Diferenciação e Integração

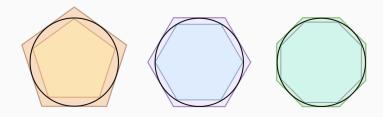
Cálculo Numérico

Bóris Marin

UFABC

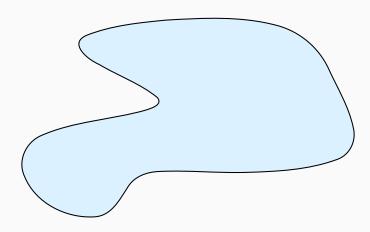


Área do círculo: Arquimedes

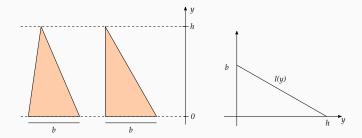


https://www.geogebra.org/m/Q3eP6x4R

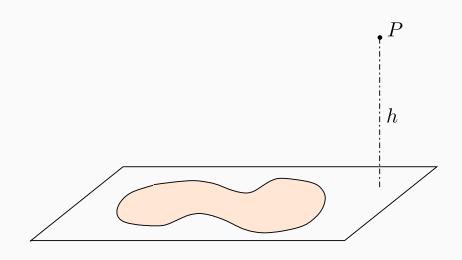


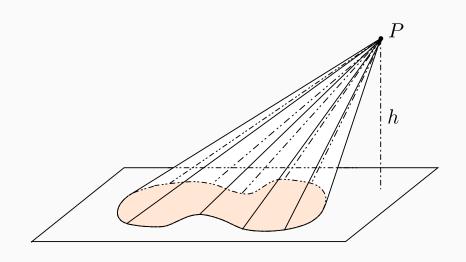


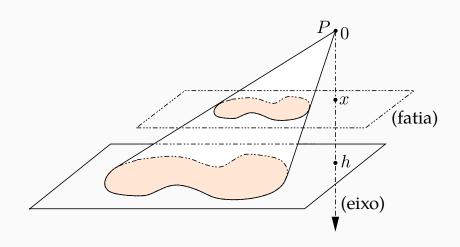
• Qual a área de uma figura arbitrária? Ou uma "ilha"?

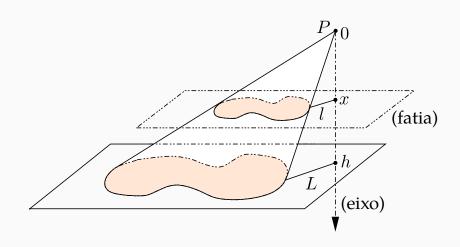


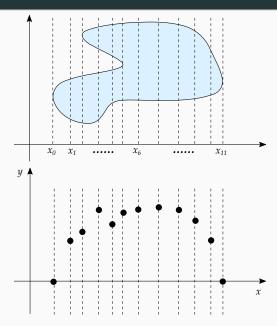
 Princípio de Cavalieri: "dados dois conjuntos A e B, se houver uma linha L tal que toda perpendicular a L cruze A e B em intervalos de tamanhos iguais, então A e B têm a mesma área."











Para que tudo isso? o TFC nos diz que, para calcular

$$\int_{a}^{b} f(x) \, \mathrm{d}x$$

Para que tudo isso? o TFC nos diz que, para calcular

$$\int_{a}^{b} f(x) \, \mathrm{d}x$$

■ basta encontrar F(x) tal que F'(x) = f(x), e fazer

$$\int_a^b f(x) \, \mathrm{d}x = F(b) - F(a)$$

Para que tudo isso? o TFC nos diz que, para calcular

$$\int_{a}^{b} f(x) \, \mathrm{d}x$$

• basta encontrar F(x) tal que F'(x) = f(x), e fazer

$$\int_a^b f(x) \, \mathrm{d}x = F(b) - F(a)$$

Nem todas as funções (na verdade, quase nenhuma), podem ser expressas como uma "fórmula" (combinações de funções elementares tipo $-(3+2\cos(x))$)

Para que tudo isso? o TFC nos diz que, para calcular

$$\int_{a}^{b} f(x) \, \mathrm{d}x$$

• basta encontrar F(x) tal que F'(x) = f(x), e fazer

$$\int_a^b f(x) \, \mathrm{d}x = F(b) - F(a)$$

- Nem todas as funções (na verdade, quase nenhuma), podem ser expressas como uma "fórmula" (combinações de funções elementares tipo $-(3+2\cos(x))$)
- Mas são justamente essas que sabemos derivar/antiderivar!

Para que tudo isso? o TFC nos diz que, para calcular

$$\int_{a}^{b} f(x) \, \mathrm{d}x$$

• basta encontrar F(x) tal que F'(x) = f(x), e fazer

$$\int_a^b f(x) \, \mathrm{d}x = F(b) - F(a)$$

- Nem todas as funções (na verdade, quase nenhuma), podem ser expressas como uma "fórmula" (combinações de funções elementares tipo $-(3 + 2\cos(x))$)
- Mas são justamente essas que sabemos derivar/antiderivar!
- Mesmo nos atendo a este tipo de função, nem todas admitem primitivas em termos de combinações finitas de funções elementares.

Diferenciação Numérica

 Há duas maneiras de fazer Cálculo no computador: numericamente e simbolicamente. Focaremos mais na primeira.

- Há duas maneiras de fazer Cálculo no computador: numericamente e simbolicamente. Focaremos mais na primeira.
- Computação simbólica está mais alinhada com os métodos "elementares" do Cálculo: dada f(x) em termos de combinações de funções elementares, seguimos regras (cadeia, produto etc) básicas e chegamos à derivada.

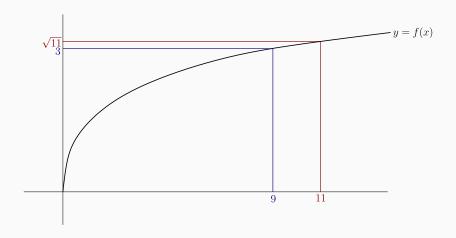
- Há duas maneiras de fazer Cálculo no computador: numericamente e simbolicamente. Focaremos mais na primeira.
- Computação simbólica está mais alinhada com os métodos "elementares" do Cálculo: dada f(x) em termos de combinações de funções elementares, seguimos regras (cadeia, produto etc) básicas e chegamos à derivada.
- O mesmo vale para integrais (no caso em que há primitiva elementar): basta que o computador siga as "regras básicas".

- Há duas maneiras de fazer Cálculo no computador:
 numericamente e simbolicamente. Focaremos mais na primeira.
- Computação simbólica está mais alinhada com os métodos "elementares" do Cálculo: dada f(x) em termos de combinações de funções elementares, seguimos regras (cadeia, produto etc) básicas e chegamos à derivada.
- O mesmo vale para integrais (no caso em que há primitiva elementar): basta que o computador siga as "regras básicas".
- Na prática, funções são comumente dadas / medidas como uma conjunto tabulado de pontos (p. ex. lista de pares {(t₁, T₁),...,(t_n, T_N)} tempo/Temperatura)

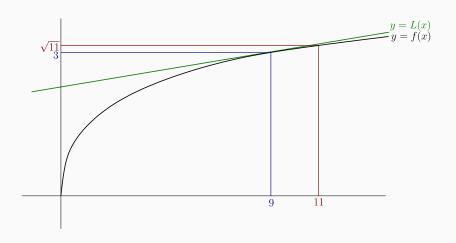
- Há duas maneiras de fazer Cálculo no computador: numericamente e simbolicamente. Focaremos mais na primeira.
- Computação simbólica está mais alinhada com os métodos "elementares" do Cálculo: dada f(x) em termos de combinações de funções elementares, seguimos regras (cadeia, produto etc) básicas e chegamos à derivada.
- O mesmo vale para integrais (no caso em que há primitiva elementar): basta que o computador siga as "regras básicas".
- Na prática, funções são comumente dadas / medidas como uma conjunto tabulado de pontos (p. ex. lista de pares {(t₁, T₁),...,(t_n, T_N)} tempo/Temperatura)
- Neste caso, não é possível utilizar métodos simbólicos

Recapitulando: Polinômios de Taylor

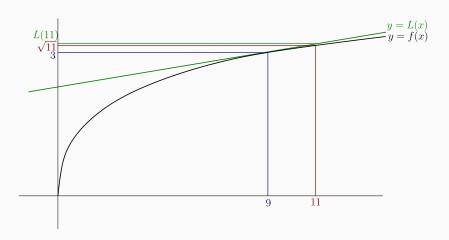
Linearização

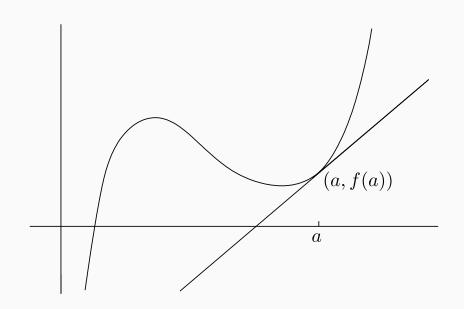


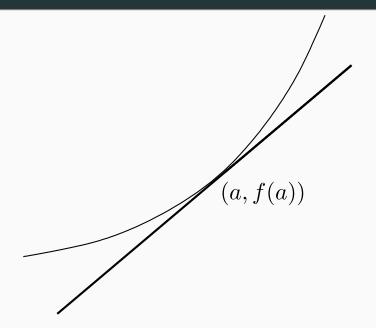
Linearização

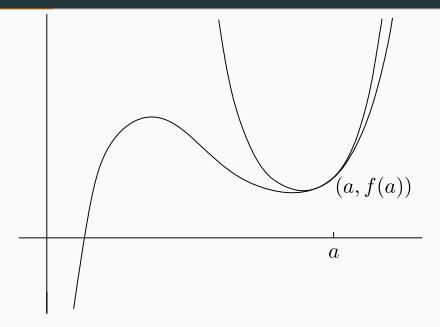


Linearização









• Por que paramos em aproximações lineares?

- Por que paramos em aproximações lineares?
- Podemos seguir o mesmo raciocínio que utilizamos no caso linear, mas tentar uma aproximação quadrática.

- Por que paramos em aproximações lineares?
- Podemos seguir o mesmo raciocínio que utilizamos no caso linear, mas tentar uma aproximação quadrática.
- Tínhamos a reta tangente a f em a, y = f(a) + f'(a)(x a).
 O polinômio quadrático que melhor aproxima f nas proximidades de a é

$$y = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2}(x - a)^2$$

- Por que paramos em aproximações lineares?
- Podemos seguir o mesmo raciocínio que utilizamos no caso linear, mas tentar uma aproximação quadrática.
- Tínhamos a reta tangente a f em a, y = f(a) + f'(a)(x a).
 O polinômio quadrático que melhor aproxima f nas proximidades de a é

$$y = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2}(x - a)^2$$

• Chamamos esta aproximação de $P_2(x)$

$$P_2(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2}(x - a)^2$$

$$P_2(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2}(x - a)^2$$

• Note que, em x = a, temos $P_2(a) = f(a)$

$$P_2(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2}(x - a)^2$$

- Note que, em x = a, temos $P_2(a) = f(a)$
- O mesmo ocorre para P':

$$P'_2(x) = f'(x) + f''(x)(x - a) \implies P'_2(a) = f'(a)$$

$$P_2(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2}(x - a)^2$$

- Note que, em x = a, temos $P_2(a) = f(a)$
- O mesmo ocorre para P': $P'_2(x) = f'(x) + f''(x)(x - a) \implies P'_2(a) = f'(a)$
- O mesmo ocorre para P'': $P_2''(a) = f''(a)$

$$P_2(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2}(x - a)^2$$

- Note que, em x = a, temos $P_2(a) = f(a)$
- O mesmo ocorre para P': $P'_2(x) = f'(x) + f''(x)(x - a) \implies P'_2(a) = f'(a)$
- O mesmo ocorre para P'': $P_2''(a) = f''(a)$
- Ou seja, estamos tomando uma quadrática com mesma inclinação e concavidade do que f em x = a

$$P_2(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2}(x - a)^2$$

- Note que, em x = a, temos $P_2(a) = f(a)$
- O mesmo ocorre para P': $P'_2(x) = f'(x) + f''(x)(x - a) \implies P'_2(a) = f'(a)$
- O mesmo ocorre para P'': $P_2''(a) = f''(a)$
- Ou seja, estamos tomando uma quadrática com mesma inclinação e concavidade do que f em x = a
- A partir daí, todas as outras derivadas são nulas (f"(a) é constante)

• Por que então não fazer um polinômio de grau N>2?

- Por que então não fazer um polinômio de grau N > 2?
- Os Polinômios de Taylor nos dão exatamente isso:

$$P_N(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \dots + \frac{f^{(N)}(a)}{N!}(x-a)^N$$

- Por que então não fazer um polinômio de grau N > 2?
- Os Polinômios de Taylor nos dão exatamente isso:

$$P_N(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \dots + \frac{f^{(N)}(a)}{N!}(x-a)^N$$

Ou, de forma mais compacta

$$P_N(x) = \sum_{n=0}^N \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x-a)^n$$

 Outra forma comum (e mais apropriada para nosso contexto) é expressá-los como

$$f(x+h) \approx \sum_{n=0}^{N} \frac{f^{(n)}(x)}{n!} h^{n}$$

 Outra forma comum (e mais apropriada para nosso contexto) é expressá-los como

$$f(x+h) \approx \sum_{n=0}^{N} \frac{f^{(n)}(x)}{n!} h^{n}$$

• Neste caso, como fica f(x - h)?



Diferenciação numérica: Diferenças Finitas

Definição de derivada

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

Diferenciação numérica: Diferenças Finitas

Definição de derivada

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

 Pelo teorema de Taylor, se f for diferenciável ao menos duas vezes

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(c)$$
 (c entre x e x + h)

Diferenciação numérica: Diferenças Finitas

Definição de derivada

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

 Pelo teorema de Taylor, se f for diferenciável ao menos duas vezes

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(c)$$
 (c entre x e x + h)

 Isso implica a fórmula de diferença posterior de dois pontos

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

 Numa aproximação finita, não é possível calcular o limite na definição de derivada

- Numa aproximação finita, não é possível calcular o limite na definição de derivada
- Mas a fórmula de diferença posterior nos diz que, para h pequeno, temos uma boa aproximação:

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

- Numa aproximação finita, não é possível calcular o limite na definição de derivada
- Mas a fórmula de diferença posterior nos diz que, para h pequeno, temos uma boa aproximação:

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

■ E o segundo termo da expansão de Taylor $(\frac{h}{2}f''(c))$ é tratado como um erro.

- Numa aproximação finita, não é possível calcular o limite na definição de derivada
- Mas a fórmula de diferença posterior nos diz que, para h pequeno, temos uma boa aproximação:

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

- E o segundo termo da expansão de Taylor $(\frac{h}{2}f''(c))$ é tratado como um erro.
- Como o erro é proporcional a h, podemos torná-lo menor diminuindo h. Este método é dito de primeira ordem em h.

- Numa aproximação finita, não é possível calcular o limite na definição de derivada
- Mas a fórmula de diferença posterior nos diz que, para h pequeno, temos uma boa aproximação:

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

- E o segundo termo da expansão de Taylor $(\frac{h}{2}f''(c))$ é tratado como um erro.
- Como o erro é proporcional a h, podemos torná-lo menor diminuindo h. Este método é dito de primeira ordem em h.
- Se o erro é $\mathcal{O}(h^n)$, temos uma aproximação de **ordem** n

■ Exemplo: vamos aproximar a derivada de f(x) = 1/x em x = 2, usando h = 0.1:

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

Exemplo: vamos aproximar a derivada de f(x) = 1/x em x = 2, usando h = 0.1:

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

 A diferença entre esta aproximação e o valor "verdadeiro" é o erro

$$-0.2381 - (-0.25) = 0.0119$$

Exemplo: vamos aproximar a derivada de f(x) = 1/x em x = 2, usando h = 0.1:

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

 A diferença entre esta aproximação e o valor "verdadeiro" é o erro

$$-0.2381 - (-0.25) = 0.0119$$

• O erro previsto pela fórmula de diferença posterior é $\frac{h}{2}f''(c)$, com $2 \le c \le 2.1$. Sendo $f''(x) = 2x^{-3}$, o erro está entre

$$(0.1)^{-3} \approx 0.0125$$
 e $(0.1)(2.1)^{-3} \approx 0.0108$

Exemplo: vamos aproximar a derivada de f(x) = 1/x em x = 2, usando h = 0.1:

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

 A diferença entre esta aproximação e o valor "verdadeiro" é o erro

$$-0.2381 - (-0.25) = 0.0119$$

• O erro previsto pela fórmula de diferença posterior é $\frac{h}{2}f''(c)$, com $2 \le c \le 2.1$. Sendo $f''(x) = 2x^{-3}$, o erro está entre

$$(0.1)^{-3} \approx 0.0125$$
 e $(0.1)(2.1)^{-3} \approx 0.0108$

o que é consistente com o valor obtido.

Exemplo: vamos aproximar a derivada de f(x) = 1/x em x = 2, usando h = 0.1:

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

 A diferença entre esta aproximação e o valor "verdadeiro" é o erro

$$-0.2381 - (-0.25) = 0.0119$$

• O erro previsto pela fórmula de diferença posterior é $\frac{h}{2}f''(c)$, com $2 \le c \le 2.1$. Sendo $f''(x) = 2x^{-3}$, o erro está entre

$$(0.1)^{-3} \approx 0.0125$$
 e $(0.1)(2.1)^{-3} \approx 0.0108$

- o que é consistente com o valor obtido.
- Infelizmente, esta informação não costuma estar disponível...

• Como obter métodos de segunda ordem?

- Como obter métodos de segunda ordem?
- Indo além na expansão de Taylor: se f for diferenciável ao menos três vezes:

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

- Como obter métodos de segunda ordem?
- Indo além na expansão de Taylor: se f for diferenciável ao menos três vezes:

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

assim como

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

- Como obter métodos de segunda ordem?
- Indo além na expansão de Taylor: se f for diferenciável ao menos três vezes:

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

assim como

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

• lembrando que $x - h < c_2 < x < c_1 < x + h$

Subtraindo as duas equações anteriores, temos

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

Subtraindo as duas equações anteriores, temos

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

O TVI nos permite juntar os termos de erro, de modo que temos a fórmula de diferença central de três pontos:

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

■ Exemplo: vamos aproximar a derivada de f(x) = 1/x em x = 2, usando h = 0.1 e a diferença central de 3 pontos:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = \frac{\frac{1}{2.1} - \frac{1}{1.9}}{0.2} \approx -0.2506$$

Exemplo: vamos aproximar a derivada de f(x) = 1/x em x = 2, usando h = 0.1 e a diferença central de 3 pontos:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = \frac{\frac{1}{2.1} - \frac{1}{1.9}}{0.2} \approx -0.2506$$

• Erro: diferença entre esta aproximação e o valor "verdadeiro":

$$-0.206 - (-0.25) = 0.0006$$

■ Exemplo: vamos aproximar a derivada de f(x) = 1/x em x = 2, usando h = 0.1 e a diferença central de 3 pontos:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = \frac{\frac{1}{2.1} - \frac{1}{1.9}}{0.2} \approx -0.2506$$

• Erro: diferença entre esta aproximação e o valor "verdadeiro":

$$-0.206 - (-0.25) = 0.0006$$

 que é menor do que o o erro (0.0119) obtido por diferença posterior de 2 pontos

• Como fazemos para aproximar a segunda derivada f''(x)?

- Como fazemos para aproximar a segunda derivada f''(x)?
- Não muda quase nada. Usamos

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(c_1)$$

- Como fazemos para aproximar a segunda derivada f''(x)?
- Não muda quase nada. Usamos

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(c_1)$$

assim como

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(c_2)$$

- Como fazemos para aproximar a segunda derivada f''(x)?
- Não muda quase nada. Usamos

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(c_1)$$

assim como

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(c_2)$$

Somando as equações para eliminar a 1a. derivada, temos:

$$f(x+h)+f(x-h)-2f(x)=h^2f''(x)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(c_1)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(c_2)$$

- Como fazemos para aproximar a segunda derivada f''(x)?
- Não muda quase nada. Usamos

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(c_1)$$

assim como

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(c_2)$$

Somando as equações para eliminar a 1a. derivada, temos:

$$f(x+h)+f(x-h)-2f(x) = h^2f''(x)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(c_1)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(c_2)$$

• sendo que $x - h < c_2 < x < c_1 < x + h$

■ Dividindo por h^2 e juntado termos em c_1, c_2 , temos a fórmula de diferença central de três pontos para a segunda derivada:

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

Diferenças Finitas: Derivadas superiores

■ Dividindo por h^2 e juntado termos em c_1, c_2 , temos a fórmula de diferença central de três pontos para a segunda derivada:

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

• para algum c entre x - h e x + h.

 Notemos que estamos quebrando uma regra importante: não subtrair dois números muito próximos

- Notemos que estamos quebrando uma regra importante: não subtrair dois números muito próximos
- Para derivação, isso não pode ser evitado: é um problema inerentemente instável.

- Notemos que estamos quebrando uma regra importante: não subtrair dois números muito próximos
- Para derivação, isso não pode ser evitado: é um problema inerentemente instável.
- Ou seja, estaremos sempre sujeitos a erros de arredondamento ao utilizar diferenciação numérica.

• Exemplo: aproxime a derivada de $f(x) = e^x$ em x = 0.

- Exemplo: aproxime a derivada de $f(x) = e^x$ em x = 0.
- A fórmula de dois pontos nos dá

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

- Exemplo: aproxime a derivada de $f(x) = e^x$ em x = 0.
- A fórmula de dois pontos nos dá

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

• equanto que a a fórmula de três pontos nos dá

$$f'(x) \approx \frac{e^{x+h} - e^{x-h}}{2h}$$

h	dois pontos	erro	três pontos	erro
10^{-1}	1.05170918075648	-0.05170918075648	1.00166750019844	-0.00166750019844
10^{-2}	1.00501670841679	-0.00501670841679	1.00001666674999	-0.00001666674999
10^{-3}	1.00050016670838	-0.00050016670838	1.00000016666668	-0.00000016666668
10^{-4}	1.00005000166714	-0.00005000166714	1.0000000166689	-0.0000000166689
10^{-5}	1.00000500000696	-0.00000500000696	1.0000000001210	-0.00000000001210
10^{-6}	1.00000049996218	-0.00000049996218	0.9999999997324	0.00000000002676
10^{-7}	1.00000004943368	-0.00000004943368	0.9999999947364	0.00000000052636
10^{-8}	0.99999999392253	0.00000000607747	0.99999999392253	0.00000000607747
10-9	1.00000008274037	-0.00000008274037	1.00000002722922	-0.00000002722922

h	dois pontos	erro	três pontos	erro
10^{-5}	1.00000500000696	-0.00000500000696	1.0000000001210	-0.00000000001210
10^{-6}	1.00000049996218	-0.00000049996218	0.9999999997324	0.00000000002676
10^{-7}	1.00000004943368	-0.00000004943368	0.9999999947364	0.00000000052636
10^{-8}	0.99999999392253	0.00000000607747	0.99999999392253	0.00000000607747
10^{-9}	1.00000008274037	-0.00000008274037	1.00000002722922	-0.00000002722922

■ Inicialmente, o erro decresce conforme esperado: $\mathcal{O}(h)$ e $\mathcal{O}(h^2)$

h	dois pontos	erro	três pontos	erro
10^{-5}	1.00000500000696	-0.00000500000696	1.00000000001210	-0.00000000001210
10^{-6}	1.00000049996218	-0.00000049996218	0.9999999997324	0.00000000002676
10^{-7}	1.00000004943368	-0.00000004943368	0.9999999947364	0.00000000052636
10^{-8}	0.99999999392253	0.00000000607747	0.99999999392253	0.00000000607747
10^{-9}	1.00000008274037	-0.00000008274037	1.00000002722922	-0.00000002722922

- Inicialmente, o erro decresce conforme esperado: $\mathcal{O}(h)$ e $\mathcal{O}(h^2)$
- Para h muito pequeno, entretanto, a aproximação piora

h	dois pontos	erro	três pontos	erro
10^{-5}	1.00000500000696	-0.00000500000696	1.00000000001210	-0.00000000001210
10^{-6}	1.00000049996218	-0.00000049996218	0.9999999997324	0.00000000002676
10^{-7}	1.00000004943368	-0.00000004943368	0.9999999947364	0.00000000052636
10^{-8}	0.99999999392253	0.00000000607747	0.99999999392253	0.00000000607747
10^{-9}	1.00000008274037	-0.00000008274037	1.00000002722922	-0.00000002722922

- Inicialmente, o erro decresce conforme esperado: $\mathcal{O}(h)$ e $\mathcal{O}(h^2)$
- Para h muito pequeno, entretanto, a aproximação piora
- Ambas as fórmulas subtraem números próximos, perdendo algarismos significativos.

h	dois pontos	erro	três pontos	erro
10^{-5}	1.00000500000696	-0.00000500000696	1.00000000001210	-0.00000000001210
10^{-6}	1.00000049996218	-0.00000049996218	0.9999999997324	0.00000000002676
10^{-7}	1.00000004943368	-0.00000004943368	0.9999999947364	0.00000000052636
10^{-8}	0.99999999392253	0.00000000607747	0.99999999392253	0.00000000607747
10^{-9}	1.00000008274037	-0.00000008274037	1.00000002722922	-0.00000002722922

- Inicialmente, o erro decresce conforme esperado: $\mathcal{O}(h)$ e $\mathcal{O}(h^2)$
- Para h muito pequeno, entretanto, a aproximação piora
- Ambas as fórmulas subtraem números próximos, perdendo algarismos significativos.
- Para piorar, dividem por um número pequeno, amplificando o efeito.

• Seja $\hat{f}(x+h)$ a representação em ponto flutuante de f(x+h)

- Seja $\hat{f}(x+h)$ a representação em ponto flutuante de f(x+h)
- Lembrando: o erro relativo para PF é da ordem de $\epsilon_{\rm m\acute{a}q}$

- Seja $\hat{f}(x+h)$ a representação em ponto flutuante de f(x+h)
- ullet Lembrando: o erro relativo para PF é da ordem de $\epsilon_{\mathsf{máq}}$
- Supondo valores ≈ 1 , o erro absoluto também é $\approx \epsilon_{\rm m\acute{a}q}$

- Seja $\hat{f}(x+h)$ a representação em ponto flutuante de f(x+h)
- ullet Lembrando: o erro relativo para PF é da ordem de $\epsilon_{\mathsf{máq}}$
- Supondo valores pprox 1, o erro absoluto também é $pprox \epsilon_{\mathsf{máq}}$
- Ou seja, $\hat{f}(x+h) = f(x+h) + \epsilon_1$, $\hat{f}(x-h) = f(x-h) + \epsilon_2$, $|\epsilon_1|, |\epsilon_2| \approx \epsilon_{\mathsf{máq}}$

- Seja $\hat{f}(x+h)$ a representação em ponto flutuante de f(x+h)
- ullet Lembrando: o erro relativo para PF é da ordem de $\epsilon_{
 m máq}$
- Supondo valores ≈ 1 , o erro absoluto também é $\approx \epsilon_{\rm m\acute{a}q}$
- Ou seja, $\hat{f}(x+h) = f(x+h) + \epsilon_1$, $\hat{f}(x-h) = f(x-h) + \epsilon_2$, $|\epsilon_1|, |\epsilon_2| \approx \epsilon_{\mathsf{máq}}$
- Para a derivada (usando a fórmula de diferença central):

$$f'(x)_{\text{exato}} - f'(x)_{\text{máq}} = f'(x) - \frac{\hat{f}(x+h) - \hat{f}(x-h)}{2h}$$

$$= f'(x) - \frac{f(x+h) + \epsilon_1 - [f(x-h) + \epsilon_2]}{2h}$$

$$= \left(f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}\right) + \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{2h}$$

$$= \underbrace{[f'(x)_{\text{exato}} - f'(x)_{\text{fórmula}}]}_{\text{truncamento}} + \underbrace{\text{erro}_{\text{arredondamento}}}_{\text{arredondamento}}$$

$$f'(x)_{\text{exato}} - f'(x)_{\text{máq}} = \underbrace{\left[f'(x)_{\text{exato}} - f'(x)_{\text{fórmula}}\right]}_{\text{truncamento}} + \underbrace{\text{erro}_{\text{arredonda}}}_{\text{arredondamento}}$$

Erro total:

$$f'(x)_{\text{exato}} - f'(x)_{\text{máq}} = \underbrace{\left[f'(x)_{\text{exato}} - f'(x)_{\text{fórmula}}\right]}_{\text{truncamento}} + \underbrace{\text{erro}_{\text{arredonda}}}_{\text{arredondamento}}$$

- Erro total:
 - truncamento: diferença entre derivada "correta" e fórmula de aproximação "correta"

$$f'(x)_{\text{exato}} - f'(x)_{\text{máq}} = \underbrace{[f'(x)_{\text{exato}} - f'(x)_{\text{fórmula}}]}_{\text{truncamento}} + \underbrace{\text{erro}_{\text{arredonda}}}_{\text{arredondamento}}$$

Erro total:

- truncamento: diferença entre derivada "correta" e fórmula de aproximação "correta"
- arredondamento: perda de significância com implementação computacional

$$f'(x)_{\text{exato}} - f'(x)_{\text{máq}} = \underbrace{[f'(x)_{\text{exato}} - f'(x)_{\text{fórmula}}]}_{\text{truncamento}} + \underbrace{\text{erro}_{\text{arredonda}}}_{\text{arredondamento}}$$

- Erro total:
 - truncamento: diferença entre derivada "correta" e fórmula de aproximação "correta"
 - arredondamento: perda de significância com implementação computacional
- O valor absoluto do erro de arredondamento é:

$$\left|\frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{2h}\right| \le \frac{2\epsilon_{\mathsf{máq}}}{2h} = \frac{\epsilon_{\mathsf{máq}}}{h}$$

$$f'(x)_{\text{exato}} - f'(x)_{\text{máq}} = \underbrace{[f'(x)_{\text{exato}} - f'(x)_{\text{fórmula}}]}_{\text{truncamento}} + \underbrace{\text{erro}_{\text{arredonda}}}_{\text{arredondamento}}$$

- Erro total:
 - truncamento: diferença entre derivada "correta" e fórmula de aproximação "correta"
 - arredondamento: perda de significância com implementação computacional
- O valor absoluto do erro de arredondamento é:

$$\left|\frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{2h}\right| \le \frac{2\epsilon_{\mathsf{máq}}}{2h} = \frac{\epsilon_{\mathsf{máq}}}{h}$$

■ De modo que o valor absoluto do erro na aproximação de f'(x) no computador tem como limite superior

$$E(h) \equiv \frac{h^2}{6} f'''(c) + \frac{\epsilon_{\text{máq}}}{h} \quad x - h < c < x + h$$

$$E(h) \equiv \frac{h^2}{6} f'''(c) + \frac{\epsilon_{\mathsf{máq}}}{h} \quad x - h < c < x + h$$

■ O erro *E*(*h*) tem um mínimo em

$$0 = E'(h) = -\frac{\epsilon_{\mathsf{máq}}}{h^2} + \frac{f'''(c)}{3}h$$

O erro E(h) tem um mínimo em

$$0 = E'(h) = -\frac{\epsilon_{\mathsf{máq}}}{h^2} + \frac{f'''(c)}{3}h$$

• Seja $|f'''(c)| \approx |f'''(x)| \equiv M$. Resolvendo acima, temos

$$h = \left(\frac{3\epsilon_{\mathsf{máq}}}{M}\right)^{1/3}$$

O erro E(h) tem um mínimo em

$$0 = E'(h) = -\frac{\epsilon_{\mathsf{máq}}}{h^2} + \frac{f'''(c)}{3}h$$

• Seja $|f'''(c)| \approx |f'''(x)| \equiv M$. Resolvendo acima, temos

$$h = \left(\frac{3\epsilon_{\mathsf{máq}}}{M}\right)^{1/3}$$

isto nos dá o incremento h correspondente a menor erro total.

O erro E(h) tem um mínimo em

$$0 = E'(h) = -\frac{\epsilon_{\text{máq}}}{h^2} + \frac{f'''(c)}{3}h$$

• Seja $|f'''(c)| \approx |f'''(x)| \equiv M$. Resolvendo acima, temos

$$h = \left(\frac{3\epsilon_{\mathsf{máq}}}{M}\right)^{1/3}$$

- isto nos dá o incremento h correspondente a menor erro total.
- em precisão dupla, temos $\epsilon_{\rm máq}^{1/3} \approx 10^{-5}$, o que está de acordo com a tabela anterior.

■ O erro *E*(*h*) tem um mínimo em

$$0 = E'(h) = -\frac{\epsilon_{\text{máq}}}{h^2} + \frac{f'''(c)}{3}h$$

• Seja $|f'''(c)| \approx |f'''(x)| \equiv M$. Resolvendo acima, temos

$$h = \left(\frac{3\epsilon_{\mathsf{máq}}}{M}\right)^{1/3}$$

- isto nos dá o incremento h correspondente a menor erro total.
- em precisão dupla, temos $\epsilon_{\rm máq}^{1/3} \approx 10^{-5}$, o que está de acordo com a tabela anterior.
- Resumindo: Para a fórmula de diferença central de três pontos, a precisão vai melhorando conforme diminuimos h, até aproximadamente a raíz cúbica de $\epsilon_{máq}$. A partir deste valor, o erro pode começar a aumentar novamente.

Computação Simbólica

 Algumas linguagens contém suporte / pacotes que permitem o calcular derivadas "simbolicamente"

Computação Simbólica

- Algumas linguagens contém suporte / pacotes que permitem o calcular derivadas "simbolicamente"
- Este tipo de manipulação está muito mais próximo do cálculo que fazemos "à mão" (FUV):

```
>>>from sympy import *
>>>x, y, z = symbols('x y z')
>>>f = sin(3*x)
>>>diff(f)
3*cos(3*x)
```

Diferenciação Simbólica

• Podemos calcular qualquer derivada de f, por exemplo f'''(x):

```
>>> diff(f, x, 3)
-27*cos(3*x)
```

Diferenciação Simbólica

• Podemos calcular qualquer derivada de f, por exemplo f'''(x):

```
>>> diff(f, x, 3)
-27*cos(3*x)
```

• E até mesmo integrais...

```
>>>g = sin(x)
>>>integrate(g)
-cos(x)
>>>integrate(g, (x, 0, pi))
2
```

Computação Simbólica

• Última brincadeira:

```
>>>integrate(x**2 + x + 1)
3 2
X X
-- + -- + x
>>> integrate(sin(x)**7)
cos(x) 3*cos(x) 3
5
```

Computação Simbólica

Mas o que acontece aqui?!

Integração Numérica

Quadratura

 O cálculo numérico de integrais definidas (ou quadratura) depende de ferramentas que já estudamos:

Quadratura

- O cálculo numérico de integrais definidas (ou quadratura) depende de ferramentas que já estudamos:
 - interpolação

- O cálculo numérico de integrais definidas (ou quadratura) depende de ferramentas que já estudamos:
 - interpolação
 - ajuste de funções por mínimos quadrados

- O cálculo numérico de integrais definidas (ou quadratura) depende de ferramentas que já estudamos:
 - interpolação
 - ajuste de funções por mínimos quadrados
- Seja f definida num intervalo [a, b].

- O cálculo numérico de integrais definidas (ou quadratura) depende de ferramentas que já estudamos:
 - interpolação
 - ajuste de funções por mínimos quadrados
- Seja f definida num intervalo [a, b].
- Se tivermos um polinômio interpolador P(x) por alguns pontos de f, podemos aproximar

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \int_{a}^{b} P(x) dx \quad \text{(M\'etodo de Newton-Cotes)}$$

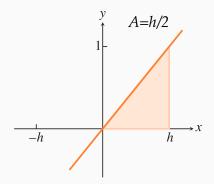
- O cálculo numérico de integrais definidas (ou quadratura) depende de ferramentas que já estudamos:
 - interpolação
 - ajuste de funções por mínimos quadrados
- Seja f definida num intervalo [a, b].
- Se tivermos um polinômio interpolador P(x) por alguns pontos de f, podemos aproximar

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \int_{a}^{b} P(x) dx \quad \text{(M\'etodo de Newton-Cotes)}$$

Por outro lado, se econtrarmos um polinômio de grau baixo $\mathcal{P}(x)$ que aproxima f "bem" (no sentido de MQ), fazemos

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \int_{a}^{b} \mathcal{P}(x) dx \quad \text{(Quadratura Gaussiana)}$$

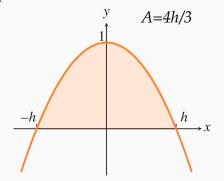
Integral Útil 1



• A área sob a reta que interpola os pontos (0,0),(h,1) é

$$\int_0^h \frac{x}{h} \, \mathrm{d}x = \frac{h}{2}$$

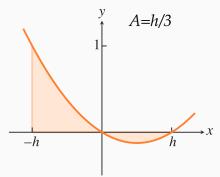
Integral Útil 2



• A área sob a parábola P(x) que interpola os pontos (-h,0),(0,1),(h,0) é

$$\int_{-h}^{h} P(x) dx = x - \frac{x^3}{3h^2} = \frac{4}{3}h$$

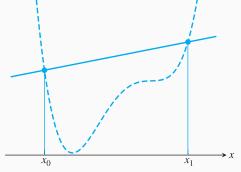
Integral Útil 3



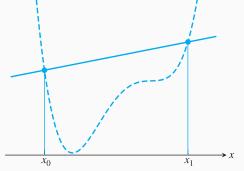
• A área sob a parábola P(x) que interpola os pontos (-h,1),(0,0),(h,0) é

$$\int_{-h}^{h} P(x) \, \mathrm{d}x = \frac{h}{3}$$

• Seja f(x) com 2a. derivada contínua, definida em $[x_0, x_1]$.



• Seja f(x) com 2a. derivada contínua, definida em $[x_0, x_1]$.



Polinômio interpolador (Lagrange) por $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$ (com $y_i = f(x_i)$):

$$f(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!} f''(c_x) = P(x) + E(x)$$

Integrando ambos os lados, temos

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

Integrando ambos os lados, temos

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

• A primeira integral é (fazendo $h = x_1 - x_0$ e usando a Integral Útil 1 acima):

$$\int_{x_0}^{x_1} P(x) dx = y_0 \int_{x_0}^{x_1} \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx + y_1 \int_{x_0}^{x_1} \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} dx$$
$$= y_0 \frac{h}{2} + y_1 \frac{h}{2} = h \frac{y_0 + y_1}{2}$$

Integrando ambos os lados, temos

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

• A primeira integral é (fazendo $h = x_1 - x_0$ e usando a Integral Útil 1 acima):

$$\int_{x_0}^{x_1} P(x) dx = y_0 \int_{x_0}^{x_1} \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx + y_1 \int_{x_0}^{x_1} \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} dx$$
$$= y_0 \frac{h}{2} + y_1 \frac{h}{2} = h \frac{y_0 + y_1}{2}$$

Note que estamos calculando a área de um trapézio!

O termo do Erro fica (usando o TVM para integrais na 2a igualdade):

$$\int_{x_0}^{x_1} E(x) dx = \frac{1}{2!} \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1) f''(c(x)) dx$$

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

$$= \frac{f''(c)}{2} \int_0^h u(u - h) du$$

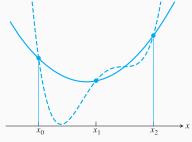
$$= -\frac{h^3}{12} f''(c)$$

Resumo

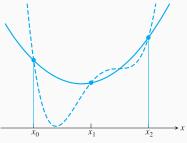
$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \frac{h}{2} (y_0 + y_1) - \frac{h^3}{12} f''(c)$$

$$(com h = x_1 - x_0 e c entre x_0 e x_1)$$

 Similar à Regra do Trapézio, mas trocando a reta interpoladora por uma parábola



 Similar à Regra do Trapézio, mas trocando a reta interpoladora por uma parábola



Polinômio interpolador (Lagrange) por $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)$:

$$f(x) = y_0 \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + y_1 \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}$$

$$+ y_2 \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} + \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)}{3!} f''(c_x)$$

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

Integrando ambos os lados, temos

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} P(x) dx + \int_{x_0}^{x_2} E(x) dx$$

Integrando ambos os lados, temos

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} P(x) dx + \int_{x_0}^{x_2} E(x) dx$$

• A primeira integral é (fazendo $h = x_2 - x_1 = x_1 - x_0$, e usando as Integrais Úteis 2 e 3):

$$\int_{x_0}^{x_2} P(x) dx = y_0 \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} dx$$

$$+ y_1 \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} dx$$

$$+ y_2 \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} dx$$

$$= y_0 \frac{h}{3} + y_1 \frac{4h}{3} + y_2 \frac{h}{3}$$

• O termo do Erro fica

$$\int_{x_0}^{x_2} E(x) \, \mathrm{d}x = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(c)$$

O termo do Erro fica

$$\int_{x_0}^{x_2} E(x) \, \mathrm{d}x = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(c)$$

• (para algum c em $[x_0, x_2]$), se $f^{(4)}(x)$ existir e for contínua)

Resumo

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(c)$$

(com
$$h = x_2 - x_1 = x_1 - x_0$$
 e c entre x_0 e x_2)

• Exemplo: estimaremos, usando Trapézio e Simpson

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Exemplo: estimaremos, usando Trapézio e Simpson

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Trapézio:

$$\int_{1}^{2} \ln(x) dx \approx \frac{h}{2} (y_0 + y_1) = \frac{1}{2} (\ln 1 + \ln 2) = \frac{\ln(2)}{2} \approx 0.3466$$

Exemplo: estimaremos, usando Trapézio e Simpson

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Trapézio:

$$\int_{1}^{2} \ln(x) dx \approx \frac{h}{2} (y_0 + y_1) = \frac{1}{2} (\ln 1 + \ln 2) = \frac{\ln(2)}{2} \approx 0.3466$$

• O erro para a Regra do Trapézio é $-h^3f''(c)/12$, com 1 < c < 2. Sendo $f''(x) = -1/x^2$, o erro máximo é 1^3 1

$$\frac{1^3}{12c^2} \le \frac{1}{12} \approx 0.0834$$

Exemplo: estimaremos, usando Trapézio e Simpson

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Trapézio:

$$\int_{1}^{2} \ln(x) dx \approx \frac{h}{2} (y_0 + y_1) = \frac{1}{2} (\ln 1 + \ln 2) = \frac{\ln(2)}{2} \approx 0.3466$$

• O erro para a Regra do Trapézio é $-h^3f''(c)/12$, com 1 < c < 2. Sendo $f''(x) = -1/x^2$, o erro máximo é

$$\frac{1^3}{12c^2} \le \frac{1}{12} \approx 0.0834$$

Ou seja, pela Regra do Trapézio

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x = 0.3466 \pm 0.0834$$

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Simpson:

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x \approx \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2) = \frac{0.5}{3} (\ln 1 + 4 \ln \frac{3}{2} + \ln 2) \approx 0.3858$$

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Simpson:

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, dx \approx \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2) = \frac{0.5}{3} (\ln 1 + 4 \ln \frac{3}{2} + \ln 2) \approx 0.3858$$

• O erro para a Regra de Simpson é $-h^5 f^{(4)}(c)/90$, com 1 < c < 2. Sendo $f^{(4)}(x) = -6/x^4$, o erro máximo é $6(0.5)^5 < 6(0.5)^5$

$$\frac{6(0.5)^5}{90c^4} \le \frac{6(0.5)^5}{90} \approx 0.0021$$

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Simpson:

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x \approx \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2) = \frac{0.5}{3} (\ln 1 + 4 \ln \frac{3}{2} + \ln 2) \approx 0.3858$$

• O erro para a Regra de Simpson é $-h^5f^{(4)}(c)/90$, com 1 < c < 2. Sendo $f^{(4)}(x) = -6/x^4$, o erro máximo é

$$\frac{6(0.5)^5}{90c^4} \le \frac{6(0.5)^5}{90} \approx 0.0021$$

Ou seja, pela Regra de Simpson

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x = 0.3858 \pm 0.0021$$

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

 Esta integral pode ser feita exatamente usando integração por partes:

$$\int_{1}^{2} \ln(x) dx = x \ln x |_{1}^{2} - x |_{1}^{2} = 2 \ln 2 - 1 \ln 1 - 1 \approx 0.386294$$

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

 Esta integral pode ser feita exatamente usando integração por partes:

$$\int_{1}^{2} \ln(x) dx = x \ln x |_{1}^{2} - x |_{1}^{2} = 2 \ln 2 - 1 \ln 1 - 1 \approx 0.386294$$

 Ambas estimativas de erro são consistente e, conforme esperado, a Regra de Simpson é mais acurada do que a do Trapézio.

• Comparamos regras de integração numérica pelo termo de erro:

- Comparamos regras de integração numérica pelo termo de erro:
- ordem de precisão de um método de integração: maior inteiro k para o qual polinômios de grau k ou menor são integrados exatamente.

- Comparamos regras de integração numérica pelo termo de erro:
- ordem de precisão de um método de integração: maior inteiro k para o qual polinômios de grau k ou menor são integrados exatamente.
- Regra do Trapézio: erro é $-h^3f''(c)/12$

- Comparamos regras de integração numérica pelo termo de erro:
- ordem de precisão de um método de integração: maior inteiro k para o qual polinômios de grau k ou menor são integrados exatamente.
- Regra do Trapézio: erro é $-h^3f''(c)/12$
 - se f(x) for de grau 1 ou menor, o erro é 0

- Comparamos regras de integração numérica pelo termo de erro:
- ordem de precisão de um método de integração: maior inteiro k para o qual polinômios de grau k ou menor são integrados exatamente.
- Regra do Trapézio: erro é $-h^3f''(c)/12$
 - se f(x) for de grau 1 ou menor, o erro é 0
 - Trapézio tem ordem de precisão 1

- Comparamos regras de integração numérica pelo termo de erro:
- ordem de precisão de um método de integração: maior inteiro k para o qual polinômios de grau k ou menor são integrados exatamente.
- Regra do Trapézio: erro é $-h^3f''(c)/12$
 - se f(x) for de grau 1 ou menor, o erro é 0
 - Trapézio tem ordem de precisão 1
 - intuitivo: área sob uma reta é dada exatamente pelo trapézio.

- Comparamos regras de integração numérica pelo termo de erro:
- ordem de precisão de um método de integração: maior inteiro k para o qual polinômios de grau k ou menor são integrados exatamente.
- Regra do Trapézio: erro é $-h^3f''(c)/12$
 - se f(x) for de grau 1 ou menor, o erro é 0
 - Trapézio tem ordem de precisão 1
 - intuitivo: área sob uma reta é dada exatamente pelo trapézio.
- Regra de Simpson: o erro é $-h^5 f^{(4)}(c)/90$

- Comparamos regras de integração numérica pelo termo de erro:
- ordem de precisão de um método de integração: maior inteiro k para o qual polinômios de grau k ou menor são integrados exatamente.
- Regra do Trapézio: erro é $-h^3f''(c)/12$
 - se f(x) for de grau 1 ou menor, o erro é 0
 - Trapézio tem ordem de precisão 1
 - intuitivo: área sob uma reta é dada exatamente pelo trapézio.
- Regra de Simpson: o erro é $-h^5 f^{(4)}(c)/90$
 - se f(x) for de grau 3 ou menor, o erro é 0

- Comparamos regras de integração numérica pelo termo de erro:
- ordem de precisão de um método de integração: maior inteiro k para o qual polinômios de grau k ou menor são integrados exatamente.
- Regra do Trapézio: erro é $-h^3f''(c)/12$
 - se f(x) for de grau 1 ou menor, o erro é 0
 - Trapézio tem ordem de precisão 1
 - intuitivo: área sob uma reta é dada exatamente pelo trapézio.
- Regra de Simpson: o erro é $-h^5 f^{(4)}(c)/90$
 - se f(x) for de grau 3 ou menor, o erro é 0
 - Simpson tem ordem de precisão 3

- Comparamos regras de integração numérica pelo termo de erro:
- ordem de precisão de um método de integração: maior inteiro k para o qual polinômios de grau k ou menor são integrados exatamente.
- Regra do Trapézio: erro é $-h^3f''(c)/12$
 - se f(x) for de grau 1 ou menor, o erro é 0
 - Trapézio tem ordem de precisão 1
 - intuitivo: área sob uma reta é dada exatamente pelo trapézio.
- Regra de Simpson: o erro é $-h^5 f^{(4)}(c)/90$
 - se f(x) for de grau 3 ou menor, o erro é 0
 - Simpson tem ordem de precisão 3
 - não é intuitivo que uma parábola interceptando uma cúbica em três pontos equispaçados tenha a mesma integral que a cúbica no intervalo.

 Uma última fórmula de Newton-Cotes: Regra dos 3/8 de Simpson

$$\int_{x_0}^{x^3} f(x) dx \approx \frac{3h}{8} (y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3)$$

 Uma última fórmula de Newton-Cotes: Regra dos 3/8 de Simpson

$$\int_{x_0}^{x^3} f(x) dx \approx \frac{3h}{8} (y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3)$$

Qual é a ordem desta regra?

 Uma última fórmula de Newton-Cotes: Regra dos 3/8 de Simpson

$$\int_{x_0}^{x^3} f(x) dx \approx \frac{3h}{8} (y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3)$$

- Qual é a ordem desta regra?
- Basta ir testando monômios sucessivamente. P. ex., para x^2 :

$$\frac{3h}{8}(x^2+3(x+h)^2+3(x+2h)^2+(x+3h)^2)=\underbrace{\frac{(x+3h)^3-x^3}{3}}_{\int_{x_0}^{x+3h}x^2\,\mathrm{d}x}$$

 Uma última fórmula de Newton-Cotes: Regra dos 3/8 de Simpson

$$\int_{x_0}^{x^3} f(x) dx \approx \frac{3h}{8} (y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3)$$

- Qual é a ordem desta regra?
- Basta ir testando monômios sucessivamente. P. ex., para x^2 :

$$\frac{3h}{8}(x^2+3(x+h)^2+3(x+2h)^2+(x+3h)^2)=\underbrace{\frac{(x+3h)^3-x^3}{3}}_{\int_{x_0}^{x+3h}x^2\,\mathrm{d}x}$$

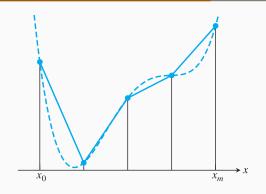
• Vemos que a regra é exata para x, x^2, x^3 , mas falha em x^4 . Ou seja, sua ordem de precisão é 3.

 As regras do Trapézio e de Simpson operam num intervalo único em x

- As regras do Trapézio e de Simpson operam num intervalo único em x
- Uma extensão natural é utilizar vários subintervalos, somando cada resultado

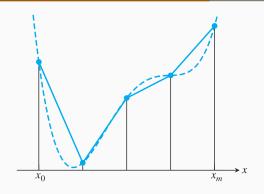
- As regras do Trapézio e de Simpson operam num intervalo único em x
- Uma extensão natural é utilizar vários subintervalos, somando cada resultado
- Procedendo desta maneira, obtemos regras compostas

- As regras do Trapézio e de Simpson operam num intervalo único em x
- Uma extensão natural é utilizar vários subintervalos, somando cada resultado
- Procedendo desta maneira, obtemos regras compostas
- https://ggbm.at/ac8v8wxt



Consideremos uma partição regular do intervalo [a, b]:

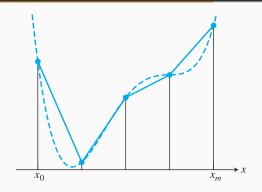
$$a = x_0 < x_1 < x_2 \ldots < x_{m-2} < x_{m-1} < x_m = b$$



Consideremos uma partição regular do intervalo [a, b]:

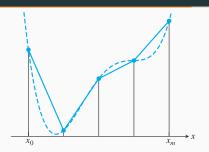
$$a = x_0 < x_1 < x_2 \ldots < x_{m-2} < x_{m-1} < x_m = b$$

• os x_i são equiespaçados, com $h = x_{i+1} - x_i$



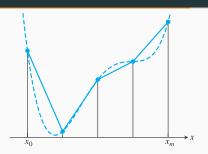
Para cada subintervalo, usamos a aproximação (com erro)

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



Somando os subintervalos (note as sobreposições!)

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



Somando os subintervalos (note as sobreposições!)

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

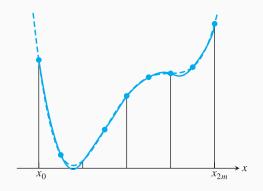
Novamente, usamos o TVI para juntar os termos de erro:

$$\sum_{i=0}^{m-1} \frac{h^3}{12} f''(c_i) = \frac{h^3}{12} m f''(c) \quad a < c < b$$

Resumo

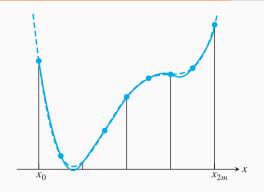
$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{h}{2} \left(y_0 + y_m + 2 \sum_{i=1}^{m-1} y_i \right) - \frac{(b-a)h^2}{12} f''(c)$$

• na qual usamos mh = (b - a) no termo de erro, e a < c < b.



Consideremos uma partição regular do intervalo [a, b]:

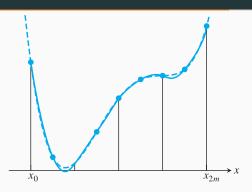
$$a = x_0 < x_1 < x_2 \dots < x_{2m-2} < x_{2m-1} < x_2 m = b$$



Consideremos uma partição regular do intervalo [a, b]:

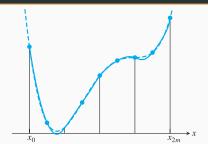
$$a = x_0 < x_1 < x_2 \ldots < x_{2m-2} < x_{2m-1} < x_2 m = b$$

• os x_i são equiespaçados, com $h = x_{i+1} - x_i$



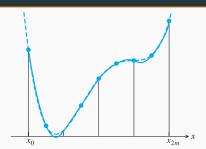
■ Para cada subintervalo $[x_{2i}, x_{2i+2}]$, i = 0, ..., m-1 (comprimento 2h), usamos a aproximação de Simpson

$$\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x) dx = \frac{h}{3} [f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2})] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(c_i)$$



Somando os subintervalos (só há sobreposições nos pares)

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{h}{3} \left[f(a) + f(b) + 4 \sum_{i=1}^{m} f(x_{2i-1}) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} f(x_{2i}) \right] - \sum_{i=0}^{m-1} \frac{h^{5}}{90} f^{(4)}(c_{i})$$



Somando os subintervalos (só há sobreposições nos pares)

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{h}{3} \left[f(a) + f(b) + 4 \sum_{i=1}^{m} f(x_{2i-1}) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} f(x_{2i}) \right] - \sum_{i=0}^{m-1} \frac{h^{5}}{90} f^{(4)}(c_{i})$$

Novamente, usamos o TVI para juntar os termos de erro:

$$\frac{h^5}{90} \sum_{i=0}^{m-1} f^{(4)}(c_i) = \frac{h^5}{90} m f^{(4)}(c) \quad a < c < b$$

Resumo

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{h}{3} \left[y_0 + y_{2m} + 4 \sum_{i=1}^{m} y_{2i-1} + 2 \sum_{i=1}^{m-1} y_{2i} \right] - \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(c)$$

■ na qual usamos $m \cdot 2h = (b - a)$ no termo de erro, e a < c < b.

Exemplo: aproximações com 4 "fatias" para

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Exemplo: aproximações com 4 "fatias" para

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

• Trapézio: 4 fatias em $[1,2] \implies h = 1/4$:

$$\int_{1}^{2} \ln x \, dx \approx \frac{1/4}{2} \left[y_0 + y_4 + 2 \sum_{i=1}^{3} y_i \right] =$$

$$= \frac{1}{8} \left[\ln 1 + \ln 2 + 2 (\ln 5/4 + \ln 6/4 + \ln 7/4) \right]$$

$$\approx 0.3837$$

Exemplo: aproximações com 4 "fatias" para

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

• Trapézio: 4 fatias em $[1,2] \implies h = 1/4$:

$$\int_{1}^{2} \ln x \, dx \approx \frac{1/4}{2} \left[y_0 + y_4 + 2 \sum_{i=1}^{3} y_i \right] =$$

$$= \frac{1}{8} \left[\ln 1 + \ln 2 + 2 (\ln 5/4 + \ln 6/4 + \ln 7/4) \right]$$

$$\approx 0.3837$$

O erro é, no máximo,

$$\frac{(b-a)h^2}{12}|f''(c)| = \frac{1/16}{12}\frac{1}{c^2} \le \frac{1}{(16)(12)(1^2)} = \frac{1}{192} \approx 0.0052$$

• Exemplo: aproximações com 4 "fatias" para

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Exemplo: aproximações com 4 "fatias" para

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

• Simpson: 4 fatias em $[1,2] \implies h = 1/8$:

$$\int_{1}^{2} \ln x \, dx \approx \frac{1/8}{3} \left[y_{0} + y_{8} + 4 \sum_{i=1}^{4} y_{2i-1} + 2 \sum_{i=1}^{3} y_{2i} \right] =$$

$$= \frac{1}{24} \left[\ln 1 + \ln 2 + 4 \left(\ln 9/8 + \ln 11/8 + \ln 13/8 + \ln 15/8 \right) + 2 \left(\ln 5/4 + \ln 6/4 + \ln 7/4 \right) \right]$$

$$\approx 0.386292$$

Exemplo: aproximações com 4 "fatias" para

$$\int_{1}^{2} \ln(x) dx$$

• Simpson: 4 fatias em $[1,2] \implies h = 1/8$:

$$\int_{1}^{2} \ln x \, dx \approx \frac{1/8}{3} \left[y_0 + y_8 + 4 \sum_{i=1}^{4} y_{2i-1} + 2 \sum_{i=1}^{3} y_{2i} \right] =$$

$$= \frac{1}{24} \left[\ln 1 + \ln 2 + 4 \left(\ln 9/8 + \ln 11/8 + \ln 13/8 + \ln 15/8 \right) + 2 \left(\ln 5/4 + \ln 6/4 + \ln 7/4 \right) \right]$$

$$\approx 0.386292$$

O erro é, no máximo,

$$\frac{(b-a)h^2}{12}|f^{(4)}(c)| = \frac{1/8^4}{180} \frac{6}{c^4} \le \frac{6}{(8^4)(180)(1^4)} \approx 0.000008$$

 Usando a regra de Simpson composta, quantas "fatias" são necessárias para aproximar, com seis casas de precisão,

$$\int_0^{\pi} \sin^2 x \, \mathrm{d}x?$$

 Usando a regra de Simpson composta, quantas "fatias" são necessárias para aproximar, com seis casas de precisão,

$$\int_0^{\pi} \sin^2 x \, \mathrm{d}x?$$

Queremos que o erro satifaça

$$\frac{(\pi-0)h^4}{180}|f^{(4)}(c)|<0.5\times10^{-6}$$

 Usando a regra de Simpson composta, quantas "fatias" são necessárias para aproximar, com seis casas de precisão,

$$\int_0^{\pi} \sin^2 x \, \mathrm{d}x?$$

Queremos que o erro satifaça

$$\frac{(\pi-0)h^4}{180}|f^{(4)}(c)|<0.5\times10^{-6}$$

• Sendo $\frac{d^4 \sin^2 x}{dx^4} = -8 \cos 2x$, precisamos de

$$\frac{\pi h^4}{180} 8 < 0.5 \times 10^{-6} \implies h < 0.0435$$

 Usando a regra de Simpson composta, quantas "fatias" são necessárias para aproximar, com seis casas de precisão,

$$\int_0^{\pi} \sin^2 x \, \mathrm{d}x?$$

Queremos que o erro satifaça

$$\frac{(\pi-0)h^4}{180}|f^{(4)}(c)|<0.5\times10^{-6}$$

• Sendo $\frac{d^4 \sin^2 x}{dx^4} = -8 \cos 2x$, precisamos de

$$\frac{\pi h^4}{180} 8 < 0.5 \times 10^{-6} \implies h < 0.0435$$

• Precisamos então de $m = \lceil \frac{\pi}{2h} \rceil = 37$ "fatias".

Métodos de Newton Cotes abertos

 Os métodos anteriores (Trapézio, Simpson) são ditos "fechados" por usarem os extremos do intervalo de integração

Métodos de Newton Cotes abertos

- Os métodos anteriores (Trapézio, Simpson) são ditos "fechados" por usarem os extremos do intervalo de integração
- Alguns integrandos podem ter singularidades removíveis nos extremos de integração, o que impede o uso de métodos "fechados"

Métodos de Newton Cotes abertos

- Os métodos anteriores (Trapézio, Simpson) são ditos "fechados" por usarem os extremos do intervalo de integração
- Alguns integrandos podem ter singularidades removíveis nos extremos de integração, o que impede o uso de métodos "fechados"
- Definimos então fórmulas de NC abertas, ou seja, que não usam os extremos do intervalo.

Métodos de Newton Cotes abertos

- Os métodos anteriores (Trapézio, Simpson) são ditos "fechados" por usarem os extremos do intervalo de integração
- Alguns integrandos podem ter singularidades removíveis nos extremos de integração, o que impede o uso de métodos "fechados"
- Definimos então fórmulas de NC abertas, ou seja, que não usam os extremos do intervalo.
- Por exemplo, como integrar

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \, \mathrm{d}x?$$

Regra do Ponto Médio

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) \, \mathrm{d}x = hf(w) + \frac{h^3}{24} f''(c)$$

• com $h = (x_1 - x_0)$, w é o ponto médio $x_0 + h/2$ e $x_0 < c < x_1$

Regra do Ponto Médio

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

- com $h = (x_1 x_0)$, w é o ponto médio $x_0 + h/2$ e $x_0 < c < x_1$
- Requer calcular a f apenas uma vez, mas ainda assim com metade do erro em relação à regra do Trapézio

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = h \sum_{i=1}^{m} f(w_{i}) + \frac{(b-a)h^{2}}{24} f''(c)$$

• com h = (b-a)/m, $x_0 < c < x_1$ e w_i os pontos médios dos m subintervalos (iguais) de [a,b]

Vamos calcular, usando 10 "fatias",

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \, \mathrm{d}x$$

Vamos calcular, usando 10 "fatias",

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \, \mathrm{d}x$$

 Cuidado! aqui não podemos aplicar Trapézio/Simpson (singularidade em 0).

Vamos calcular, usando 10 "fatias",

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \, \mathrm{d}x$$

- Cuidado! aqui não podemos aplicar Trapézio/Simpson (singularidade em 0).
- Mas Ponto Médio pode ser aplicado diretamente.

Vamos calcular, usando 10 "fatias",

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \, \mathrm{d}x$$

- Cuidado! aqui não podemos aplicar Trapézio/Simpson (singularidade em 0).
- Mas Ponto Médio pode ser aplicado diretamente.
- Os pontos médios são 0.05, 0.15, ..., 0.95, então

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \, \mathrm{d}x \approx 0.1 \sum_1^{10} f(w_i) \approx 0.94620858$$

Vamos calcular, usando 10 "fatias",

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \, \mathrm{d}x$$

- Cuidado! aqui não podemos aplicar Trapézio/Simpson (singularidade em 0).
- Mas Ponto Médio pode ser aplicado diretamente.
- Os pontos médios são $0.05, 0.15, \ldots, 0.95$, então

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \, \mathrm{d}x \approx 0.1 \sum_1^{10} f(w_i) \approx 0.94620858$$

A resposta correta até o 8o. dígito é 0.94608307

 Ordem de precisão: maior grau dos polinômios integrados exatamente por dada regra

- Ordem de precisão: maior grau dos polinômios integrados exatamente por dada regra
- Fórmula de Newton-Cotes de grau n têm ordem de precisão n (para n ímpar) e n+1 para n par:

- Ordem de precisão: maior grau dos polinômios integrados exatamente por dada regra
- Fórmula de Newton-Cotes de grau n têm ordem de precisão n (para n ímpar) e n+1 para n par:
 - Trapézio (NC grau 1) tem ordem de precisão 1

- Ordem de precisão: maior grau dos polinômios integrados exatamente por dada regra
- Fórmula de Newton-Cotes de grau n têm ordem de precisão n (para n ímpar) e n+1 para n par:
 - Trapézio (NC grau 1) tem ordem de precisão 1
 - Simpson (NC grau 2) tem ordem de precisão 3

- Ordem de precisão: maior grau dos polinômios integrados exatamente por dada regra
- Fórmula de Newton-Cotes de grau n têm ordem de precisão n (para n ímpar) e n+1 para n par:
 - Trapézio (NC grau 1) tem ordem de precisão 1
 - Simpson (NC grau 2) tem ordem de precisão 3
- Para a esta precisão, um método NC de ordem n calcula f n+1 vezes, em pontos equiespaçados.

- Ordem de precisão: maior grau dos polinômios integrados exatamente por dada regra
- Fórmula de Newton-Cotes de grau n têm ordem de precisão n (para n ímpar) e n+1 para n par:
 - Trapézio (NC grau 1) tem ordem de precisão 1
 - Simpson (NC grau 2) tem ordem de precisão 3
- Para a esta precisão, um método NC de ordem n calcula f n + 1 vezes, em pontos equiespaçados.
- Esta é a maneira mais "eficiente" de particionar o intervalo?

- Ordem de precisão: maior grau dos polinômios integrados exatamente por dada regra
- Fórmula de Newton-Cotes de grau n têm ordem de precisão n (para n ímpar) e n+1 para n par:
 - Trapézio (NC grau 1) tem ordem de precisão 1
 - Simpson (NC grau 2) tem ordem de precisão 3
- Para a esta precisão, um método NC de ordem n calcula f n+1 vezes, em pontos equiespaçados.
- Esta é a maneira mais "eficiente" de particionar o intervalo?
- Não. O método de **Quadratura Gaussiana** usa n+1 pontos para obter ordem de precisão 2n+1

• Como verificávamos se dois vetores eram ortogonais em GA?

- Como verificávamos se dois vetores eram ortogonais em GA?
- O mesmo vale para funções (vetores no espaço das funções)

- Como verificávamos se dois vetores eram ortogonais em GA?
- O mesmo vale para funções (vetores no espaço das funções)
- O conjunto de funções $\{p_0, \ldots, p_n\}$ em [a, b] é **ortogonal** se

$$\overbrace{\int_{a}^{b} p_{j}(x) p_{k}(x) dx}^{\text{produto escalar}} = \begin{cases}
0 & j \neq k \\
\neq 0 & j = k
\end{cases}$$

- Como verificávamos se dois vetores eram ortogonais em GA?
- O mesmo vale para funções (vetores no espaço das funções)
- O conjunto de funções $\{p_0, \ldots, p_n\}$ em [a, b] é **ortogonal** se

$$\overbrace{\int_{a}^{b} p_{j}(x) p_{k}(x) dx}^{\text{produto escalar}} = \begin{cases}
0 & j \neq k \\
\neq 0 & j = k
\end{cases}$$

Se cada um dos polinômios no conjunto ortogonal {p₀,..., p_n}
 tem grau i, então qualquer polinômio de grau (até) n pode ser escrito como combinação linear dos p_i

- Como verificávamos se dois vetores eram ortogonais em GA?
- O mesmo vale para funções (vetores no espaço das funções)
- O conjunto de funções $\{p_0, \ldots, p_n\}$ em [a, b] é **ortogonal** se

$$\overbrace{\int_{a}^{b} p_{j}(x) p_{k}(x) dx}^{\text{produto escalar}} = \begin{cases}
0 & j \neq k \\
\neq 0 & j = k
\end{cases}$$

- Se cada um dos polinômios no conjunto ortogonal {p₀,..., p_n} tem grau i, então qualquer polinômio de grau (até) n pode ser escrito como combinação linear dos p_i
- Ou seja, $\{p_0, \ldots, p_n\}$ é uma **base** para o espaço dos polinômios de grau até n.

- Como verificávamos se dois vetores eram ortogonais em GA?
- O mesmo vale para funções (vetores no espaço das funções)
- O conjunto de funções $\{p_0, \ldots, p_n\}$ em [a, b] é **ortogonal** se

$$\overbrace{\int_{a}^{b} p_{j}(x) p_{k}(x) dx}^{\text{produto escalar}} = \begin{cases}
0 & j \neq k \\
\neq 0 & j = k
\end{cases}$$

- Se cada um dos polinômios no conjunto ortogonal {p₀,..., p_n}
 tem grau i, então qualquer polinômio de grau (até) n pode ser escrito como combinação linear dos p_i
- Ou seja, $\{p_0, \ldots, p_n\}$ é uma **base** para o espaço dos polinômios de grau até n.
- Cada p_i (grau i) tem i raízes distintas em [a, b].

Exemplo: vamos encontrar três polinômios ortogonais em [-1,1].

- Exemplo: vamos encontrar três polinômios ortogonais em [-1, 1].
- $p_0(x)=1$ e $p_1(x)=x$ são bons candidatos, já que

$$\int_{-1}^{1} 1 \cdot x \, \mathrm{d}x = 0$$

- Exemplo: vamos encontrar três polinômios ortogonais em [-1, 1].
- $p_0(x) = 1$ e $p_1(x) = x$ são bons candidatos, já que

$$\int_{-1}^{1} 1 \cdot x \, \mathrm{d}x = 0$$

• Será que o terceiro é x^2 ?

$$\int_{-1}^{1} 1 \cdot x^2 \, \mathrm{d}x = 2/3 \neq 0 \implies 1, x^2 \text{ não são ortogonais em } [-1, 1].$$

- Exemplo: vamos encontrar três polinômios ortogonais em [-1, 1].
- $p_0(x) = 1$ e $p_1(x) = x$ são bons candidatos, já que

$$\int_{-1}^{1} 1 \cdot x \, \mathrm{d}x = 0$$

• Será que o terceiro é x^2 ?

$$\int_{-1}^{1} 1 \cdot x^2 \, \mathrm{d}x = 2/3 \neq 0 \implies 1, x^2 \text{ não são ortogonais em } [-1, 1].$$

• Adicionando uma constante c a x^2 , temos

$$\int_{-1}^{1} 1 \cdot (x^2 + c) \, dx = 2/3 + 2c \stackrel{\downarrow}{=} 0 \iff c = -1/3$$

• Verificando agora para $p_1(x) = x$:

$$\int_{-1}^{1} x \cdot (x^2 - 1/3) \, \mathrm{d}x = 0$$

• Verificando agora para $p_1(x) = x$:

$$\int_{-1}^{1} x \cdot (x^2 - 1/3) \, \mathrm{d}x = 0$$

• Ou seja, $p_2(x)=x^2-1/3$ é ortogonal a ambos $p_0(x)=1$ e $p_1(x)=x$ em [-1,1]

• Verificando agora para $p_1(x) = x$:

$$\int_{-1}^{1} x \cdot (x^2 - 1/3) \, \mathrm{d}x = 0$$

- Ou seja, $p_2(x) = x^2 1/3$ é ortogonal a ambos $p_0(x) = 1$ e $p_1(x) = x$ em [-1,1]
- Achamos então um conjunto ortogonal em [-1,1]: $\{1,x,x^2-1/3\}$

• Verificando agora para $p_1(x) = x$:

$$\int_{-1}^{1} x \cdot (x^2 - 1/3) \, \mathrm{d}x = 0$$

- Ou seja, $p_2(x) = x^2 1/3$ é ortogonal a ambos $p_0(x) = 1$ e $p_1(x) = x$ em [-1,1]
- Achamos então um conjunto ortogonal em [-1,1]: $\{1,x,x^2-1/3\}$
- Estes três polinômios são parte de um conjunto descoberto por Legendre.

Seja um conjunto com n polinômios definidos por

$$p_i(x) = \frac{1}{2^i i!} \frac{d^i}{dx^i} [(x^2 - 1)^i] \quad 0 \le i \le n$$

Os p_i são ortogonais em [-1, 1].

Seja um conjunto com n polinômios definidos por

$$p_i(x) = \frac{1}{2^i i!} \frac{d^i}{dx^i} [(x^2 - 1)^i] \quad 0 \le i \le n$$

Os p_i são ortogonais em [-1, 1].

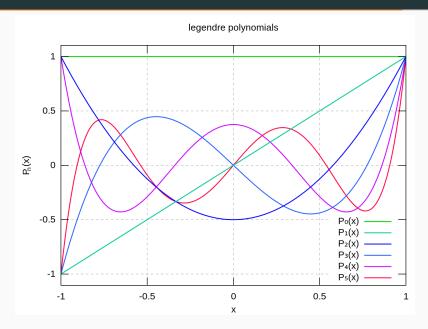
Note: $p_i(x)$ é um polinômio de grau i (i-ésima derivada de polinômo de grau 2i)

Seja um conjunto com n polinômios definidos por

$$p_i(x) = \frac{1}{2^i i!} \frac{d^i}{dx^i} [(x^2 - 1)^i] \quad 0 \le i \le n$$

Os p_i são ortogonais em [-1, 1].

- Note: p_i(x) é um polinômio de grau i (i-ésima derivada de polinômo de grau 2i)
- O n-ésimo polinômio de Legendre tem n raízes x_1, \ldots, x_n em [-1,1]

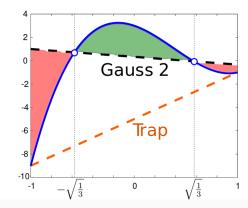


Quadratura Gaussiana

 Idéia similar às anteriores: aproximamos a integral da função pela integral do polinômio interpolador.

Quadratura Gaussiana

- Idéia similar às anteriores: aproximamos a integral da função pela integral do polinômio interpolador.
- Quadratura de Gauss-Legendre de f: combinação linear de f(x_i), sendo x_i os zeros dos polinômios de Legendre.



■ Para n fixo, seja Q(x) o polinômio que interpola f(x) nos nós x_1, \ldots, x_n (zeros do Polinômio de Legendre)

- Para n fixo, seja Q(x) o polinômio que interpola f(x) nos nós x_1, \ldots, x_n (zeros do Polinômio de Legendre)
- Usando a fórmula de Lagrange, temos

$$Q(x) = \sum_{j=1}^{n} L_{i} f(x_{i}) \quad L_{i}(x) = \frac{\prod_{j \neq i} (x - x_{j})}{\prod_{j \neq i} (x_{i} - x_{j})}$$

- Para n fixo, seja Q(x) o polinômio que interpola f(x) nos nós x_1, \ldots, x_n (zeros do Polinômio de Legendre)
- Usando a fórmula de Lagrange, temos

$$Q(x) = \sum_{j=1}^{n} L_{i} f(x_{i}) \quad L_{i}(x) = \frac{\prod_{j \neq i} (x - x_{j})}{\prod_{j \neq i} (x_{i} - x_{j})}$$

Integrando ambos os lados, obtemos a aproximação:

$$\int_{-1}^{1} f(x) dx \approx \sum_{j=1}^{n} c_{j} f(x_{j}), \quad c_{j} = \int_{-1}^{1} L_{j}(x) dx$$

As raízes dos polinômios de Legendre, bem como os valores dos coeficientes c_i, são conhecidos com bastante precisão:

n			raízes x _i			coeficientes c_i
2	$-1/\sqrt{3}$	=	-0.57735026918963	1	=	1.000000000000000
	$1/\sqrt{3}$	=	0.57735026918963	1	=	1.000000000000000
3	$-\sqrt{3/5}$	=	-0.77459666924148	5/9	=	0.5555555555555
	0	=	0.00000000000000	8/9	=	0.8888888888888888888888888888888888888
	$\sqrt{3/5}$	=	0.77459666924148	5/9	=	0.5555555555555
4	$-\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}}$	=	-0.86113631159405	$\frac{90-5\sqrt{30}}{180}$	=	0.34785484513745
	$-\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}}$	=	-0.33998104358486	$\frac{90+5\sqrt{30}}{180}$	=	0.65214515486255
	$\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}}$	=	0.33998104358486	$\frac{90+5\sqrt{30}}{180}$	=	0.65214515486255
	$\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}}$	=	0.86113631159405	$\frac{90-5\sqrt{30}}{180}$	=	0.34785484513745

• Exemplo: aproximaremos a integral via GL:

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

Exemplo: aproximaremos a integral via GL:

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

• Com n = 2 nós, temos

$$\int_{-1}^{1} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \approx c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2)$$
$$1 \cdot f(-\sqrt{1/3}) - 1 \cdot f(\sqrt{1/3}) \approx 1.69296344978123$$

Exemplo: aproximaremos a integral via GL:

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

• Com n = 2 nós, temos

$$\int_{-1}^{1} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \approx c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2)$$
$$1 \cdot f(-\sqrt{1/3}) - 1 \cdot f(\sqrt{1/3}) \approx 1.69296344978123$$

• Com n=3 nós, temos

$$\frac{5}{9}f\left(-\sqrt{3/5}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{3/5}\right) \approx 1.71202024520191$$

Exemplo: aproximaremos a integral via GL:

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

• Com n = 2 nós, temos

$$\int_{-1}^{1} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \approx c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2)$$
$$1 \cdot f(-\sqrt{1/3}) - 1 \cdot f(\sqrt{1/3}) \approx 1.69296344978123$$

• Com n = 3 nós, temos

$$\frac{5}{9}f\left(-\sqrt{3/5}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{3/5}\right) \approx 1.71202024520191$$

• Com n = 4 nós, temos

$$c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) + c_3 f(x_3) + c_4 f(x_4) \approx 1.71122450459949$$

Exemplo: aproximaremos a integral via GL:

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

• Com n = 2 nós, temos

$$\int_{-1}^{1} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \approx c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2)$$
$$1 \cdot f(-\sqrt{1/3}) - 1 \cdot f(\sqrt{1/3}) \approx 1.69296344978123$$

• Com n = 3 nós, temos

$$\frac{5}{9}f\left(-\sqrt{3/5}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{3/5}\right) \approx 1.71202024520191$$

• Com n = 4 nós, temos

$$c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) + c_3 f(x_3) + c_4 f(x_4) \approx 1.71122450459949$$

O valor correto com 14 casas é 1.71124878378430

 GL costuma chegar em aproximações mais precisa do que fórmulas "básicas" de Newton-Cotes, para um mesmo número de chamadas à função f.

- GL costuma chegar em aproximações mais precisa do que fórmulas "básicas" de Newton-Cotes, para um mesmo número de chamadas à função f.
- Isso se deve ao fato da Quadratura Gaussiana, usando um polinômio de Legendre de grau n em [-1,1], ter ordem de precisão 2n-1

- GL costuma chegar em aproximações mais precisa do que fórmulas "básicas" de Newton-Cotes, para um mesmo número de chamadas à função f.
- Isso se deve ao fato da Quadratura Gaussiana, usando um polinômio de Legendre de grau n em [-1,1], ter ordem de precisão 2n-1
- Isso significa que o método deve integrar um polinômio P(x) de grau máximo 2n-1 exatamente.

Demonstração: usando divisão longa de polinômios, temos

$$P(x) = S(x)p_n(x) + R(x)$$
 S, R têm grau $< n$

Demonstração: usando divisão longa de polinômios, temos

$$P(x) = S(x)p_n(x) + R(x)$$
 S, R têm grau $< n$

• GL vai integrar o resto R(x) exatamente: é a integral de um polinômio interpolador de grau n-1, que é idêntico a R(x)

Demonstração: usando divisão longa de polinômios, temos

$$P(x) = S(x)p_n(x) + R(x)$$
 S, R têm grau $< n$

- GL vai integrar o resto R(x) exatamente: é a integral de um polinômio interpolador de grau n-1, que é idêntico a R(x)
- Nas raízes x_i de $p_n(x)$, $P(x_i) = R(x_i)$, já que $p_n(x_i) = 0$, $\forall i$. Então, as QGL serão iguais.

Demonstração: usando divisão longa de polinômios, temos

$$P(x) = S(x)p_n(x) + R(x)$$
 S, R têm grau $< n$

- GL vai integrar o resto R(x) exatamente: é a integral de um polinômio interpolador de grau n-1, que é idêntico a R(x)
- Nas raízes x_i de $p_n(x)$, $P(x_i) = R(x_i)$, já que $p_n(x_i) = 0$, $\forall i$. Então, as QGL serão iguais.
- Mas suas integrais também o são:

$$\int_{-1}^{1} P(x) dx = \int_{-1}^{1} S(x) p_n(x) dx + \int_{-1}^{1} R(x) dx = 0 + \int_{1}^{1} R(x) dx$$

Demonstração: usando divisão longa de polinômios, temos

$$P(x) = S(x)p_n(x) + R(x)$$
 S, R têm grau $< n$

- GL vai integrar o resto R(x) exatamente: é a integral de um polinômio interpolador de grau n-1, que é idêntico a R(x)
- Nas raízes x_i de $p_n(x)$, $P(x_i) = R(x_i)$, já que $p_n(x_i) = 0$, $\forall i$. Então, as QGL serão iguais.
- Mas suas integrais também o são:

$$\int_{-1}^{1} P(x) dx = \int_{-1}^{1} S(x) p_n(x) dx + \int_{-1}^{1} R(x) dx = 0 + \int_{1}^{1} R(x) dx$$

■ A integral em S é zero já que S pode ser escrito como combinação linear dos $p_n(x)$, e estes são ortogonais.

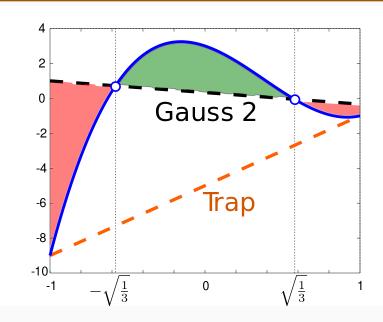
Demonstração: usando divisão longa de polinômios, temos

$$P(x) = S(x)p_n(x) + R(x)$$
 S, R têm grau $< n$

- GL vai integrar o resto R(x) exatamente: é a integral de um polinômio interpolador de grau n-1, que é idêntico a R(x)
- Nas raízes x_i de $p_n(x)$, $P(x_i) = R(x_i)$, já que $p_n(x_i) = 0$, $\forall i$. Então, as QGL serão iguais.
- Mas suas integrais também o são:

$$\int_{-1}^{1} P(x) dx = \int_{-1}^{1} S(x) p_n(x) dx + \int_{-1}^{1} R(x) dx = 0 + \int_{1}^{1} R(x) dx$$

- A integral em S é zero já que S pode ser escrito como combinação linear dos $p_n(x)$, e estes são ortogonais.
- Ou seja: como QGL é exata em R, também o é para P.



• Até agora, fizemos integrais em [-1, 1].

- Até agora, fizemos integrais em [-1, 1].
- Para uma integral genérica num intervalo [a, b], basta fazer uma substituição t = (2x a b)/(b a):

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

Voltemos ao exemplo manjado

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Voltemos ao exemplo manjado

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Aplicando QGL (via transformação anterior):

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

Voltemos ao exemplo manjado

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Aplicando QGL (via transformação anterior):

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

• sendo $f(t) = \ln((t+3)/2)/2$, usando as raízes e coeficientes para n=4, obtemos 0.38629449693871

Voltemos ao exemplo manjado

$$\int_{1}^{2} \ln(x) \, \mathrm{d}x$$

Aplicando QGL (via transformação anterior):

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

- sendo $f(t) = \ln((t+3)/2)/2$, usando as raízes e coeficientes para n = 4, obtemos 0.38629449693871
- Obtemos um valor mais preciso (exato $2 \ln 2 1 \approx 0.38629436111989$) do que todos os métodos anteriores.

Apêndice

Teorema do valor médio para integrais (um dos): se f(x) é contínua em [a, b] e g(x) é integrável e não muda de sinal em [a, b], então existe c entre a e b tal que

$$\int_a^b f(x)g(x) dx = f(c) \int_a^b g(x) dx$$

Apêndice

Teorema do valor médio para integrais (um dos): se f(x) é contínua em [a, b] e g(x) é integrável e não muda de sinal em [a, b], então existe c entre a e b tal que

$$\int_a^b f(x)g(x) dx = f(c) \int_a^b g(x) dx$$

No caso particular g(x) = 1, temos o método usual para determinar o valor médio de f(x) em [a, b]:

$$\bar{f} = \frac{1}{b-a} \int_{a}^{b} f(x) \, \mathrm{d}x$$