Lab 6: Derivação e Integração Numéricas

INF1608 – Análise Numérica

Leonardo Quatrin Campagnolo

lquatrin@tecgraf.puc-rio.br

Departamento de Informática, PUC-Rio

26 de setembro de 2024

1. Escreva um módulo com as seguintes funções de derivação e integração:

   (a) A fórmula do método de *segunda ordem* para avaliação numérica da derivada de uma função $f(x)$ é dada por:

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

   Implemente uma função que retorne o valor da derivada numérica de uma função no ponto x, com passo h, tendo como base o método de segunda ordem. O protótipo deve ser:

   ```
   double derivada (double (*f) (double x), double x, double h);
   ```

   (b) A integração com a regra de Simpson no intervalo $[a, b]$ pode ser expressa por:

   $$\int_a^b f(x)dx \approx S_{[a,b]} = \frac{h}{6}\left[f(a) + 4f\left(a + \frac{h}{2}\right) + f(a+h)\right], \quad h = b - a$$

   Implemente uma função que calcule a **integral composta** do intervalo de a a b considerando n passos de integração, isto é, considerando $h = (b-a)/n$. O protótipo da função deve ser:

   ```
   double simpson (double (*f) (double), double a, double b, int n);
   ```

   (c) A partir da Regra de Simpson, podemos implementar a integração adaptativa, onde o erro é dado por:

   $$E_{[a,c]} + E_{[c,b]} = \frac{E_{[a,b]}}{16}, \quad c = \frac{a+b}{2}, \quad E_{[a,b]} = \frac{h^5}{2^5}\frac{1}{90}f^{iv}(c)$$

   Podemos então escrever a seguinte relação utilizando a aproximação de uma integral pela Regra de Simpson:

   $$\int_a^b f(x)dx = S_{[a,b]} - E_{[a,b]} = S_{[a,c]} + S_{[c,b]} - \frac{E_{[a,b]}}{16}$$

   $$\left|S_{[a,b]} - (S_{[a,c]} + S_{[c,b]})\right| = 15\frac{E_{[a,b]}}{16} = 15(E_{[a,c]} + E_{[c,b]})$$

A avaliação de $S_{[a,b]} - (S_{[a,c]} + S_{[c,b]})$ nos fornece um valor 15 vezes maior que o erro de $S_{[a,c]} + S_{[c,b]}$. Com isso, podemos implementar um procedimento para realizar Integração de Simpson Adaptativa. Tentamos integrar o intervalo de a a b em um passo e em dois semi-passos, avaliando a diferença $\Delta = \left|S_{[a,b]} - S_{[a,c]} - S_{[c,b]}\right|$. Se esta diferença for menor que 15 vezes a tolerância adotada, podemos assumir o valor $S_{[a,c]} + S_{[c,b]} - \frac{\Delta}{15}$ como resultado da integral; senão, dividimos o intervalo em 2 e repetimos o processo, avaliando as integrais e suas respectivas diferenças nos sub-intervalos. Para cada sub-intervalo, a tolerância deve ser reduzida à metade, a fim de garantir que o erro total esteja dentro da tolerância original.

Implemente uma função para Integração por Simpson Adaptativa. Sua função deve receber o intervalo de integração, a função e a tolerância de erro desejada, e retornar o valor total da integração no intervalo dentro da tolerância, seguindo o protótipo:

```
double simpsonadaptativo (double (*f) (double), double a, double b,
                          double tol);
```

Não se preocupe em otimizar o número de avaliações. Você pode utilizar a versão de simpson composta (feito na questão anterior) para facilitar a implementação.

(d) Para finalizar, vimos a Quadratura de Gauss como uma forma de calcular integrais a partir de um somatório com pesos multiplicados pelas avaliação de uma função em pontos específicos dentro do intervalo de integração:

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

A partir disso, implemente um método que calcula a integral de uma função a partir da quadratura de gauss, utilizando 2 pontos de avaliação (i.e. n = 2):

$$\int_a^b f(x)dx \approx \left(c_0 f\left(x_0\frac{h}{2} + m\right) + c_1 f\left(x_1\frac{h}{2} + m\right)\right)\frac{h}{2}, \quad m = \frac{a+b}{2}$$

A função deve seguir o protótipo:

```
double quadraturagauss2 (double (*f) (double), double a, double b);
```

2. No arquivo main.c, alguns testes foram feitos utilizando as implementações feitas na questão 1. A partir disso, verifique:

(a) Para testar a função que avalia a derivação numérica, foram consideradas as funções [1] $f(x) = \cos x - 2\sin x$, cuja derivada analítica é $f'(x) = -\sin x - 2\cos x$, e [2] $f(x) = e^x$, cuja derivada analítica é $f'(x) = e^x$. Verifique o resultado do método numérico para diferentes passos h, considerando $x = 0$. Compare os valores obtidos com o valor da derivada analítica. Valores de h menores tendem a resultar em derivadas mais precisas? Podemos reduzir arbitrariamente o valor de h?

(b) Para testar a Regra de Simpson, foi feito um teste utilizando $n = 16$ e $n = 32$ subintervalos para achar as soluções das integrais abaixo. Também foi feito o teste utilizando as mesma integrais para o método de integração adaptativa, variando a tolerância de 10^{-1} até 10^{-12}:

$$\int_0^4 \frac{x}{\sqrt{x^2+9}}dx \qquad \int_0^{\pi} x^2 \sin x \, dx \qquad \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^3 e^{-x^2}\, dx \qquad \int_0^{\pi/2} \ln(\cos x + \sin x)\, dx$$

Para verificação, os valores dessas integrais são, respectivamente, 2.0, 5.8696044010894 e 0.9999779095030014 e 0.3715690716013184. O número de amostras influencia na precisão do resultado? O método adaptativo respeitou a tolerância imposta?

(c) Por fim, foi feito um teste comparando a quadratura de gauss com $n = 2$ e a Regra de Simpson com apenas 1 intervalo, utilizando a integral abaixo:

$$\int_{-3}^{0} x + 3x^2 + x^3 dx$$

O valor dessa integral é igual a 2.25. Verique o resultado a integral, os resultados ficaram semelhantes?

Essa questão NÃO faz parte da avaliação do laboratório e já está implementada no arquivo main.c. Utilize-a como uma forma de verificar os resultados obtidos.

Entrega: Agrupe os protótipos das funções pedidas em um módulo "derivadaintegral.h" e as implementações em um módulo "derivadaintegral.c". O código fonte deste trabalho deve ser enviado via página da disciplina no EAD até às 14 horas do dia 26/9. O sistema receberá trabalhos com atraso até o final do dia (com perda de 1 ponto na avaliação).