ROTEIRO

- Introdução
- Diferenciação numérica
  - Fórmula de Euler
  - Fórmulas de três pontos
  - Derivadas de ordem superior
- Integração numérica
  - Fórmula dos trapézios
  - Fórmula de Simpson
  - Grau de precisão
- Comentários finais

Integração numérica

- O método básico para se aproximar uma integral é chamado quadratura numérica e pode ser representado pela expressão

$$\int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$$

- Os mecanismos para calcular os coeficientes a_i definem o tipo de quadratura numérica que será utilizada
- Mostraremos a seguir duas das fórmulas de quadratura mais comuns
  - Fórmula dos Trapézios,
  - Fórmula de Simpson

Integração numérica

- Utilizamos os polinômios interpolantes de Lagrange para obtermos algumas destas fórmulas de quadratura
- Seja um conjunto de pontos igualmente espaçados $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ contido no intervalo $[a,b]$. Se P_n é o polinômio interpolante de Lagrange

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L_{n,k}(x)$$

- podemos integrar P_n para obtermos a fórmula de quadratura

$$\int_a^b f(x)dx \cong \int_a^b P_n(x)dx = \int_a^b \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L_{n,k}(x) dx$$

$$= \sum_{k=0}^{n} \left[\int_a^b L_{n,k}(x) dx \right] f(x_k) = \sum_{k=0}^{n} a_k f(x_k)$$

Integração numérica

- Obtemos a fórmula de quadratura

$$\int_a^b f(x)dx \cong \sum_{k=0}^{n} a_k f(x_k) \qquad k = 0 : n$$

onde

$$a_k = \int_a^b L_{n,k}(x)dx$$

- Esta formulação geral pode ser utilizada para gerar as fórmulas de quadratura
  - $n=1$ Polinômio de Lagrange de primeira ordem, dois pontos, Fórmula dos trapézios
  - $n=2$ Polinômio de Lagrange de segunda ordem, três pontos, Fórmula de Simpson

Fórmula dos trapézios

- Sejam x_0 e x_1 dois pontos, e $x_1 = x_0 + h$
- O polinômio de Lagrange de primeira ordem que passa pelos pontos $(x_0\ ,\ f_0)$ e $(x_1\ ,\ f_1)$ é dado pela expressão

$$P_1(x) = \frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)} f(x_0) + \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)} f(x_1)$$

- A integral no intervalo $[x_0, x_1]$ pode ser aproximada pela expressão

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \cong \sum_{k=0}^{1} a_k f(x_k) = a_0 f(x_0) + a_1 f(x_1)$$

Fórmula dos trapézios

- onde

$$a_0 = \int_{x_0}^{x_1} L_{1,0}(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \frac{\left(x - x_1\right)}{\left(x_0 - x_1\right)} dx = \left. \frac{\left(x - x_1\right)^2}{2\left(x_0 - x_1\right)} \right|_{x_0}^{x_1} = \frac{h}{2}$$

$$a_1 = \int_{x_0}^{x_1} L_{1,1}(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \frac{\left(x - x_0\right)}{\left(x_1 - x_0\right)} dx = \left. \frac{\left(x - x_0\right)^2}{2\left(x_1 - x_0\right)} \right|_{x_0}^{x_1} = \frac{h}{2}$$

- Substituindo obtemos a fórmula dos trapézios

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \cong \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right]$$

Fórmula dos trapézios

- Uma cota máxima para o erro do trapézio é dado pela expressão

$$\frac{h^3}{12}M$$

- onde M é o máximo da segunda derivada no intervalo $[x_0, x_1]$

- Como obtemos a cota máxima para o erro neste caso?

$$R_n(x) = \frac{M}{(n+1)!}\prod_{k=0}^{n}(x - x_k) \qquad M = max\left[f^{(n+1)}(\xi)\right] \qquad \xi \in [a, b]$$

$$Erro = \int_a^b R_n(x)dx$$

Fórmula dos trapézios

- Cota do erro:

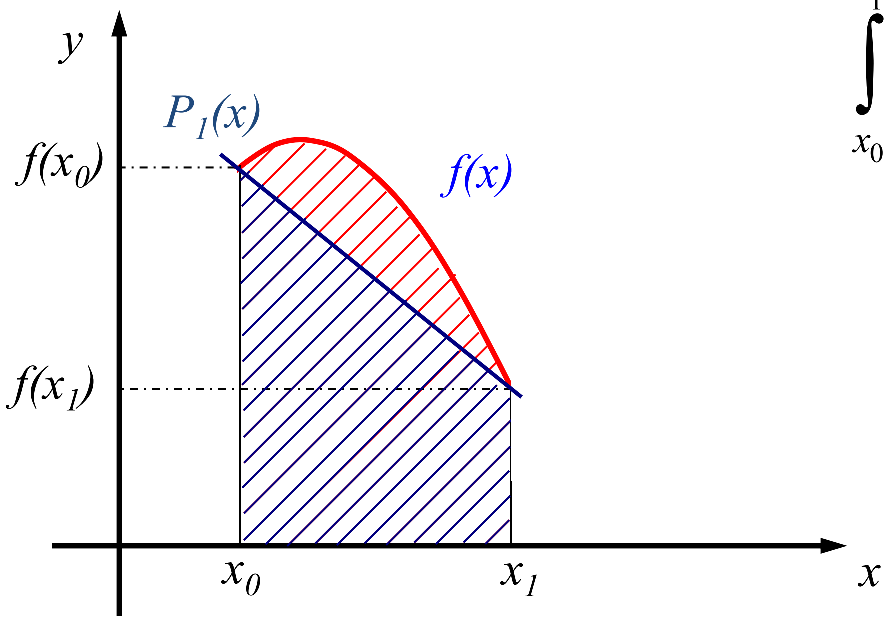
$$R_2(x) = \frac{M}{2}(x - x_0)\,(x - x_1) \qquad\qquad M = max[f''(\xi)] \qquad \xi \in [a, b]$$

$$Erro = \int_{x_0}^{x_1} R_2(x)dx = \frac{M}{2}\int_{x_0}^{x_1}(x - x_0)(x - x_1)dx = -M\frac{h^3}{12}$$

- Para funções *f(x)* polinomiais de grau inferior a 2 a regra do trapézio
  - integra exatamente a função, isto é,
  - gera resultados completamente livres de erro de truncamento

Fórmula dos trapézios

- Interpretação gráfica



$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \cong \frac{h}{2}\left[f(x_0)+f(x_1)\right]$$

$$\frac{h^3}{12}M$$

- Área do trapézio = Semi-soma das bases vezes a altura

Fórmula dos trapézios

- **Exemplo 5**: Utilize a fórmula do trapézio para calcular a integral de $f(x) = sen^2(x)$ no intervalo $[0, 1]$; obtenha um limite superior para o erro da aproximação; compare o valor aproximado com o valor exato.
  - Dados
$$f(x) = sen^2(x)$$
$$x_0 = 0$$
$$x_1 = 1$$
$$h = x_1 - x_0 = 1$$
  - Trapézios
$$\int_0^1 f(x)dx \cong \frac{h}{2}\left[f(0) + f(1)\right]$$
$$= \frac{1}{2}\left[0 + 0{,}708073\right] = 0{,}354037$$

Fórmula dos trapézios

- **Exemplo 5** . . .
  - Cota do erro

$$f(x) = sen^2(x)$$

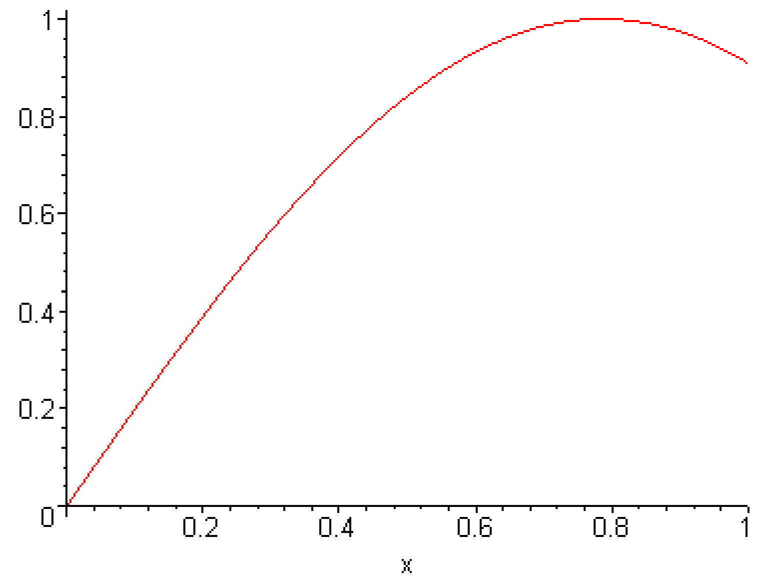
$$f'(x) = 2\cos(x)sen(x)$$

$$f''(x) = 2\left[\cos^2(x) - sen^2(x)\right]$$

$$M = 1$$

$$\frac{h^3}{12}M = 8,3333E-2$$

$f''(x)$



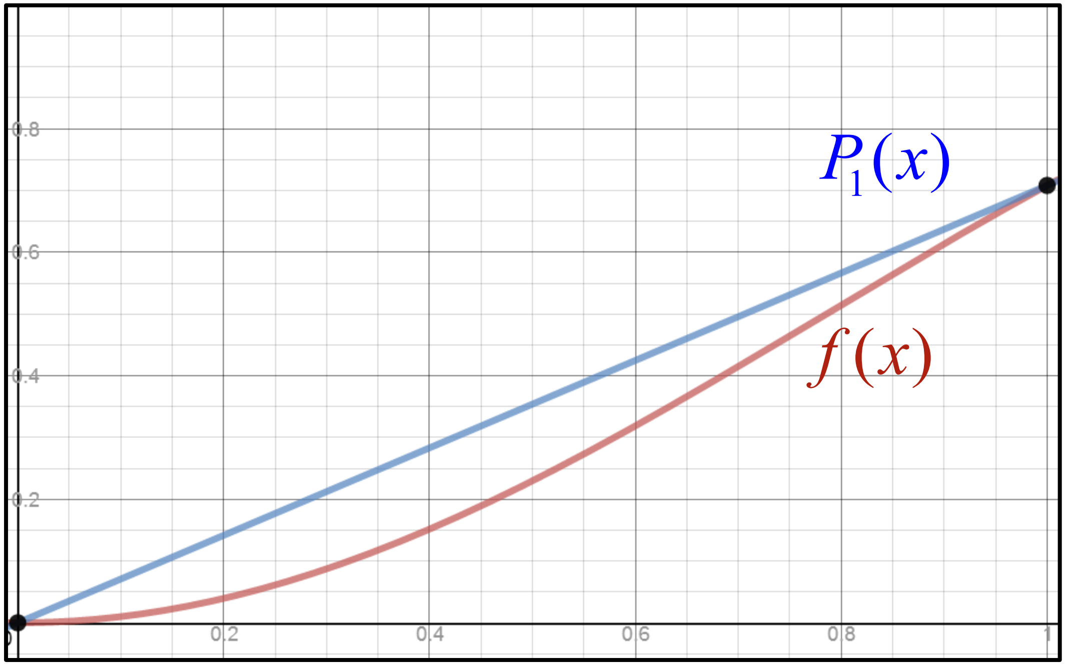
  - Valor exato e cálculo do erro

$$\int_0^1 sen^2(x)dx = -\frac{1}{4}sen(2x) + \frac{1}{2}x\Big|_0^1 = 0,272675$$

$$e_a = \left|p - p^*\right| = \left|0,272675\text{-}0,354037\right| = 8,1362E-2$$

Fórmula dos trapézios

- **Exemplo 5** . . .



- Como podemos aumentar a precisão utilizando a fórmula do trapézio no cálculo da integral anterior?
- Diminuindo o valor do h, isto é aumentado o número de pontos dentro do intervalo de integração.

Fórmula dos trapézios

- Considerando $n+1$ pontos disponíveis, temos

$$h = \frac{b-a}{n}$$

- sendo h a base dos n trapézios que serão utilizados na aproximação
- Podemos aproximar a integral como a soma da áreas de cada trapézio

$$\int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=1}^{n} A_i$$

Fórmula dos trapézios

$$x_0 = a$$

$$x_1 = a + h$$

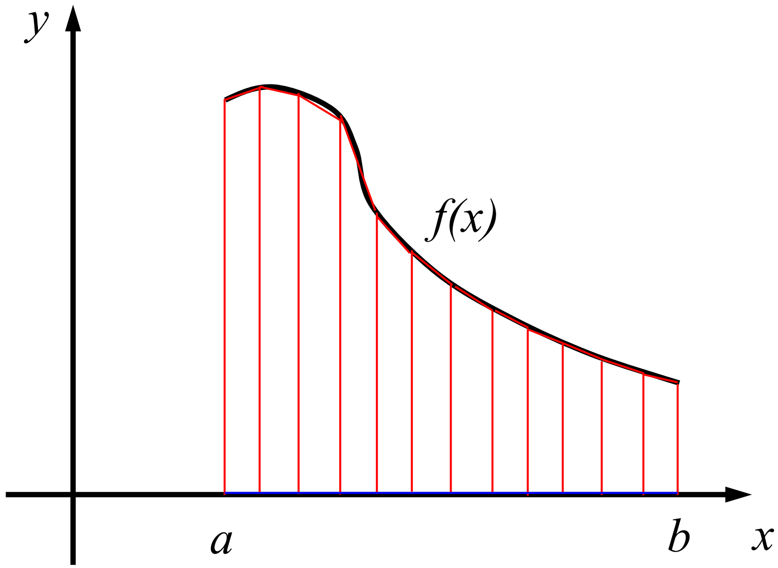
$$x_2 = x_1 + h = x_0 + 2h$$

$$\vdots$$

$$x_i = x_{i-1} + h = x_0 + ih$$

$$\vdots$$

$$x_n = b$$



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

$$= h\left[\frac{f(x_0)}{2} + \frac{f(x_n)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{n-1}) \right]$$

Fórmula dos trapézios

- Fórmula dos trapézios com $n+1$ pontos

$$\int_a^b f(x)dx \cong h\left[\frac{f(x_0)}{2}+\frac{f(x_n)}{2}+\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right]$$

- **Exemplo 6**: Utilize a fórmula do trapézio para calcular a integral de $f(x) = sen^2(x)$ no intervalo $[0, 1]$

  a) usando 3 pontos,

  b) usando 4 pontos,

  c) usando 5 pontos,

  calcule os erros absolutos de cada aproximação.

Fórmula dos trapézios

- **Exemplo 6** . . .

  a) 3 pontos

$$n = 2$$

$$h = \frac{b-a}{n} = 0,5$$

$$x_0 = a = 0$$

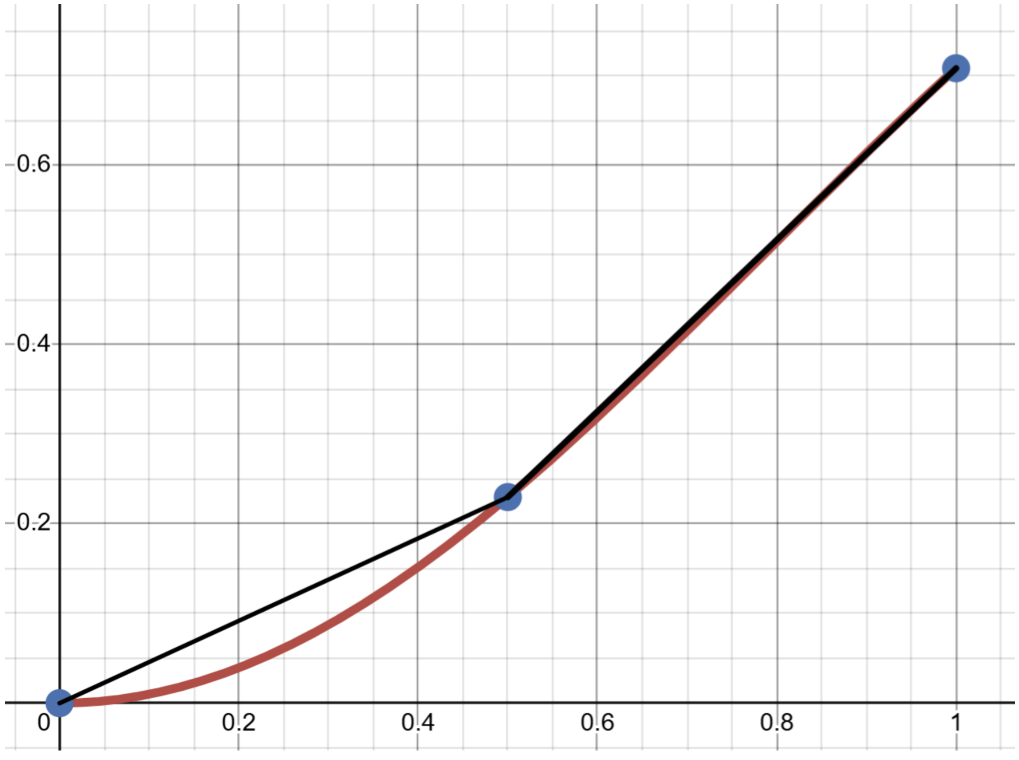
$$x_1 = x_0 + h = 0,5$$

$$x_2 = x_1 + h = b = 1$$

$$\int \cong h\left[\frac{f(x_0)}{2} + \frac{f(x_2)}{2} + f(x_1)\right]$$

$$= 0,5\left[0 + 0,354036 + 0,229849\right]$$

$$= 0,291942 \qquad e_a = 1,927E-2$$



Fórmula dos trapézios

- **Exemplo 6** . . .

  b) 4 pontos

$$\int \cong h\left[\frac{f(x_0)}{2}+\frac{f(x_3)}{2}+f(x_1)+f(x_2)\right]$$

$$=0,281156 \qquad e_a=8,483E-3$$

$$n=3$$

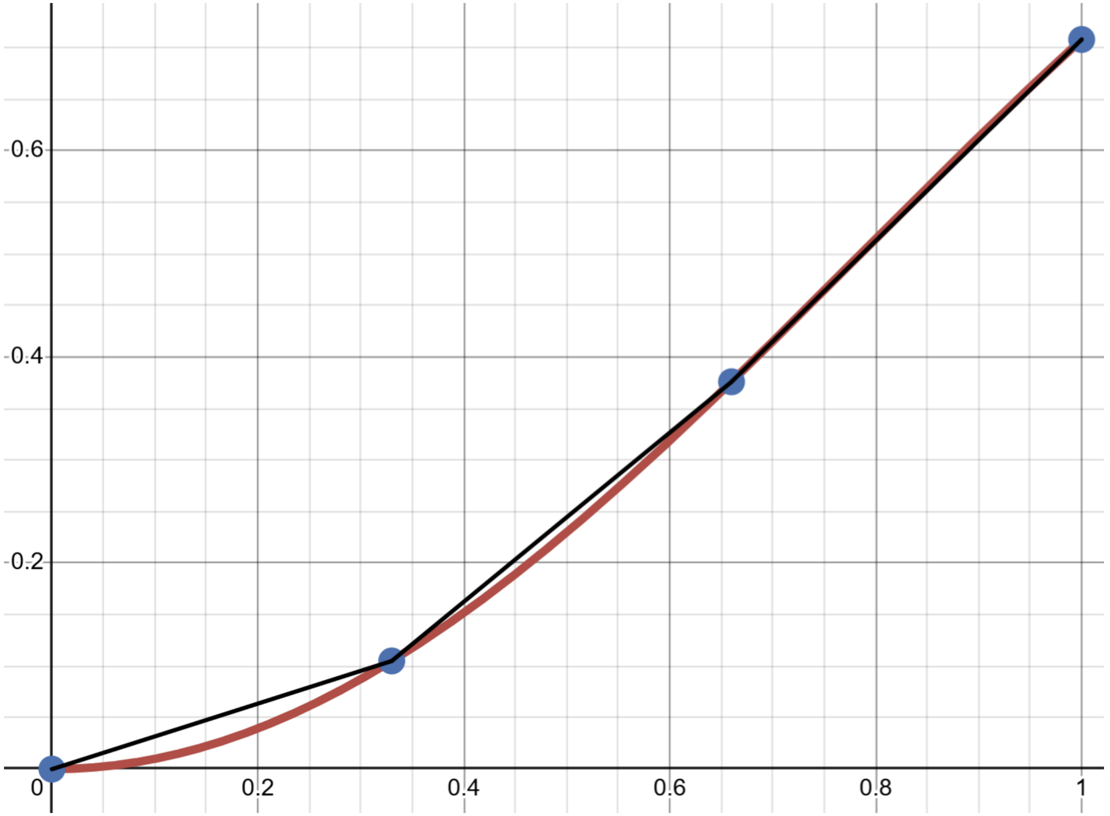
$$h=\frac{b-a}{3}=0,333333$$

$$x_0=a=0$$

$$x_1=x_0+h=0,333333$$

$$x_2=x_1+h=0,666666$$

$$x_3=x_2+h=b=1$$



Fórmula dos trapézios

- **Exemplo 6** . . .

c) 5 pontos $\int \cong h\left[\frac{f(x_0)}{2}+\frac{f(x_4)}{2}+f(x_1)+f(x_2)+f(x_3)\right]$

$= 0,277431 \qquad e_a = 4,756E-3$

$n = 4$

$h = \frac{b-a}{4} = 0,25$

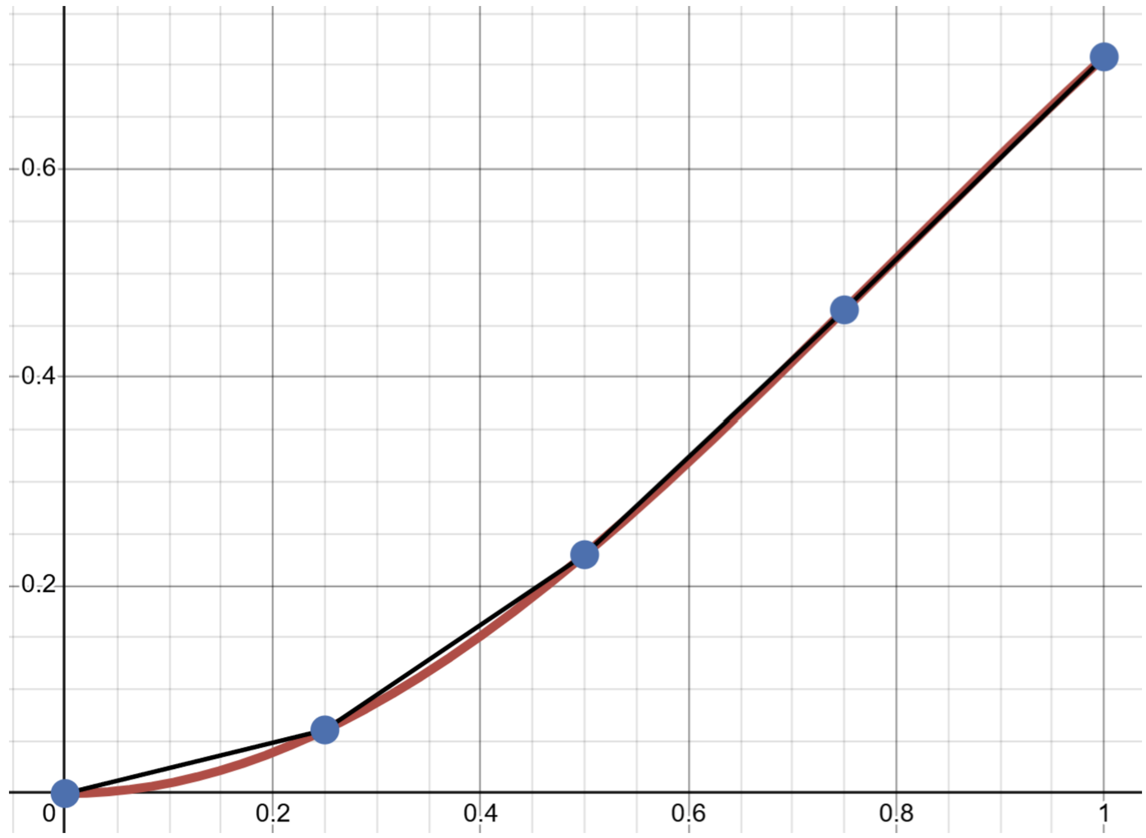
$x_0 = a = 0$

$x_1 = x_0 + h = 0,25$

$x_2 = x_1 + h = 0,50$

$x_3 = x_2 + h = 0,75$

$x_4 = x_3 + h = b = 1$



Fórmula dos trapézios

- **Exemplo 6** . . .

$$\int_0^1 sen^2(x)dx = 0,272675$$

Pontos	$\boldsymbol{n}$	$\boldsymbol{h}$	***Trapézios***	$\boldsymbol{e_a}$
2	1	1	0,354037	8,136E-2
3	2	0,5	0,291942	1,927E-2
4	3	0,3333	0,281156	8,483E-3
5	4	0,2500	0,277431	4,756E-3

  - O aumento do número de pontos aumenta a precisão
  - O erro é proporcional a h

Fórmula dos trapézios - Algoritmo

ENTRADA: $a, b, f(x), n$
SAÍDA: valor aproximado da integral

PASSO 1: h=(b-a)/n

PASSO 2: int=[f(a)+f(b)]/2

PASSO 3: x=a

PASSO 4: Para i=1:n-1 siga os passos 5-6

  PASSO 5: x=x+h

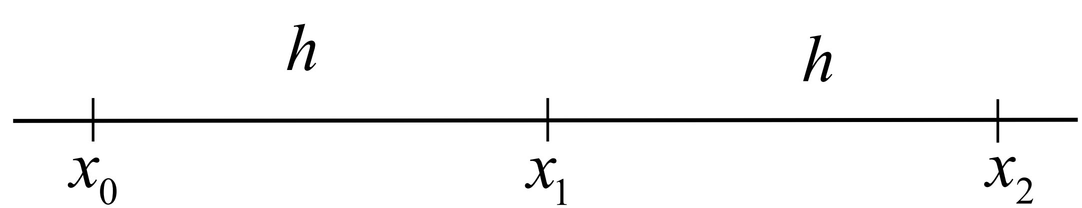
  PASSO 6: int=int+f(x)

PASSO 7: int=int*h

PASSO 8: Saída (int), FIM

Fórmula de Simpson

- A fórmula de Simpson pode ser obtida considerando o polinômio interpolante de Lagrange de segunda ordem, e calculando a integral dos coeficientes
- Para facilitar o cálculo da estimativa do erro derivamos a fórmula de Simpson utilizando o polinômio de Taylor
- Considere três pontos equidistantes x_0, x_1 e x_2 sendo $x_1 = x_0 + h$ e $x_2 = x_1 + h$



Fórmula de Simpson

- Supondo que $f(x) \in C^4\,[x_0,\ x_2]$ podemos expandir $f(x)$ em torno do ponto x_1 usando o polinômio de Taylor de terceiro grau

$$f(x) = f(x_1) + f'(x_1)\left(x - x_1\right) + f''(x_1)\frac{\left(x - x_1\right)^2}{2}$$

$$+ f'''(x_1)\frac{\left(x - x_1\right)^3}{6} + f^{(4)}(\zeta)\frac{\left(x - x_1\right)^4}{24}$$

- Podemos aproximar a integral no intervalo $[x_0,\ x_2]$ da função $f(x)$ como

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \cong f(x_1)\int_{x_0}^{x_2} dx + f'(x_1)\int_{x_0}^{x_2}\left(x - x_1\right)dx + \frac{f''(x_1)}{2}\int_{x_0}^{x_2}\left(x - x_1\right)^2 dx$$

$$+ \frac{f'''(x_1)}{6}\int_{x_0}^{x_2}\left(x - x_1\right)^3 dx + \frac{f^{(4)}(\zeta)}{24}\int_{x_0}^{x_2}\left(x - x_1\right)^4 dx$$

Fórmula de Simpson

- Resolvendo a integral

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \cong 2hf(x_1) + \frac{f''(x_1)h^3}{3} + \frac{f^{(4)}(\zeta)h^5}{60}$$

- Considerando a expressão para a segunda derivada (epígrafe anterior)

$$f''(x_1) = \frac{1}{h^2}\left[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)\right]$$

- Substituindo

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \cong \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right] + \frac{f^{(4)}(\zeta)h^5}{60}$$

Fórmula de Simpson

- Finalmente, temos a fórmula de Simpson

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \cong \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]$$

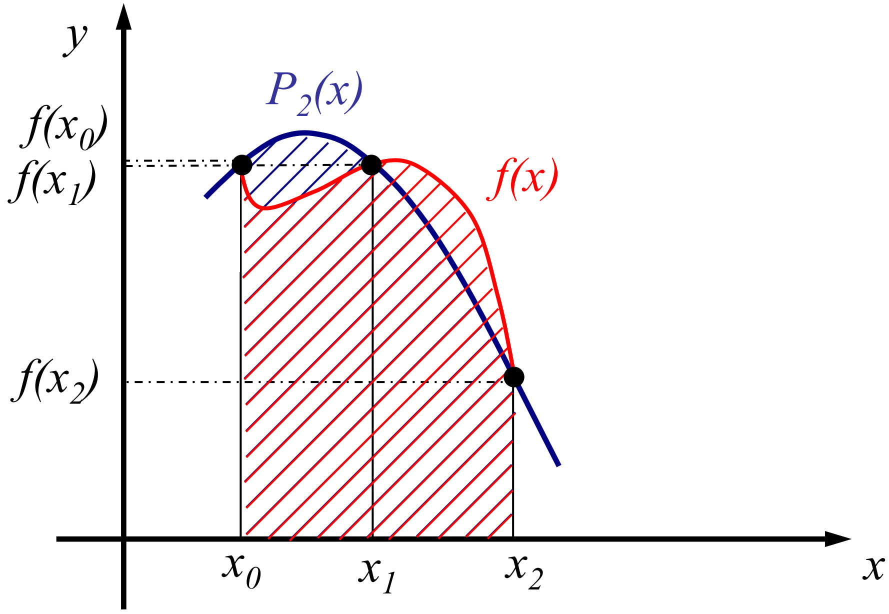
- com uma cota superior para o erro

$$\frac{h^5}{60}M$$

- onde M é o máximo da quarta derivada no intervalo $[x_0, x_2]$

Fórmula de Simpson

- Interpretação gráfica



$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \cong \frac{h}{3}\left[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\right] \qquad \frac{h^5}{60}M$$

Fórmula de Simpson

- **Exemplo 7**: Utilize a fórmula de Simpson para calcular a integral de $f(x) = sen^2(x)$ no intervalo $[0, 1]$; obtenha um limite superior para o erro da aproximação; compare o valor aproximado com o valor exato.

  – Dados

$$f(x) = sen^2(x)$$

$$x_0 = 0, \quad x_2 = 1$$

$$h = \frac{x_2 - x_0}{2} = 0.5$$

$$x_1 = 0.5$$

  – Fórmula de Simpson

$$\int_0^1 f(x)dx \cong \frac{h}{3}\left[f(0) + 4f(0,5) + f(1)\right]$$

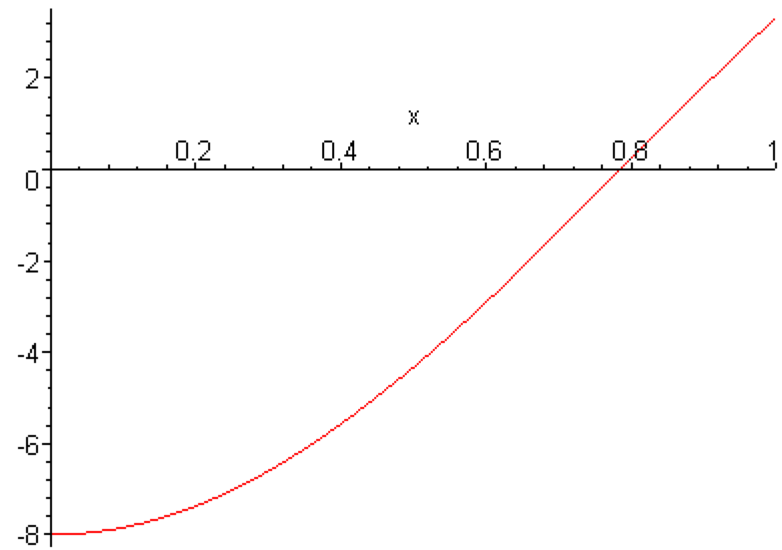
$$= \frac{0.5}{3}\left[0 + 4(0,22984) + 0,70807\right]$$

$$= 0,271245$$

Fórmula de Simpson

- **Exemplo 7** . . .
  - Cota de erro e erro absoluto

$$f^{(4)}(x)$$



$$f(x) = sen^2(x)$$

$$f'(x) = 2\cos(x)sen(x)$$

$$f''(x) = 2\left[\cos^2(x) - sen^2(x)\right]$$

$$f'''(x) = -8\cos(x)sen(x)$$

$$f^{(4)}(x) = 8\left[sen^2(x) - \cos^2(x)\right]$$

$$M = -8$$

$$\frac{h^5}{60}M = 4,1667E-3$$

$$p = \int_0^1 sen^2(x)dx = 0,272675$$

$$e_a = \left|p - p_{Simp}\right| = 1,4321E-3$$

Fórmula de Simpson

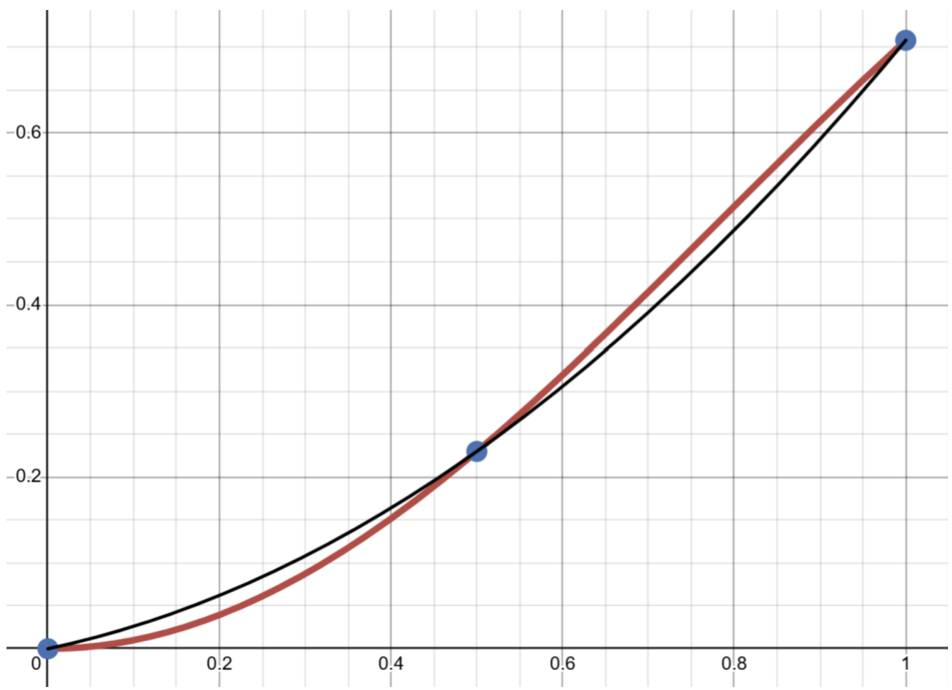
- **Exemplo 7** . . .

$$\int_0^1 f(x)\,dx \cong 0{,}271245$$

$$p = \int_0^1 sen^2(x)dx = 0{,}272675$$

$$\frac{h^5}{60}M = 4{,}1667E-3$$

$$e_a = \left| p - p_{Simp} \right| = 1{,}4321E-3$$



- Como podemos diminuir o erro no cálculo da integral?

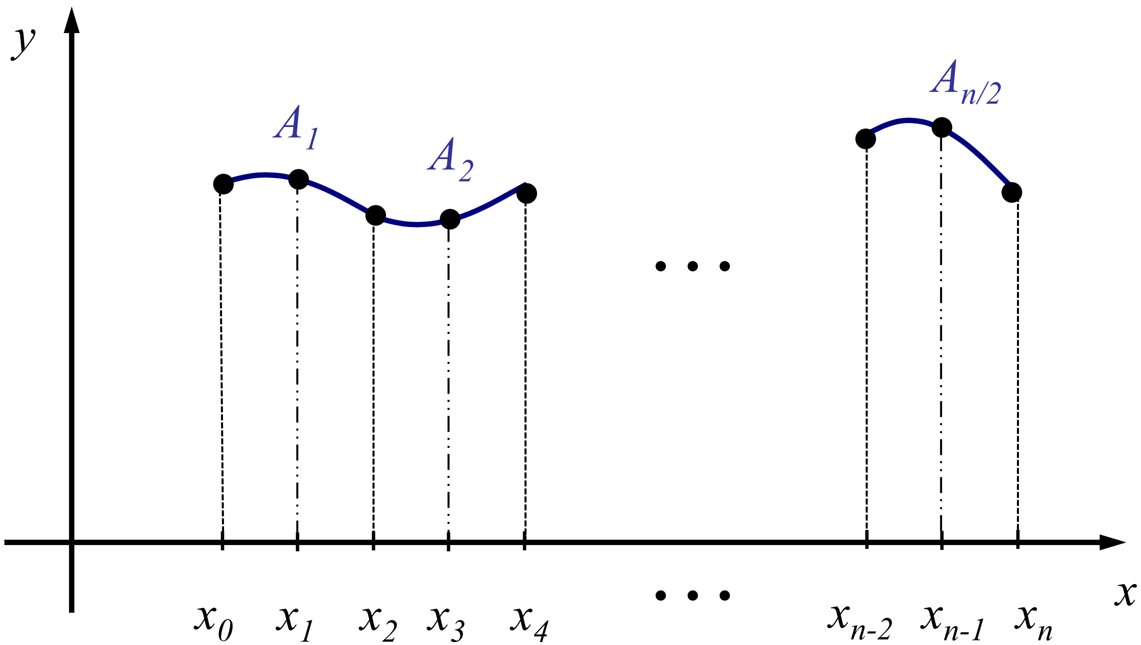
Fórmula de Simpson

- O erro da fórmula de Simpson é proporcional ao h
- Podemos aumentar a precisão da fórmula incrementando o número de pontos (diminuir h)
- E considerando interpolação polinomial por partes
- A fórmula de Simpson utiliza um polinômio de segunda ordem (3 pontos)
- O número total de pontos para calcular a integral deve ser **impar**
- Mostrar gráfico (quadro)

Fórmula de Simpson

- Considerando $(n+1)$ pontos (n par) no intervalo fechado $[a, b]$, teremos

$$x_0 = a$$
$$x_1 = x_0 + h$$
$$\vdots$$
$$x_i = x_{i-1} + h = x_0 + ih$$
$$\vdots$$
$$x_n = b$$



- Podemos aproximar a integral por

$$\int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=1}^{n/2} A_i$$

Fórmula de Simpson

- A área de cada parábola A_i com $i=1:n/2$ calcula-se

$$A_i = \frac{h}{3}\left[\left(f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i}\right)\right]$$

- Somando todos os valores de A_i

$$\sum_{i=1}^{n/2} A_i = \sum_{i=1}^{n/2}\left\{\frac{h}{3}\left[\left(f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i}\right)\right]\right\}$$

$$= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right]$$

- Finalmente a fórmula de Simpson com $(n+1)$ pontos

$$\int_a^b f(x)dx \cong \frac{h}{3}\left[f(x_0) + f(x_n) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f\left(x_{2i-1}\right) + 2\sum_{i=1}^{n/2-1} f\left(x_{2i}\right)\right]$$

Fórmula de Simpson

- **Exemplo 8**: Utilize a fórmula de Simpson para calcular a integral de *f(x) = sen²(x)* no intervalo *[0, 1]* usando 5 pontos, calcule o erro absoluto.
  - Dados

$$n = 4 \qquad h = \frac{b-a}{n} = 0.25$$

$$x_0 = 0 \qquad x_1 = x_0 + h = 0.25 \qquad x_2 = x_1 + h = 0.50$$

$$x_3 = x_2 + h = 0.75 \qquad x_4 = x_3 + h = b = 1.00$$

  - Cálculo da estimativa e erro

$$\int_0^1 f(x)dx \cong \frac{h}{3}\left[f(x_0) + f(x_4) + 4f(x_1) + 4f(x_3) + 2f(x_2)\right]$$

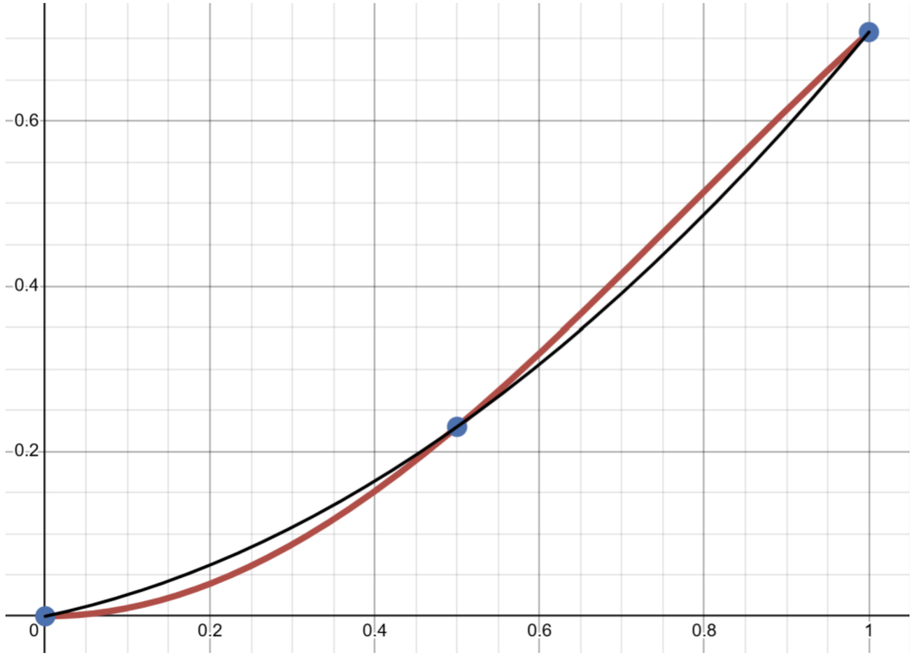
$$= \frac{0,25}{3}\left[0 + 0,708073 + 0,244835 + 1,858526 + 0,459698\right]$$

$$= 0,272594 \qquad e_a = 8,0692E-5$$

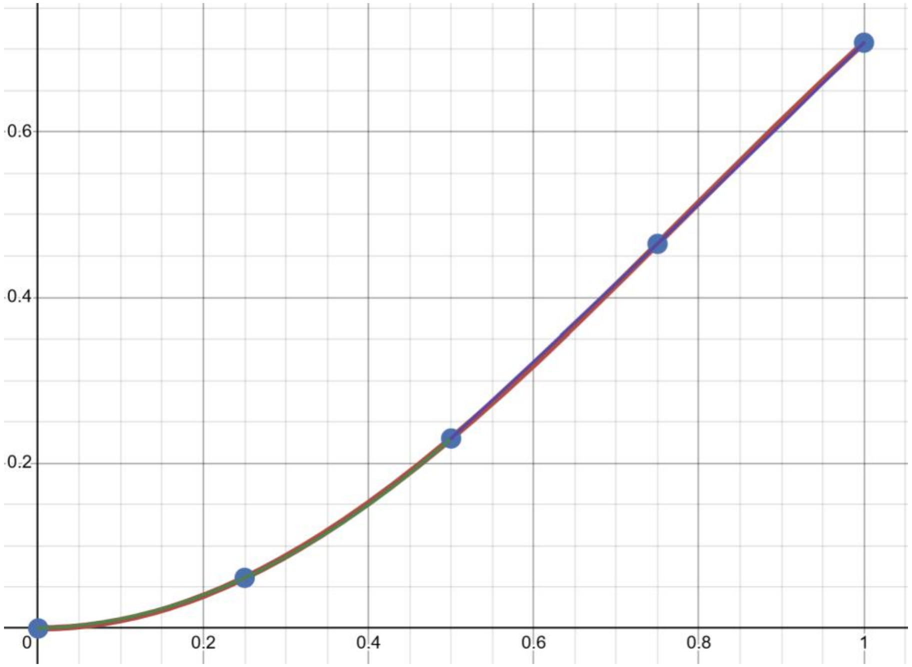
Fórmula de Simpson

- **Exemplo 8 ...**

3 pontos



5 pontos



Fórmula de Simpson

- **Exemplo 8** . . .
  - Trapézio vs Simpson

	Trapézio		*Simpson*	
Pontos	*Integral*	e_a	*Integral*	e_a
2	0.354037	8.136E-2	-	-
3	0.291942	1.927E-2	0.271245	1.4321E-3
4	0.281156	8.483E-3	-	-
5	0.277431	4.756E-3	0.272594	8.692E-5

- A fórmula de Simpson apresenta maior precisão para o mesmo número de pontos. Porque?

Fórmula de Simpson - Algoritmo

ENTRADA: *a, b, f(x), n (par)*
SAÍDA: valor aproximado da integral

PASSO 1: h=(b-a)/n
PASSO 2: int=[f(a)+f(b)]
PASSO 3: x=a-h, som=0
PASSO 4: Para i=1:n/2 [5-6]
  PASSO 5: x=x+2*h
  PASSO 6: som=som+f(x)
PASSO 7: int=int+4*som

PASSO 8: x=a, som=0
PASSO 9: Para i=1:n/2-1 [10-11]
  PASSO 10: x=x+2*h
  PASSO 11: som=som+f(x)
PASSO 12: int=int+2*som
PASSO 13: int=int*h/3
PASSO 14: Saída (int), FIM

Integração numérica

- **Grau de precisão**
- **Definição**: O grau de precisão de uma fórmula de quadratura é o inteiro positivo m tal que o resíduo da aproximação $R(P_k)=0$ para todos os polinômios P_k de grau inferior ou igual a m, ademais $R(P_{m+1})\neq 0$.

- O grau de precisão da fórmula de trapézios é 1
- O grau de precisão da fórmula de Simpson é 2

ROTEIRO

- Introdução
- Diferenciação numérica
  - Fórmula de Euler
  - Fórmulas de três pontos
  - Derivadas de ordem superior
- Integração numérica
  - Fórmula dos trapézios
  - Fórmula de Simpson
  - Grau de precisão
- Comentários finais

Comentários finais

- Problemas de derivação e integração numérica aparecem em diversas aplicações
  - Derivadas: discretização de equações diferenciais
  - Integrais: problemas sem solução analítica
- Baseiam-se em aproximações polinomiais
- Diferenciação numérica
  - Fórmulas de Euler (diferenças avançadas/recuadas)
  - Fórmulas de três pontos
    - Centradas
    - Laterais (Direita e esquerda)
  - Taylor para segunda derivada
  - Erros proporcionais ao passo (h)

Comentários finais

- Alternativas mais precisas para diferenciação
  - Fórmulas de 5 pontos
  - Extrapolação de Richardson
- Integração numérica
  - Fórmula dos trapézios (polinômio primeira ordem)
  - Fórmula de Simpson (polinômio segunda ordem)
  - Aproximação polinomial por partes
  - Erros proporcionais ao h, ou numero de pontos
- Alternativas mais precisas para integração
  - Fórmula de Romberg
  - Quadratura de Gauss