por polinômio de grau n e calcula integral do polinômio interpolante
- ▶ Gaussiana
 - ▶ Aproxima n pontos com MMQ por polinômio de grau menor e calcula integral do polinômio

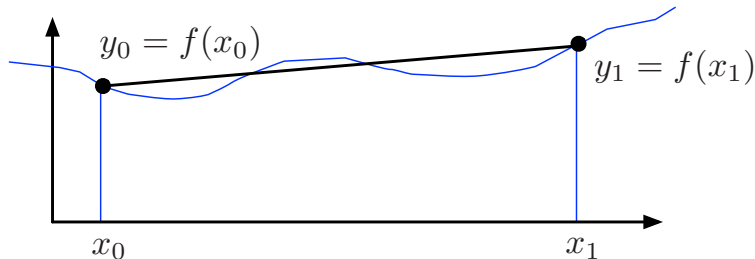


Integração Numérica

Regra do Trapézio

- ▶ Aproxima integral pela área do trapézio
 - ▶ Aproxima função por uma reta

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx \approx A = h \frac{y_0 + y_1}{2}, \text{ com } h = x_1 - x_0$$

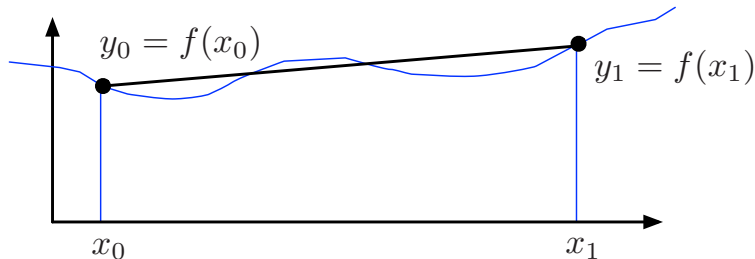


Integração Numérica

Regra do Trapézio

- ▶ Aproxima integral pela área do trapézio
 - ▶ Aproxima função por uma reta

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx \approx A = h \frac{y_0 + y_1}{2}, \text{ com } h = x_1 - x_0$$



- ▶ Qual o erro da integração?



Integração Numérica

Erro da integração

- ▶ Erro da interpolação de polinômio

$$E = f(x) - P(x)$$

- ▶ No caso de interpolação por uma reta

$$E = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!} f''(c), \quad c \in [x_0, x_1]$$

- ▶ Erro da integração

$$\int f(x) dx = \int P(x) dx + \int E(x) dx$$

$$erro = \int E(x) dx$$



Integração Numérica

Erro da integração

$$\begin{aligned} erro &= \int E(x) dx \\ &= \int \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!} f''(c) dx \\ &= \frac{1}{2!} \int (x - x_0)(x - x_1) f''(c) dx \end{aligned}$$

- Assumindo $f''(c)$ constante:

$$erro = \frac{f''(c)}{2!} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1) dx$$



Integração Numérica

Erro da integração

$$erro = \frac{f''(c)}{2!} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1) dx$$

- Fazendo $u = x - x_0$ e $h = x_1 - x_0$:

$$\begin{aligned} erro &= \frac{f''(c)}{2!} \int_0^h u(u - h) du = \int_0^h (u^2 - uh) du \\ &= \frac{f''(c)}{2!} \left[\frac{u^3}{3} - \frac{hu^2}{2} \right]_0^h \\ &= \frac{f''(c)}{2!} \frac{-1}{6} h^3 \end{aligned}$$

- Logo:

$$\int E(x) dx = -\frac{h^3}{12} f''(c)$$



Integração Numérica

Regra do Trapézio

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \frac{h}{2}(y_0 + y_1) - \frac{h^3}{12}f''(c)$$

► onde:

$$h = x_1 - x_0$$

$$c \in [x_0, x_1]$$



Integração Numérica

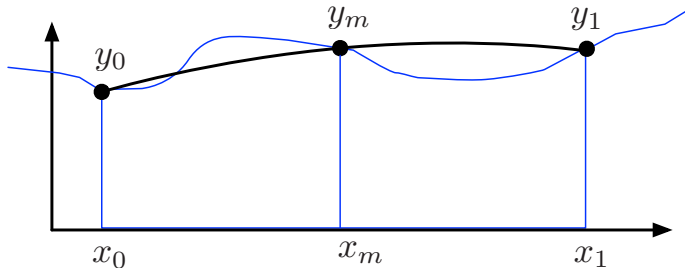
Regra de Simpson

- Aproxima função por uma parábola

$$f(x) = P(x) + E(x)$$

- Integral

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} P(x) dx + \int_{x_0}^{x_1} E(x) dx$$



Integração Numérica

Regra de Simpson

- Integrando a parábola

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx \approx \int_{x_0}^{x_1} P(x) dx = \frac{h}{6} [f(x_0) + 4f(x_m) + f(x_1)]$$

$$\text{com } x_m = \frac{x_1 + x_0}{2}, \quad h = x_1 - x_0$$

- Integrando o erro

$$\int_{x_0}^{x_1} E(x) dx = -\frac{1}{90} \left(\frac{h}{2}\right)^5 f^{iv}(c) = -\frac{h^5}{2880} f^{iv}(c)$$

$$\text{com } c \in [x_0, x_1]$$



Integração Numérica

Grau de precisão da integral

- Grau máximo k de um polinômio cuja integral é exata



Integração Numérica

Grau de precisão da integral

- ▶ Grau máximo k de um polinômio cuja integral é exata
- ▶ **Regra do Trapézio**

$$erro = -\frac{h^3}{12}f''(c)$$

- ▶ Logo, o erro é zero se $f''(c) = 0$; grau $k = 1$



Integração Numérica

Grau de precisão da integral

- ▶ Grau máximo k de um polinômio cuja integral é exata
- ▶ **Regra do Trapézio**

$$\text{erro} = -\frac{h^3}{12}f''(c)$$

- ▶ Logo, o erro é zero se $f''(c) = 0$; grau $k = 1$
- ▶ **Regra de Simpson**

$$\text{erro} = -\frac{h^5}{2880}f^{iv}(c)$$

- ▶ Logo, o erro é zero se $f^{iv}(c) = 0$; grau $k = 3$
- ▶ Solução exata para polinômio cúbico!



Integração Numérica

Grau de precisão da integral

- ▶ Grau máximo k de um polinômio cuja integral é exata
- ▶ **Regra do Trapézio**

$$erro = -\frac{h^3}{12}f''(c)$$

- ▶ Logo, o erro é zero se $f''(c) = 0$; grau $k = 1$
- ▶ **Regra de Simpson**

$$erro = -\frac{h^5}{2880}f^{iv}(c)$$

- ▶ Logo, o erro é zero se $f^{iv}(c) = 0$; grau $k = 3$
- ▶ Solução exata para polinômio cúbico!
 - ▶ Razão: uma parábola interceptando uma cúbica em 3 pontos igualmente espaçados forma a mesma integral que a cúbica



Integração Numérica

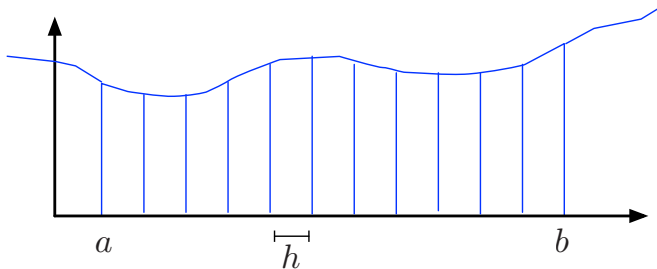
Fórmulas de Newton-Cotes compostas

- Subdivisão do intervalo de integração

$$\int_a^b f(x) dx$$

- Intervalos uniformes (n intervalos)

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b, \text{ onde } h = \frac{b-a}{n} \therefore x_{i+1} = x_i + h$$



Integração Numérica

Regra do Trapézio Composta

- Para cada intervalo:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \frac{h}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] - \frac{h^3}{12} f''(c_i)$$

- Para todo o intervalo:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{6} \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right] - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h^3}{12} f''(c_i)$$

- Como $b - a = nh$:

$$\text{Erro Total} = \frac{(b-a)h^2}{12} f''(c), \quad c \in [a, b]$$



Integração Numérica

Regra de Simpson Composta

- ▶ Para cada intervalo:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \frac{h}{6} \left[f(x_i) + 4f(x_{i+\frac{1}{2}}) + f(x_{i+1}) \right] - \frac{h^5}{2880} f^{iv}(c_i)$$

- ▶ Para todo o intervalo:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \frac{h}{2} \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 4 \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) \right] - \\ &\quad - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h^5}{2880} f^{iv}(c_i) \end{aligned}$$

- ▶ Como $b - a = nh$:

$$Erro\ Total = \frac{(b-a)h^4}{2880} f^{iv}(c), \quad c \in [a, b]$$



Integração Numérica

Métodos de Newton-Cotes abertos

- ▶ Não avaliam a função no extremo do intervalo



Integração Numérica

Métodos de Newton-Cotes abertos

- ▶ Não avaliam a função no extremo do intervalo

Regra do Ponto Médio

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = hf(x_m) + \frac{h^3}{24}f''(c), \quad x_m = x_0 + \frac{h}{2}$$

- ▶ Usa menos avaliações da função
- ▶ Reduz o erro à metade!



Integração Numérica

Métodos de Newton-Cotes abertos

- ▶ Não avaliam a função no extremo do intervalo

Regra do Ponto Médio

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = hf(x_m) + \frac{h^3}{24}f''(c), \quad x_m = x_0 + \frac{h}{2}$$

- ▶ Usa menos avaliações da função
- ▶ Reduz o erro à metade!

Regra do Ponto Médio Composta

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) - \frac{(b-a)h^2}{24}f''(c_i)$$

- ▶ Número de avaliação de $f(x)$ equivalente à Regra do Trapézio



Integração Adaptativa



Integração Adaptativa

Como garantir uma determinada precisão numérica?



Integração Adaptativa

Como garantir uma determinada precisão numérica?

- ▶ Avaliar o erro, em geral, não é viável
 - ▶ Não conhecemos derivadas de ordens maiores



Integração Adaptativa

Como garantir uma determinada precisão numérica?

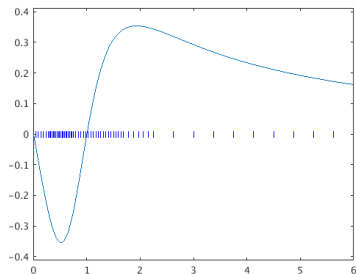
- ▶ Avaliar o erro, em geral, não é viável
 - ▶ Não conhecemos derivadas de ordens maiores
- ▶ Funções apresentam comportamentos diferentes no intervalo
 - ▶ Uso de passo de integração constante não atende
 - ▶ Existem regiões que necessitam passos pequenos
 - ▶ Existem regiões que passos maiores são suficientes



Integração Adaptativa

Como garantir uma determinada precisão numérica?

- ▶ Avaliar o erro, em geral, não é viável
 - ▶ Não conhecemos derivadas de ordens maiores
- ▶ Funções apresentam comportamentos diferentes no intervalo
 - ▶ Uso de passo de integração constante não atende
 - ▶ Existem regiões que necessitam passos pequenos
 - ▶ Existem regiões que passos maiores são suficientes



Integração Adaptativa

Regra do Trapézio

$$\int_a^b f(x)dx = T_{[a,b]} - h^3 \frac{f''(c)}{12}, \quad h = b - a$$

- Cobrindo o intervalo com 2 passos de $h/2$: $a \rightarrow m \rightarrow b$

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= T_{[a,m]} - \frac{h^3}{8} \frac{f''(c_1)}{12} + T_{[m,b]} - \frac{h^3}{8} \frac{f''(c_2)}{12} \\ &= T_{[a,m]} + T_{[m,b]} - \frac{h^3}{4} \frac{f''(c)}{12} \end{aligned}$$

- Expressando os erros com 1 e 2 passos por E_1 e E_2 , respectivamente:

$$E_1 = h^3 \frac{f''(c)}{12}; \quad E_2 = \frac{E_1}{4}$$



Integração Adaptativa

Regra do Trapézio

- Podemos então avaliar E_2 :

$$T_{[a,b]} - E_1 = T_{[a,m]} + T_{[m,b]} - \frac{E_1}{4}$$

$$E_1 - \frac{E_1}{4} = \frac{3E_1}{4} = 3E_2 = T_{[a,b]} - (T_{[a,m]} + T_{[m,b]})$$

$$\therefore E_2 = \frac{T_{[a,b]} - (T_{[a,m]} + T_{[m,b]})}{3} = \frac{\Delta}{3}$$



Integração Adaptativa

Procedimento: Regra do Trapézio Adaptativo

- ▶ Dado uma tolerância ϵ
- ▶ Toma-se um passo $h = b - a$, avaliando $T_{[a,b]}$
- ▶ Toma-se dois passos, avaliando $T_{[a,m]}$ e $T_{[m,b]}$
- ▶ Avalia erro
 - ▶ Se $\Delta/3$ for maior que ϵ
 - ▶ Refaz a integral com intervalo reduzido à metade
 - ▶ Adota tolerância também reduzida à metade
 - ▶ Senão
 - ▶ Adota $T_{[a,m]} + T_{[m,b]}$ como valor da integral



Integração Adaptativa

Procedimento: Regra do Trapézio Adaptativo

- ▶ Dado uma tolerância ϵ
- ▶ Toma-se um passo $h = b - a$, avaliando $T_{[a,b]}$
- ▶ Toma-se dois passos, avaliando $T_{[a,m]}$ e $T_{[m,b]}$
- ▶ Avalia erro
 - ▶ Se $\Delta/3$ for maior que ϵ
 - ▶ Refaz a integral com intervalo reduzido à metade
 - ▶ Adota tolerância também reduzida à metade
 - ▶ Senão
 - ▶ Adota $T_{[a,m]} + T_{[m,b]}$ como valor da integral

Na prática, adota-se como valor da integral:

$$T_{[a,m]} + T_{[m,b]} - \frac{\Delta}{3}$$

- ▶ Mas perde-se o controle numérico do erro



Integração Adaptativa

Algoritmo: Regra do Trapézio Adaptativo

- Avaliar $\int_a^b f(x)dx$ com erro menor que ϵ

TrapAdapt(a, b, f, ϵ)

$$m = \frac{a + b}{2}$$

$$T_{[a,b]} = (b - a) \frac{f(a) + f(b)}{2}$$

$$T_{[a,m]} = \dots$$

$$T_{[m,b]} = \dots$$

$$\Delta = T_{[a,b]} - (T_{[a,m]} + T_{[m,b]})$$

if $|\Delta| > 3\epsilon$

return **TrapAdapt**($a, m, f, \epsilon/2$) + **TrapAdapt**($m, b, f, \epsilon/2$)

else

$$\text{return } T_{[a,m]} + T_{[m,b]} - \frac{\Delta}{3}$$



Integração Adaptativa

Regra de Simpson Adaptativa

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{6}(y_a + 4y_{\frac{a+b}{2}} + y_b) - \underbrace{h^5 \frac{f^{iv}(c)}{2880}}_{E_1}$$

- Tomando 2 passos $h/2$, tem-se como erro:

$$E_2 = 2 \frac{h^5}{32} \frac{f^{iv}(c)}{2880} = \frac{E_1}{16}$$

- Logo:

$$\Delta = S_{[a,b]} - (S_{[a,m]} + S_{[m,b]}) = 15 \frac{E_1}{16} = 15E_2$$



Integração Adaptativa

Algoritmo: Regra de Simpson Adaptativo

- Avaliar $\int_a^b f(x)dx$ com erro menor que ϵ

SimpAdapt(a, b, f, ϵ)

$$m = \frac{a + b}{2}$$

$$\Delta = S_{[a,b]} - (S_{[a,m]} + S_{[m,b]})$$

if $|\Delta| > 15\epsilon$

return **SimpAdapt**($a, m, f, \epsilon/2$) + **SimpAdapt**($m, b, f, \epsilon/2$)

else

$$\text{return } S_{[a,m]} + S_{[m,b]} - \frac{\Delta}{15}$$



Quadratura de Gauss



Integração Numérica

Grau de precisão das fórmulas Newton-Cotes

- ▶ Polinômio de grau n
 - ▶ Fazendo $n + 1$ avaliações de $f(x)$ em intervalos regulares

$$\text{Precisão} \begin{cases} n, & \text{se } n \text{ for ímpar (ex. trapézio)} \\ n + 1, & \text{se } n \text{ for par (ex. Simpson)} \end{cases}$$



Integração Numérica

Grau de precisão das fórmulas Newton-Cotes

- ▶ Polinômio de grau n
 - ▶ Fazendo $n + 1$ avaliações de $f(x)$ em intervalos regulares

$$\text{Precisão} \begin{cases} n, & \text{se } n \text{ for ímpar (ex. trapézio)} \\ n + 1, & \text{se } n \text{ for par (ex. Simpson)} \end{cases}$$

Podemos ganhar precisão com espaçamento não regular?



Integração Numérica

Quadratura de Gauss

- ▶ Avaliações de $f(x)$: $n + 1$
 - ▶ Amostras não regularmente espaçadas
- ▶ Precisão: $2n + 1$

Função aproximada por interpolação de Lagrange

$$f(x) \approx \sum L_i(x) f(x_i)$$

$$L_i(x) = \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_{n-1})}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_{n-1})}$$



Integração Numérica

Quadratura de Gauss

- Considerando a integral no intervalo $[-1, 1]$

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \int_{-1}^1 \sum L_i(x) f(x_i) dx$$

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum c_i f(x_i)$$

$$\text{onde: } c_i = \int_{-1}^1 L_i(x) dx$$

- Amostras como raízes dos **Polinômios de Legrange**
 - Explorar ortogonalidade de funções
 - Ganho de precisão



Integração Numérica

Coeficientes da Quadratura de Gauss

- ▶ Intervalo de integração $[-1, 1]$

n	raízes x_i	coeficientes c_i
2	$-\sqrt{\frac{1}{3}} \approx -0.57735$ $+\sqrt{\frac{1}{3}} \approx +0.57735$	 1 1
3	$-\sqrt{\frac{3}{5}} \approx -0.77460$ 0 $+\sqrt{\frac{3}{5}} \approx +0.77460$	$\frac{5}{9} \approx 0.55555$ $\frac{8}{9} \approx 0.88889$ $\frac{5}{9} \approx 0.55555$
4	$-\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}} \approx -0.86114$ $-\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}} \approx -0.33998$ $+\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}} \approx +0.33998$ $+\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}} \approx +0.86114$	$\frac{90-5\sqrt{30}}{180} \approx 0.34785$ $\frac{90+5\sqrt{30}}{180} \approx 0.65215$ $\frac{90+5\sqrt{30}}{180} \approx 0.65215$ $\frac{90-5\sqrt{30}}{180} \approx 0.34875$



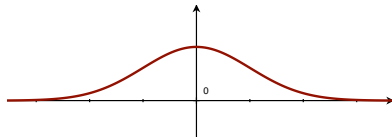
Integração Numérica

Quadratura de Gauss

► Exemplo

$$\int_{-1}^1 e^{-\frac{x^2}{2}} dx$$

- Valor exato:
1.71124878...

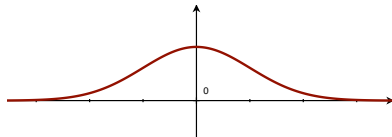


Integração Numérica

Quadratura de Gauss

► Exemplo

$$\int_{-1}^1 e^{-\frac{x^2}{2}} dx$$



► Valor exato:
1.71124878...

► Para $n = 2$

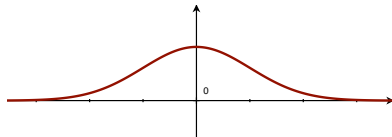
$$\approx 1f(-\sqrt{1/3}) + 1f(\sqrt{1/3}) = 1.69296$$

Integração Numérica

Quadratura de Gauss

► Exemplo

$$\int_{-1}^1 e^{-\frac{x^2}{2}} dx$$



► Valor exato:
1.71124878...

► Para $n = 2$

$$\approx 1f(-\sqrt{1/3}) + 1f(\sqrt{1/3}) = 1.69296$$

► Para $n = 4$

$$\approx 1.7112245$$



Integração Numérica

Quadratura de Gauss

- Mudança de intervalo

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}\right) \frac{b-a}{2}dt$$



Integração Numérica

Quadratura de Gauss

► Mudança de intervalo

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}\right) \frac{b-a}{2}dt$$

Exemplo:

$$\int_1^2 \log_e x dx$$



Integração Numérica

Quadratura de Gauss

► Mudança de intervalo

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}\right) \frac{b-a}{2}dt$$

Exemplo:

$$\begin{aligned} & \int_1^2 \log_e x dx \\ &= \int_{-1}^1 \log_e \frac{t+3}{2} \frac{1}{2} dt \end{aligned}$$



Integração Numérica

Quadratura de Gauss

- Mudança de intervalo

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}\right) \frac{b-a}{2} dt$$

Exemplo:

$$\begin{aligned} \int_1^2 \log_e x dx \\ = \int_{-1}^1 \log_e \frac{t+3}{2} \frac{1}{2} dt \end{aligned}$$

- Solução para $n = 4$: 0.386294497
- Valor exato: 0.386294361

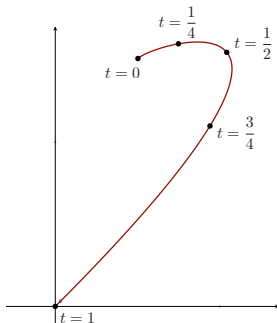


Integração Numérica

Aplicação: Controle de Movimento ao longo de um Caminho

- Considere um caminho descrito por uma curva cúbica paramétrica (Bézier Spline)

$$P = \begin{cases} x(t) = 0.5 + 0.3t + 3.9t^2 - 4.7t^3 \\ y(t) = 1.5 + 0.3t + 0.9t^2 - 2.7t^3 \end{cases}$$



- Espaçamento igual no espaço paramétrico não implica em espaçamento igual em comprimento de arco



Integração Numérica

Aplicação: Controle de Movimento ao longo de um Caminho

- ▶ Objetivo: Dividir o caminho em n comprimentos iguais
 - ▶ Movimento em velocidade constante ao longo do caminho



Integração Numérica

Aplicação: Controle de Movimento ao longo de um Caminho

- ▶ Objetivo: Dividir o caminho em n comprimentos iguais
 - ▶ Movimento em velocidade constante ao longo do caminho
- ▶ Do cálculo, comprimento de arco é dado por:

$$\int_{t_1}^{t_2} \sqrt{x'(t)^2 + y'(t)^2} dt$$

- ▶ Em geral, sem solução analítica fechada



Integração Numérica

Aplicação: Controle de Movimento ao longo de um Caminho

- ▶ Objetivo: Dividir o caminho em n comprimentos iguais
 - ▶ Movimento em velocidade constante ao longo do caminho
- ▶ Do cálculo, comprimento de arco é dado por:

$$\int_{t_1}^{t_2} \sqrt{x'(t)^2 + y'(t)^2} dt$$

- ▶ Em geral, sem solução analítica fechada

Solução: Expressar P em função do comprimento de arco

- ▶ Achar função $P^*(s)$
 - ▶ Dado s , determinar t
 - ▶ Determinação de raiz de $f(t)$ (ex. Método da Bisseção):

$$f(t) = s - \int_0^t \sqrt{x'(u)^2 + y'(u)^2} du$$

- ▶ Uso de Quadratura de Gauss para avaliar integral



Exercícios propostos

1. Usando a Série de Taylor, deduza a fórmula para avaliação da derivada numérica de segunda ordem f'' . Qual o erro associado?
2. Usando o Método do Trapézio, calcule o valor da integral abaixo considerando dois passos de integração:

$$\int_0^1 \frac{x^3}{x^2 + 1} dx$$

3. Reavalie a integral acima considerando um único passo de integração. Use esse valor para, usando o próprio método, estimar o erro da avaliação do item anterior.

