

CENTRO UNIVERSITÁRIO FEI

VICTOR BIAZON

RA: 119.115-4

**RELATÓRIO V – PROGRAMAÇÃO CIENTÍFICA
INTEGRAL NUMÉRICA**

SÃO BERNARDO DO CAMPO

2019

VICTOR BIAZON

RA: 119.115-4

**RELATÓRIO V – PROGRAMAÇÃO CIENTIFICA
INTEGRAL NUMÉRICA**

Relatório de desenvolvimento do algoritmos cálculo da integral numérica de funções, desenvolvido pelo aluno Victor Biazon, RA 119.115-4, para disciplina PEL216 – Programação Cientifica, ministrada pelo professor Reinaldo Bianchi.

São Bernardo do Campo

2019

Sumário:

Motivação4

Objetivo:4

Teoria.....5

Implementação.....6

Pseudo-código – Descida de Gradiente9

Experimentos e resultados9

Trabalhos correlatos12

Conclusão14

Referências bibliográficas.....15

Motivação

Implementação de algoritmo para calcular numericamente o valor da integral de funções matemáticas em um intervalo definido.

Objetivo:

Desenvolver o algoritmo que calcula a integral numérica de funções no intervalo pelos métodos de aproximação pelas regras do ponto médio, dos trapézios e de Simpson, bem como pelo método da quadratura adaptativa, e calcular os erros máximos esperados para cada método com as fórmulas de Newton-Cotes.

Teoria

Integrais numéricas e simbólicas

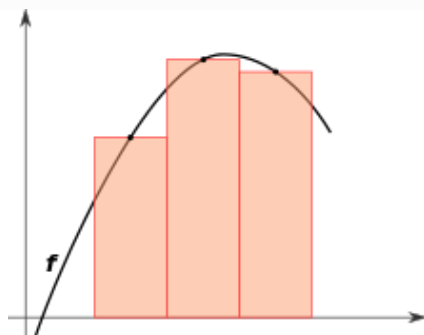
Integrais de funções se tratam de calcular a área sob a curva de uma função, esta área pode representar diversas grandezas como por exemplo a integral da função da velocidade de um corpo no tempo é equivalente ao espaço percorrido por tal corpo. Por definição analítica a integral de uma função tratasse de uma soma contínua da área de retângulos de altura igual ao valor da função naquele ponto multiplicados por uma largura infinitesimal. São comuns duas denominações: integrais definidas, as quais analisam o valor de uma área sob uma função em um intervalo definido, e integrais indefinidas, que representam simbolicamente a taxa de crescimento da área de uma função. Existem também integrais de duas ou mais variáveis para funções compostas que representam outros tipos de grandezas como volume, ou objetos mais abstratos.

Integrais por métodos numéricos tratam-se de realizar a aproximação dos valores utilizando aproximações matemáticas recursivas ou não, e aplicando ao intervalo desejado retorna valores muito próximos do que seria resultado de uma análise mais formal e simbólica.

Existem diversas formas de se aproximar integrais numericamente, sendo as mais comuns:

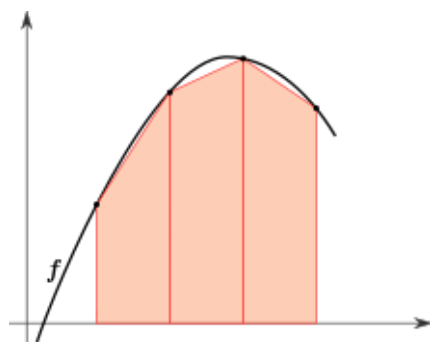
A regra dos pontos médios, que considera retângulos com altura igual ao ponto médio do intervalo de integração e largura igual ao intervalo (para um intervalo), a regra dos trapézios, que calcula a aproximação utilizando a fórmula da área de um trapézio com largura igual ao intervalo de integração e seus lados com a altura dos pontos limites do intervalo, e a regra de Simpson que é mais elaborada para aproximações das integrais pois considera uma média ponderada entre os pontos de altura da área a ser aproximada com limites da integração numérica.

Regra do Ponto Médio ou dos retângulos.



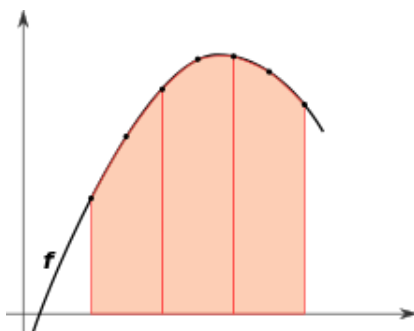
$$\int_a^b f(x)dx \simeq (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

Regra dos trapézios.



$$\int_a^b f(x)dx \simeq (b-a) \frac{f(a) + f(b)}{2}$$

Regra de Simpson.



$$\int_a^b f(x)dx \simeq (b-a) \frac{f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)}{6}$$

Formulas de Newton-Cotes Fechadas

As fórmulas de Newton-Cotes Fechadas servem para se calcular o erro da aproximação realizada pelos métodos supracitados.

São elas:

$$\frac{(b-a)^3}{24} f^{(2)}(\xi)$$

Para a regra dos pontos-médios.

$$-\frac{(b-a)^3}{12} f^{(2)}(\xi)$$

Para a regra dos trapézios.

$$-\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi)$$

Para a regra de Simpson.

Pode-se notar uma característica interessante destas fórmulas, nas quais para as primeiras duas, o erro é zero caso o polinômio seja de menor que segundo grau, e para a regra de Simpson a aproximação é exata para polinômios menores que o quarto grau, pois o resultado da derivada quarta da função é zero.

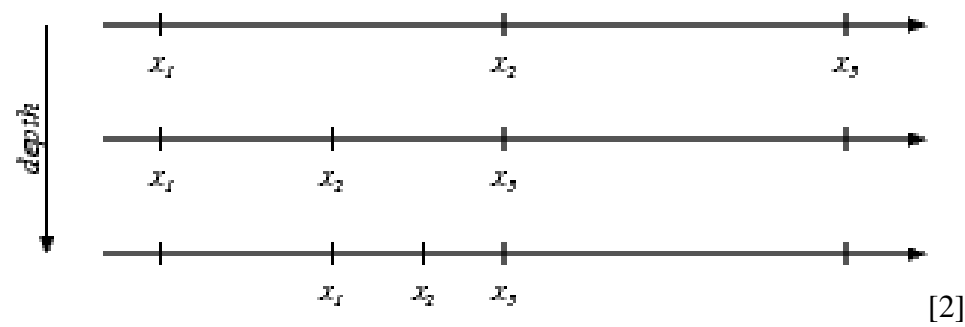
Imagens e fórmulas retiradas da apresentação de aula do Prof. Reinaldo Bianchi da FEI, bibliografia utilizada mencionada no fim deste relatório. [1]

Quadratura Adaptativa

A quadratura adaptativa trata-se de utilizar uma recursão na divisão dos intervalos de aproximação da integração de forma a se diminuir o erro. Desta forma mesmo para funções com complexidade elevada e alterações bruscas e seu formato, como funções não lineares, é possível se aproximar com a precisão desejada no próprio algoritmo a área de uma função em um determinado intervalo.

Para determinar os intervalos de integração, o algoritmo inicia realizando uma aproximação, geralmente a de Simpson, e verifica se o erro de aproximação é menor que o desejado, e em caso negativo, realiza a divisão do intervalo no ponto médio aproximando a função novamente para estes dois intervalos e somando o resultado, desta forma tendendo a diminuição do erro. Quando o erro de aproximação é menor que o desejado o algoritmo retorna o valor da integração.

Abaixo uma representação da divisão dos intervalos:



Implementação

Para o cálculo simples das aproximações de pelos métodos do ponto-médio (retangular), trapézios e Simpson, bem como o cálculo dos erros de aproximação não foi desenvolvido pseudocódigo por se tratar apenas da aplicação das formulas apresentadas na seção anterior.

Pseudo-código – Quadratura Adaptativa

```
QuadraturaAdaptativa(a, b, erro) { //aproximação pelo método da quadratura adaptativa, sendo a o início do intervalo, b sendo o final e erro sendo o valor desejado de precisão.

    Q = Simpson(a, b); //calcula a aproximação pelo método de Simpson
    erroQ = SimpsonErro(a, b); //calcula o erro da aproximação

    se (abs(erroQ) > erro) //Verifica se o erro atual da aproximação é menor que o erro desejado, se for maior executa
    {
        pm = (a + b) / 2; //encontra ponto médio entre os dois intervalos de integração
        Q1 = QuadraturaAdaptativa(a, pm, erro); //calcula aproximação do primeiro intervalo até o ponto médio
        Q2 = QuadraturaAdaptativa(pm, b, erro); //calcula aproximação do ponto médio até o segundo intervalo
        Q = Q1 + Q2; //soma aproximações parciais
    }
    Retorna Q; //retorna valor da aproximação
}
```

Experimentos e resultados

Para testar os algoritmos foram propostas três funções mencionadas abaixo, todas com intervalos de integração de 0 a 1:

$$\int_0^1 e^x dx \quad \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx \quad \int_0^1 e^{-x^2} dx$$

Para a primeira função os resultados foram os seguintes:

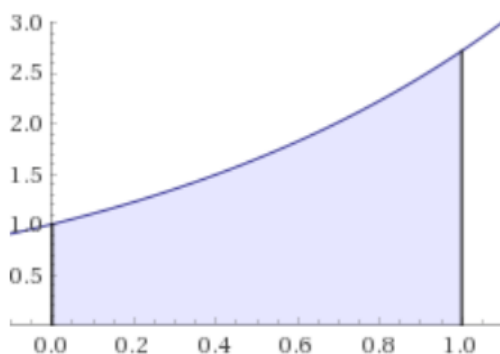
```
Para a funcao e^x o calculos resultam em:  
Metodo 1(retangular): 1.64872  
Erro 1: -0.0686967  
Metodo 2(trapezios): 1.85914  
Erro 2: -0.137393  
Metodo 3(Simpson): 1.71886  
Erro 3: -0.000572473  
Metodo 4(quadratura adaptativa) :1.71828
```

Pode-se notar abaixo que o valor extraído da função pela análise simbólica foi aproximadamente igual ao encontrado pela quadratura adaptativa, evidenciando a efetividade da mesma. Mesmo para aproximações mais grosseiras como a dos pontos médios o valor encontrado foi satisfatório.

Definite integral:

$$\int_0^1 e^x dx = e - 1 \approx 1.7183$$

Visual representation of the integral:



Como referência abaixo estão derivadas de segunda e quarta ordem da função em questão:

$$\frac{d^2}{dx^2}(e^x) = e^x \quad \frac{d^4}{dx^4}(e^x) = e^x$$

Para a segunda função os resultados foram os seguintes:

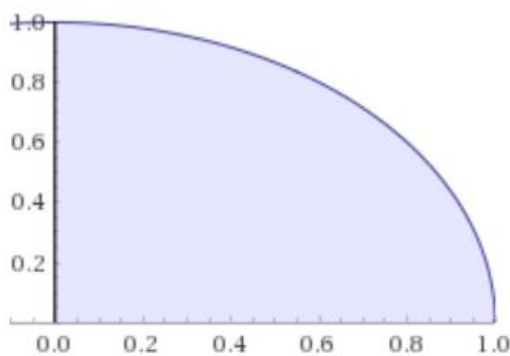
```
Para a funcao sqrt(1-x^2) o calculos resultam em:
Metodo 1(retangular): 0.866025
Erro 1: 0.0555556
Metodo 2(trapezios): 0.5
Erro 2: 0.111111
Metodo 3(Simpson): 0.744017
Erro 3: -0.00142747
Metodo 4(quadratura adaptativa) :0.785394
```

Pode-se notar que a quadratura adaptativa novamente teve precisão excelente em relação ao valor esperado pela análise simbólica abaixo. No entanto o método dos trapézios teve um erro consideravelmente grande, devido a geometria da curva neste intervalo.

Definite integral:

$$\int_0^1 \sqrt{1-x^2} \, dx = \frac{\pi}{4} \approx 0.78540$$

Visual representation of the integral:



Como referência abaixo estão derivadas de segunda e quarta ordem da função em questão:

$$\frac{d^2}{dx^2}(\sqrt{1-x^2}) = -\frac{1}{(1-x^2)^{3/2}} \quad \frac{d^4}{dx^4}(\sqrt{1-x^2}) = -\frac{12x^2+3}{(1-x^2)^{7/2}}$$

Para a terceira função os resultados foram os seguintes:

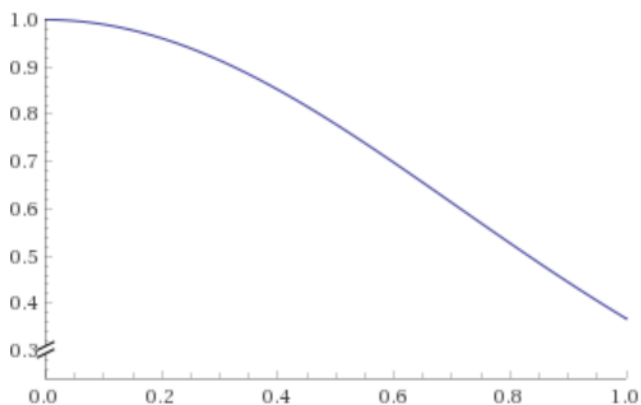
```
Para a funcao e^(-x^2) o calculos resultam em:  
Metodo 1(retangular): 0.778801  
Erro 1: 0.03245  
Metodo 2(trapezios): 0.68394  
Erro 2: 0.0649001  
Metodo 3(Simpson): 0.74718  
Erro 3: -0.000270417  
Metodo 4(quadratura adaptativa) :0.746824
```

Novamente a quadratura adaptativa obteve resultados excelentes, e podemos observar que novamente a regra dos trapézios foi a que resultou em um maior erro.

Definite integral:

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(1) \approx \underline{0.746824}$$

Plot:



Como referência abaixo estão derivadas de segunda e quarta ordem da função em questão:

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(e^{-x^2} \right) = e^{-x^2} (4x^2 - 2) \quad \frac{d^4}{dx^4} \left(e^{-x^2} \right) = \underline{4 e^{-x^2} (4x^4 - 12x^2 + 3)}$$

Trabalhos correlatos

Quadrature-based features for kernel approximation

Marina Munkhoeva Yermek Kapushev Evgeny Burnae Ivan Oseledets

https://www.researchgate.net/publication/323142218_Quadrature-based_features_for_kernel_approximation

A new numerical approach to solve Thomas–Fermi model of an atom using bio-inspired heuristics integrated with sequential quadratic programming

Muhammad Asif Zahoor Raja

Aneela Zameer

Aziz Ullah Khan

Abdul Majid Wazwaz

<https://link.springer.com/article/10.1186/s40064-016-3093-5>

Conclusão

Com estes experimentos e resultados podemos concluir que para sistemas onde a extração de uma função seja demasiado complicada pode-se aproximar numericamente a integral das curvas para ainda assim ter um resultado confiável.

Foi visto que os métodos mais confiáveis são os que utilizam o método de Simpson e que o algoritmo da quadratura adaptativa prove uma forma de se aproximar com precisão igualável a solução formal e analítica uma solução para a integral de uma função qualquer.

É necessário salientar que os métodos dos pontos médios e dos trapézios podem sofrer com grandes variações nos erros devido ao formato de uma função devido a considerarem “retas” ligando os intervalos de integração, devendo ser utilizados com cautela.

Referências bibliográficas

- [1] [Numerical Recipes in C – Capítulo 4](#)
[Applied Numerical Methods – Capítulo 19](#)
[http://pt.wikipedia.org/wiki/Integração numérica](http://pt.wikipedia.org/wiki/Integração_numérica)
[http://en.wikipedia.org/wiki/Numerical integration](http://en.wikipedia.org/wiki/Numerical_integration)

- [2] [https://en.wikipedia.org/wiki/Adaptive quadrature](https://en.wikipedia.org/wiki/Adaptive_quadrature)
- [3] <https://www.wolframalpha.com/input/?i=x%5E2>
- [4] <https://www.wolframalpha.com/input/?i=x%5E3-2x%5E2%2B2>