Integração Numérica

Prof. Wagner H. Bonat

Universidade Federal do Paraná
Departamento de Estatística
Laboratório de Estatística e Geoinformação

Sumário

Integração numérica

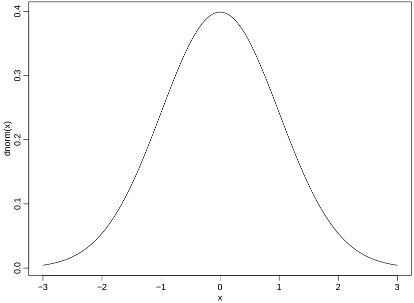
- Integrais aparecem com frequência em cálculo de probabilidades.
- A probabilidade de um evento é a área abaixo de uma curva.
- Em modelos complicados a integral pode não ter solução analítica.
- Os métodos de integração numérica, podem ser dividos em três grupos:
  1. Métodos baseados em soma finita.
  2. Aproximar a função por uma outra de fácil integração.
  3. Estimar o valor da integral.

Integração numérica

- Considere a distribuição Gaussiana com função densidade probabilidade dada por

$$f(x;\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right).$$

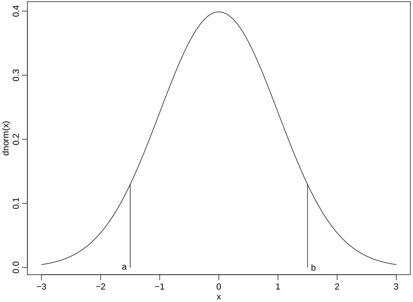
- Gráfico da função



Integração numérica

- O cálculo de uma probabilidade qualquer baseado nesta distribuição é dado pela seguinte integral

$$P(a < x < b) = \int_a^b \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right) dx.$$



Sumário

Integração numérica: Método Trapezoidal

- Usa uma função linear para aproximar o integrando.
- O integrando pode ser aproximado por Série de Taylor

$$f(x) \approx f(a) + (x-a)\left[\frac{f(b)-f(a)}{b-a}\right].$$

- Integrando analiticamente essa aproximação, tem-se

$$\begin{aligned} I(f) &\approx \int_a^b f(a) + (x-a)\left[\frac{f(b)-f(a)}{b-a}\right] dx \\ &= f(a)(b-a) + \frac{1}{2}[f(b)-f(a)](b-a). \end{aligned}$$

- Simplificando, obtem-se

$$I(f) \approx \frac{[f(a)+f(b)]}{2}(b-a).$$

Sumário

Integração numérica: Método de Simpson 1/3

- Aproxima o integrando por um polinômio de segunda ordem.
- Pontos finais $x_1 = a$, $x_3 = b$, e o ponto central, $x_2 = (a + b)/2$.
- O polinômio pode ser escrito na forma:

$$p(x) = \alpha + \beta(x - x_1) + \lambda(x - x_1)(x - x_2) \tag{1}$$

  onde α, β e λ são constantes desconhecidas.
- Impomos a condição que o polinômio deve passar por todos os pontos, $p(x_1) = f(x_1)$, $p(x_2) = f(x_2)$ e $p(x_3) = f(x_3)$.

Integração numérica: Método de Simpson 1/3

- Isso resulta em:

$$\alpha = f(x_1), \quad \beta = [f(x_2) - f(x_1)]/(x_2 - x_1) \quad \text{e}$$

$$\lambda = \frac{f(x_3) - 2f(x_2) + f(x_1)}{2(h)^2}$$

onde $h = (b - a)/2$.

- Substituindo em 1 e integrando $p(x)$, obtém-se

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right].$$

Implementação: Método de Simpson 1/3

- A integral é facilmente calculada com apenas três avaliações da função.

```
simpson <- function(integrando, a, b, ...){
  h <- (b-a)/2
  x2 <-(a+b)/2
  integral <- (h/3)*(integrando(a,...) +
               4*integrando(x2, ...) + integrando(b, ...))
  return(integral)
}
```

- Exemplo: Calcule $\int_2^3 x^2 dx$

```
fx <- function(x) x^2
simpson(integrando = fx, a = 2, b = 3)
```

```
# [1] 6.333333
```

- Solução exata: $\int_2^3 x^2 dx = \frac{x^3}{3}\Big|_2^3 = \frac{3^3}{3} - \frac{2^3}{3} = 6.34$

Sumário

Quadratura de Gauss

- Método trapezoidal e Simpson são muito simples.
- Aproximam o integrando por um polinômio de fácil integração.
- Resolvem a integral aproximada.
- Pontos são igualmente espaçados.
- Simples e intuitivos, porém de difícil generalização.
- Quadratura Gaussiana é um dos métodos mais populares de integração numérica.
- Aplicações: Modelos mistos não-lineares, análise de dados longitudinais, medidas repetidas, modelos lineares generalizados mistos, etc.

Quadratura de Gauss

- Forma geral da quadratura de Gauss:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} C_i f(x_i), \tag{2}$$

onde C_i são pesos e x_i são os pontos de Gauss em $[a, b]$. \item Exemplo 1: Para $n = 2$ a Eq. 2 tem a forma:

$$\int_a^b f(x)dx \approx C_1 f(x_1) + C_2 f(x_2).$$

- Exemplo 2: Para $n = 3$ a Eq. 2 tem a forma:

$$\int_a^b f(x)dx \approx C_1 f(x_1) + C_2 f(x_2) + C_3 f(x_3).$$

Quadratura de Gauss

- Coeficientes C_i e a localização dos pontos x_i depende dos valores de n, a e b.
- C_i e x_i são determinados de forma que o lado direito da Eq. 2 seja igual ao lado esquerdo para funções $f(x)$ especificadas.
- A especificação de $f(x)$ vai depender do domínio de integração.
- Diferentes domínios levam a diferentes variações do método.
- Domínios comuns:
  1. Gauss-Legendre, Gauss-Jacobi e Gauss-Chebyshev
  $$\int_a^b f(x)dx.$$
  2. Gauss-Laguerre
  $$\int_0^\infty f(x)e^{-x}dx.$$
  3. Gauss-Hermite
  $$\int_{-\infty}^\infty f(x)e^{-x^2}dx.$$

Quadratura de Gauss

- No domínio $[-1, 1]$ a forma da quadratura de Gauss é

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} C_i f(x_i).$$

- C_i e x_i são determinados fazendo com que a Eq. 2 seja exata quando $f(x) = 1, x, x^2, x^3 \ldots$.
- O número de casos depende do valor de n.
- Para $n = 2$, tem-se

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx C_1 f(x_1) + C_2 f(x_2). \tag{3}$$

Quadratura de Gauss-Legendre

- As quatro constantes C_1, C_2, x_1 e x_2 são determinadas fazendo Eq. 3 exata quando aplicada aos quatro casos:

$$\begin{array}{lll}
\text{Caso 1} & f(x) = 1 & \int_{-1}^{1} 1dx = 2 = C_1 + C_2 \\
\text{Caso 2} & f(x) = x & \int_{-1}^{1} xdx = 0 = C_1x_1 + C_2x_2 \\
\text{Caso 3} & f(x) = x^2 & \int_{-1}^{1} x^2dx = \frac{2}{3} = C_1x_1^2 + C_2x_2^2 \\
\text{Caso 4} & f(x) = x^3 & \int_{-1}^{1} x^3dx = 0 = C_1x_1^3 + C_2x_2^3
\end{array}$$

- Sistema não-linear de quatro equações e quatro incógnitas.
- Podem existir múltiplas soluções.
- Uma solução particular é obtido por impor que $x_1 = -x_2$.
- Pela equação 2, implica que $C_1 = C_2$ e a solução é

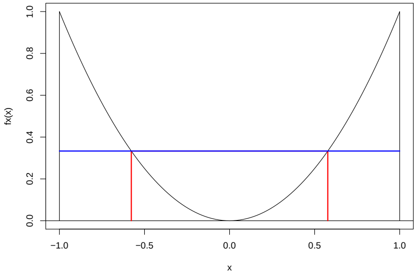
$$C_1 = 1, \quad C_2 = 1, \quad x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \quad \text{e} \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

Exemplo: Quadratura de Gauss-Legendre

- Calcule $\int_{-1}^{1} x^2 dx$.
- Usando Gauss-Legendre com dois pontos, tem-se

$$\int_{-1}^{1} x^2 dx = 1\left(\frac{-1}{\sqrt{3}}\right)^2 + 1\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2 = \frac{2}{3}.$$

- Ilustração



Exemplo: Quadratura de Gauss-Legendre

- Quando $f(x)$ é uma função do tipo $f(x) = 1$, $f(x) = x$, $f(x) = x^2$ ou $f(x) = x^3$ ou qualquer combinação linear destas a aproximação é exata.
- Caso contrário o procedimento fornece uma aproximação.
- Exemplo: $f(x) = cos(x)$ valor exato é

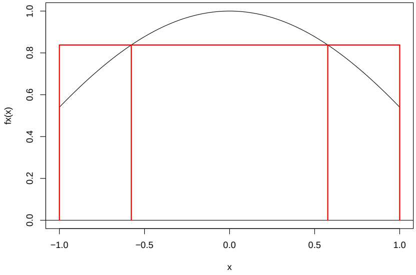
$$\int_{-1}^{1} cos(x)dx = sen(x)|_{-1}^{1} = sen(1) - sen(-1) = 1.682841.$$

- Usando Quadratura de Gauss-Legendre com $n = 2$, tem-se

$$\int_{-1}^{1} cos(x)dx \approx cos(-1/\sqrt{3}) + cos(1/\sqrt{3}) = 1.675823.$$

Exemplo: Quadratura de Gauss-Legendre

- Graficamente, tem-se



Quadratura de Gauss-Legendre

- O número de pontos de integração controla a precisão da aproximação.
- Em R o pacote pracma fornece os pesos e pontos de integração.
- Exemplo

```
require(pracma)
```

```
# Loading required package: pracma
```

```
gaussLegendre(n = 2, a = -1, b = 1)
```

```
# $x
# [1] -0.5773503  0.5773503
#
# $w
# [1] 1 1
```

- Baseado nos pontos e pesos de integração é fácil construir funções genéricas para integração numérica.

Implementação: Quadratura de Gauss-Legendre

- Função genérica

```
gauss_legendre <- function(integrando, n.pontos, a, b, ...){
  pontos <- gaussLegendre(n.pontos, a = a, b = b)
  integral <- sum(pontos$w*integrando(pontos$x,...))
  return(integral)
}
```

- Exemplo: $\int_{-1}^{1} cos(x)dx$.

```
# n = 2
gauss_legendre(integrando = cos, n.pontos = 2, a = -1, b = 1)
```

```
# [1] 1.675824
```

```
# n = 10
gauss_legendre(integrando = cos, n.pontos = 10, a = -1, b = 1)
```

```
# [1] 1.682942
```

Quadratura de Gauss-Laguerre

- Gauss-Laguerre resolve integrais do tipo:

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x) dx.$$

- Integral é aproximada por uma soma ponderada.

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i).$$

- Função é avaliada nos pontos de Gauss e pesos de integração.
- Os pesos e pontos de integração são obtidos de forma similar ao caso de Gauss-Legendre, porém baseado no polinômio de Laguerre.

Implementação: Quadratura de Gauss-Laguerre

- Função genérica para integração de Gauss-Laguerre

```
gauss_laguerre <- function(integrando, n.pontos, ...){
  pontos <- gaussLaguerre(n.pontos)
  integral <- sum(pontos$w*integrando(pontos$x,...)
                  /exp(-pontos$x))
  return(integral)
}
```

Implementação: Quadratura de Gauss-Laguerre

- Exemplo: $\int_0^\infty \lambda \exp(-\lambda x) dx$.

```
fx <- function(x, lambda) lambda*exp(-lambda*x)
# n = 2
gauss_laguerre(integrando = fx, n.pontos = 2, lambda = 10)
```

```
# [1] 0.04381233
```

```
# n = 10
gauss_laguerre(integrando = fx, n.pontos = 10, lambda = 10)
```

```
# [1] 0.8981046
```

```
# n = 100
gauss_laguerre(integrando = fx, n.pontos = 100, lambda = 10)
```

```
# [1] 1
```

Quadratura de Gauss-Hermite

- Gauss-Hermite resolve integrais do tipo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx.$$

- Integral é aproximada por uma soma ponderada.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i).$$

- Função é avaliada nos pontos de Gauss e pesos de integração.
- Os pesos e pontos de integração são obtidos de forma similar ao caso de Gauss-Legendre, porém baseado no polinômio de Hermite.

Implementação: Quadratura de Gauss-Hermite

- Função genérica para integração de Gauss-Hermite

```
gauss_hermite <- function(integrando, n.pontos, ...) {
  pontos <- gaussHermite(n.pontos)
  integral <- sum(pontos$w*integrando(pontos$x,...)
                  /exp(-pontos$x^2))
  return(integral)
}
```

Implementação: Quadratura de Gauss-Hermite

- Exemplo: $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}y^2\right) dy$.

```r
# n = 2
gauss_hermite(integrando = dnorm, n.pontos = 2)
```

```
# [1] 0.9079431
```

```r
# n = 10
gauss_hermite(integrando = dnorm, n.pontos = 10)
```

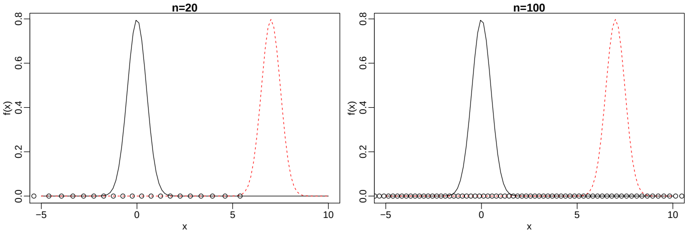
```
# [1] 0.9999876
```

```r
# n = 100
gauss_hermite(integrando = dnorm, n.pontos = 100)
```

```
# [1] 1
```

Limitações: Quadratura de Gauss

- Quadratura de Gauss apresenta duas grandes limitações:
  1. Os pontos são escolhidos baseado no polinômio escolhido, ignorando a função a ser integrada.
  2. Número de pontos necessários para a integração cresce como uma potência da dimensão da integral. 20 pontos em uma dimensão demanda $20^2 = 400$ pontos em duas dimensões.



- Espalhar os pontos de forma mais inteligente diminui o número de pontos necessários.

Sumário

Quadratura de Gauss-Hermite Adaptativa

- Os pontos de integração são centrados e escalonados como se $f(x)e^{-x^2}$ fosse a distribuição Gaussiana.
- A média da aproximação Gaussiana será a moda $\hat{x}$ de $ln[f(x)e^{-x^2}]$.
- A variância da aproximação Gaussiana será

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} ln[f(x)e^{-x^2}]|_{z=\hat{z}}\right]^{-1}.$$

- Novos pontos de integração adaptados serão dados por

$$x_i^+ = \hat{x} + \left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} ln[f(x)e^{-x^2}]|_{x=\hat{x}}\right]^{-1/2} x_i$$

com correspondentes pesos,

$$w_i^+ = \left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} ln[f(x)e^{-x^2}]|_{x=\hat{x}}\right]^{-1/2} \frac{e^{x_i^+}}{e^{-x_i}} w_i.$$

Quadratura de Gauss-Hermite Adaptativa

- Como antes, a integral é aproximada por

$$\int f(x)e^{-x^2}dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i^+ f(x_i^+).$$

- Problema!! Como encontrar a moda e o hessiano de $ln[f(x)e^{-x^2}]$?
- Analiticamente ou numericamente.
- Caso especial Gauss-Hermite Adaptativa com $n = 1 \rightarrow$ Aproximação de Laplace.

Sumário

Aproximação de Laplace

- Denote $f(x)e^{-x^2}$ por $Q(x)$.
- Como $n = 1$, $x_1 = 0$ e $w_1 = 1$, obtemos $x_1^+ = \hat{x}$.
- Pesos de integração são iguais a

$$w_1^+ = |Q''(\hat{x})|^{-1/2} \frac{e^{-\hat{x}}}{e^{-0}} = (2\pi)^{n/2} |Q''(\hat{x})|^{-1/2} \frac{e^{Q(\hat{x})}}{f(\hat{x})}.$$

- Assim, a aproximação fica dada por

$$\begin{aligned} \int f(x)e^{-x^2} dx &= \int e^{Q(x)} dx \\ &\approx w_1^+ f(x_1^+) = (2\pi)^{n/2} |Q''(\hat{x})|^{-1/2} e^{Q(\hat{x})}. \end{aligned}$$

Implementação: Aproximação de Laplace

- Função optim() encontra o máximo e o hessiano de $Q(x)$.

```r
laplace <- function(funcao, otimizador,n.dim, ...){
  integral <- -999999
  inicial <- rep(0,n.dim)
  temp <- try(optim(inicial, funcao,..., method=otimizador,
              hessian=TRUE, control=list(fnscale=-1)))
  if(class(temp) != "try-error"){
  integral <- exp(temp$value) * (exp((n.dim/2)*log(2*pi) -
                  0.5*determinant(-temp$hessian)$modulus))}
  return(integral)
}
```

Implementação: Aproximação de Laplace

- Exemplo: $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}y^2\right) dy$.

```
laplace(dnorm, otimizador = "BFGS", n.dim = 1, log = TRUE)
```

```
# [1] 1
# attr(,"logarithm")
# [1] TRUE
```

Sumário

Integração Monte Carlo

- Método simples e geral para resolver integrais.
- Objetivo: estimar o valor da integral de uma função $f(x)$ em algum domínio D qualquer, ou seja,

$$I = \int_D f(x)dx \tag{4}$$

- Seja $p(x)$ uma fdp cujo domínio coincide com D.
- Então, a integral em Eq. 4 é equivalente a

$$I = \int_D \frac{f(x)}{p(x)} p(x)dx.$$

- A integral corresponde a $E\left(\frac{f(x)}{p(x)}\right)$.

Algoritmo: Integração Monte Carlo

- Algoritmo: Integração Monte Carlo
  1. Gere números aleatórios de $p(x)$;
  2. Calcule $m_i = f(x_i)/p(x_i)$ para cada amostra, $i = 1, \ldots, n$.
  3. Calcule a média $\sum_{i=1}^{n} \frac{m_i}{n}$.
- Implementação para funções com $D = \Re$.

```
monte.carlo <- function(funcao, n.pontos, ...) {
  pontos <- rnorm(n.pontos)
  norma <- dnorm(pontos)
  integral <- mean(funcao(pontos,...)/norma)
  return(integral)
}
```

Algoritmo: Integração Monte Carlo

- Exemplo: $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}y^2\right) dy$.

```r
# Integrando a Normal padrão
monte.carlo(funcao = dnorm, n.pontos = 1000)
```

```
# [1] 1
```

```r
# Integrando distribuição t com df = 30
monte.carlo(funcao = dt, n.pontos = 1000, df = 30)
```

```
# [1] 1.001312
```

Sumário

Função do R para integração numérica

- Função `integrate()` implementa integração numérica usando quadratura adaptativa.
- O algoritmo depende do tipo da função.

```
args(integrate)
```

```
# function (f, lower, upper, ..., subdivisions = 100L, rel.tol = .Machine$double.ep
#     abs.tol = rel.tol, stop.on.error = TRUE, keep.xy = FALSE,
#     aux = NULL)
# NULL
```

Função do R para integração numérica

- Exemplo 1: $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}y^2\right) dy$.

```
integrate(f = dnorm, lower = -Inf, upper = Inf)
```

```
# 1 with absolute error < 9.4e-05
```

- Exemplo 2: $\int_{-1}^{1} x^2 dx$.

```
fx <- function(x)x^2
integrate(f = fx, lower = -1, upper = 1)
```

```
# 0.6666667 with absolute error < 7.4e-15
```

Discussão

- Integração numérica aparece com frequência em modelos mistos não Gaussianos.
- Método de Gauss-Hermite (GH) é muito popular.
- GH é limitado a integrais de baixa dimensão $n < 10$.
- GH é computacionalmente caro.
- GH adaptativo é mais eficiente, porém ainda limitado.
- Aproximação de Laplace excelente para integrando simétrico.
- Laplace resolve problemas em alta dimensão.
- Pode ser inacurada para integrando assimétricos.
- Integração Monte Carlo depende da escolha da *proposal*.
- Computacionalmente intensivo.
- Resolve problemas de alta dimensão a um alto custo computacional.