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:

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

Derivação Numérica

Derivada analítica:

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

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:

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

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:

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

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

Derivação Numérica

- Se h for pequeno:

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

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

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:

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

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

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 $h \to 0$, $f''(c) \to f''(x)$ 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

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

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:

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

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:

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

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

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

Derivação numérica

Erro de arrendondamento

- Estamos subtraindo dois números muito próximos

Derivação numérica

Erro de arrendondamento

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

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

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

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

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

- 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 arrendondamento

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

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

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

Derivação numérica

Erro de arrendondamento

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

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

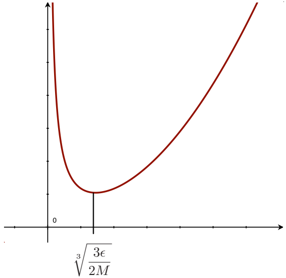
$$E(h) = \frac{h^2}{6} f'''(c) + \frac{\epsilon_{maq}}{2h}$$

Determinando ponto de mínimo:

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

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

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



Derivação numérica

Erro de arrendondamento

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

Derivação numérica

Erro de arrendondamento

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

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

$\longrightarrow$ 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:

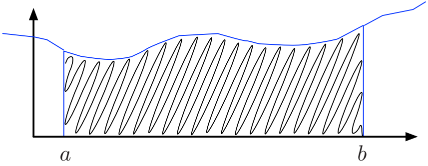
$$Q \approx \frac{2^n F_n(h/2) - F_n(h)}{2^n - 1}$$

Integração Numérica

Integração Numérica

Objetivo

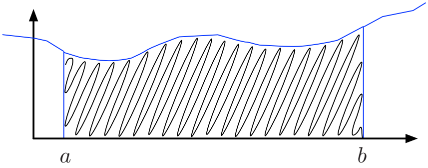
- Dada uma função $f(x)$, calcular $\int_a^b f(x)dx$



Integração Numérica

Objetivo

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



Métodos

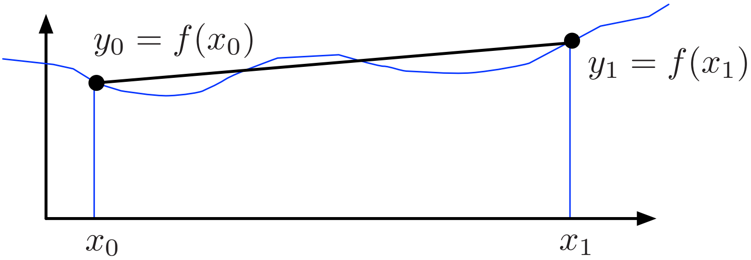
- Newton-Cotes
  - Aproxima função por polinômio de grau n e calcula integral do polinômio interpolante
- Gaussiana
  - Aproxima n pontos com MMQ por polinômio de grau menor e calcula integral do polinômio

Integração Numérica

Regra do Trapézio

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

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

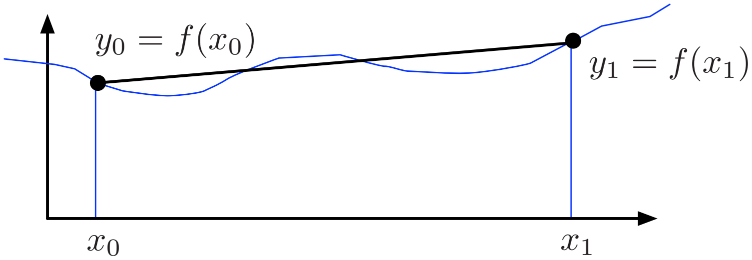


Integração Numérica

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:

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

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

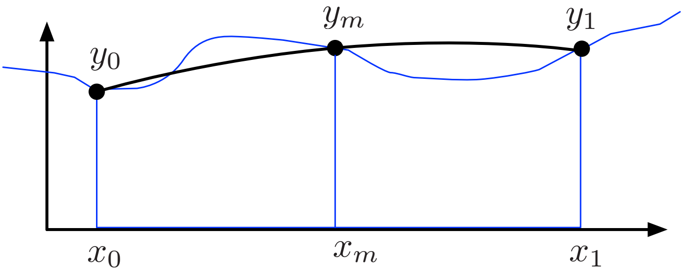
Regra de Simpson

- 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

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

$$\text{com } x_m = \frac{x_1 + x_2}{2}, \quad h = x_1 - x_0$$

- 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**

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

  - 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!

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

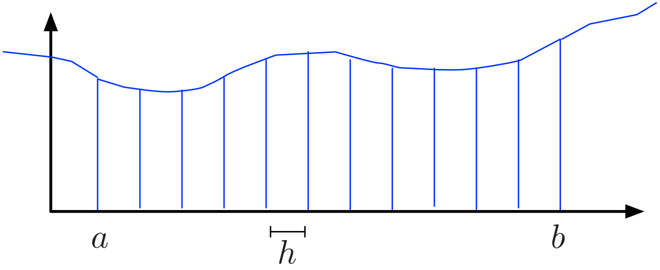
Fórmulas de Newton-Cotes compostas

- Subdivisão do intervalo de integração

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

  - Intervalos uniformes (n intevalos)

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



Integração Numérica

Regra do Trapézio Composta

- Para cada intervalo:

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

- Para todo o intevalo:

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

  - Como $b - a = nh$:

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

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 intevalo:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{6}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 4\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}})\right] -$$

$$- \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h^5}{2880} f^{iv}(c_i)$$

  - 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

Recordando

- **Regra do Trapézio**

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

- **Regra de Simpson**

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

Integração Adaptativa

Como garantir uma determinada precisão numérica?

Integração Adaptativa

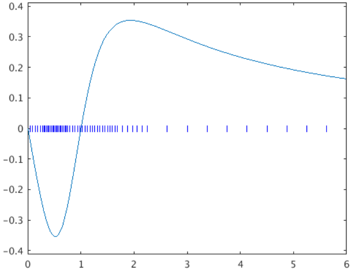
Como garantir uma determinada precisão numérica?

- 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

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 $h/2$: $a \to m \to b$

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

  - 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:

$$
\begin{aligned}
T_{[a,b]} - E_1 &= T_{[a,m]} + T_{[m,b]} - \frac{E_1}{4} \\
E_1 - \frac{E_1}{4} &= \frac{3E_1}{4} = 3E_2 = T_{[a,b]} - (T_{[a,m]} + T_{[m,b]}) \\
\therefore E_2 &= \frac{T_{[a,b]} - (T_{[a,m]} + T_{[m,b]})}{3} = \frac{\Delta}{3}
\end{aligned}
$$

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)

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

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

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

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

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

if $|\Delta| > 3\epsilon$

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

else

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

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$(a, m, f, \epsilon/\mathbf{2})$ $+$ **SimpAdapt**$(m, b, f, \epsilon/\mathbf{2})$

else

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

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

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

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

Integração Numérica

Quadratura de Gauss

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

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

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

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

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

Integração Numérica

Coeficientes da Quadratura de Gauss

- Intervalo de integração $[-1, 1]$

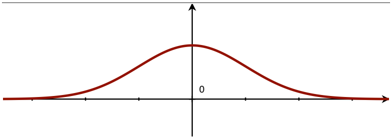
n	raízes xi	coeficientes ci
2	$-\sqrt{\frac{1}{3}} \approx -0.57735$	1
	$+\sqrt{\frac{1}{3}} \approx +0.57735$	1
3	$-\sqrt{\frac{3}{5}} \approx -0.77460$	$\frac{5}{9} \approx 0.55555$
	0	$\frac{8}{9} \approx 0.88889$
	$+\sqrt{\frac{3}{5}} \approx +0.77460$	$\frac{5}{9} \approx 0.55555$
4	$-\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}}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

Integração Numérica

Quadratura de Gauss

- Exemplo

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



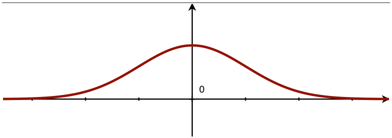
  - Valor exato: 1.71124878...

Integração Numérica

Quadratura de Gauss

- Exemplo

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



  - Valor exato: 1.71124878...
- Para $n = 2$

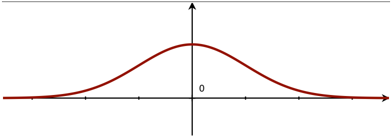
$$\approx 1f(-\sqrt{1/3}) + 1f(\sqrt{1/3}) = 1.69296$$

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:

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

$$= \int_{-1}^{1} \log_e\left(\frac{t+3}{2}\right)\frac{1}{2}dt$$

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:

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

$$= \int_{-1}^{1} \log_e\left(\frac{t+3}{2}\right)\frac{1}{2}dt$$

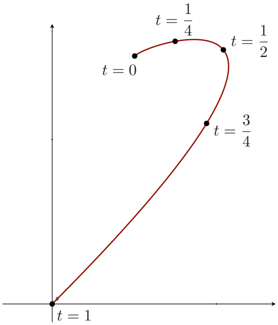
- Solução para $n = 4$: 0.386294497
- Valor exato: 0.386294361

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.