

Capítulo 5 - Integração e Diferenciação Numérica

Carlos Balsa

balsa@ipb.pt

Departamento de Matemática
Escola Superior de Tecnologia e Gestão de Bragança

2º Ano - Eng. Civil e Electrotécnica



Sumário

- 1 Integração Numérica
 - Motivação
 - Regra dos Trapézios
 - Regra de Simpson

- 2 Diferenciação Numérica
 - Primeiras Derivadas
 - Segundas Derivadas

Integração Numérica

- Queremos calcular

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

mas não podemos utilizar as técnicas de primitivação

- Primitiva de $f(x)$ é difícil ou impossível de calcular
 - $f(x)$ é uma função discreta, apenas conhecida em alguns pontos
- Técnicas de integração numérica são por vezes a única forma de calcular o valor do integral definido

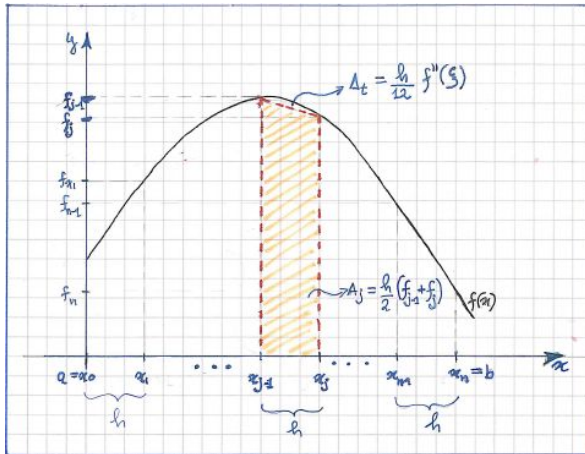
Regra dos Trapézios

- Para calcular $I = \int_a^b f(x) dx$
- Supomos que o intervalo $[a, b]$ está subdividido em n subintervalos de amplitude $h = (b - a)/n$, delimitados pelas seguintes abcissas
 $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{j-1} < x_j < \dots < x_n = b$, isto é,
 $x_j - x_{j-1} = h, \quad j = 1, \dots, n$
- Usando a notação $f_j = f(x_j)$, se unirmos os pontos (x_{j-1}, f_{j-1}) e (x_j, f_j) por um segmento de recta aproximamos a área abaixo da função no intervalo j através da área de um **trapézio**, i.e.,

$$I_j \approx A_j = \frac{h}{2} (f_{j-1} + f_j)$$

- Erro cometido $\Delta_t = \frac{h^3}{12} f''(\xi)$, com $x_{j-1} < \xi < x_j$

Regra dos Trapézios, continuação



Regra dos Trapézios Composta

- Somando a área de todos os trapézios obtemos uma aproximação do integral entre a e b

$$\begin{aligned} I &\approx A_1 + A_2 + \cdots + A_n \\ I &\approx \frac{h}{2} (f_0 + f_1) + \frac{h}{2} (f_1 + f_2) + \cdots + \frac{h}{2} (f_{n-1} + f_n) \\ I &\approx \frac{h}{2} (f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-1} + f_n) \\ I &\approx \frac{h}{2} \left(f_0 + f_n + \sum_{j=1}^{n-1} 2f_j \right). \end{aligned}$$

- Erro cometido

$$\Delta_t = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} \bar{f}'' ,$$

com $\bar{f}'' \approx \frac{\sum_{i=1}^n f''(\xi_i)}{n}$, $\xi_i \in [a_i, b_i]$

- Formula pode ser utilizada para estimar o erro em função do numero $n = (b-a)/h$ de subintervalos ou, inversamente, para estimar o numero de subintervalos necessários para reduzir o erro abaixo de certa tolerância

Exercício 1: Regra dos Trapézios

- Determine, pela regra dos trapézios, um valor aproximado de

$$I = \int_0^1 e^{-x^2} dx$$

para intervalos de comprimento $h = 0.25$

Exercício 1: Resolução

Como $h = 0.25$, $n = (b - a)/h = (1 - 0)/0.25 = 4$ subintervalos.

$$\begin{aligned} I &\approx \frac{h}{2} \left(f_0 + f_4 + 2 \sum_{j=1}^3 f_j \right) \\ I &\approx \frac{h}{2} [f_0 + f_4 + 2(f_1 + f_2 + f_3)] \\ I &\approx \frac{h}{2} \left[e^{-x_0^2} + e^{-x_4^2} + 2(e^{-x_1^2} + e^{-x_2^2} + e^{-x_3^2}) \right] \\ I &\approx \frac{0.25}{2} \left[e^{-0^2} + e^{-1^2} + 2(e^{-0.25^2} + e^{-0.5^2} + e^{-0.75^2}) \right] \\ I &\approx 0.74298 \end{aligned}$$

Exercício 1: Resolução, continuação

Trabalhamos em valor absoluto: $|\Delta_t| = \left| -\frac{(b-a)^3}{12n^2} \bar{f}'' \right|$

Estimamos por excesso o valor de $\bar{f}''(x)$

$$|\Delta_t| = \left| -\frac{(b-a)^3}{12n^2} \bar{f}'' \right| \leq \left| -\frac{(b-a)^3}{12n^2} M \right|$$

com $M = \max_{0 \leq x \leq 1} f''(x)$

Como $f^{(4)}(x) = (4x^2 - 2)e^{-x^2}$, $M = f''(1) = 0.7358$

$$|\Delta_S| \leq \frac{(1-0)^3}{12 \times 4^2} \times 0.7358 \approx 0.39 \times 10^{-2}$$

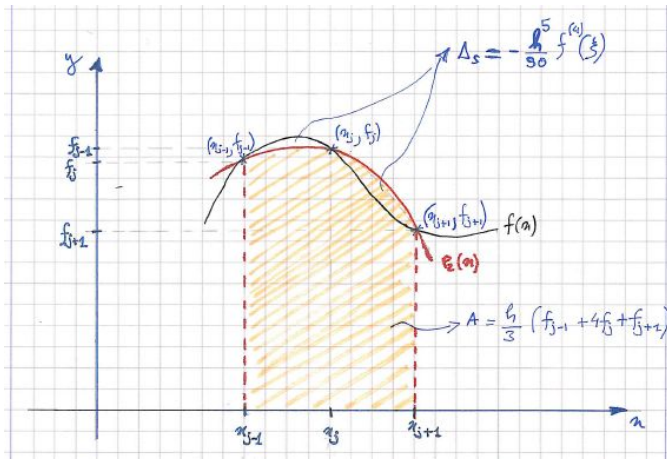
Regra de Simpson

- **Regra de Simpson** consiste em aproximar a função por um polinómio do segundo grau que une os pontos (x_{j-1}, f_{j-1}) , (x_j, f_j) e (x_{j+1}, f_{j+1})
- Integrando o polinómio do segundo grau obtemos

$$I_j \approx \frac{h}{3} (f_{j-1} + 4f_j + f_{j+1})$$

- Erro cometido $\Delta_t = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$, com $x_{j-1} < \xi < x_{j+1}$

Regra de Simpson, continuação



Regra de Simpson Composta

- Repetindo a regra de Simpson para todos os pares de subintervalos entre $[a, b]$

$$I \approx I_2 + I_4 + \cdots + I_n$$

$$I \approx \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + f_2) + \frac{h}{3} (f_2 + 4f_3 + f_4) + \cdots + \frac{h}{3} (f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n)$$

$$I \approx \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n)$$

$$I \approx \frac{h}{3} \left(f_0 + f_n + 4 \sum_{j=1}^{n/2} f_{2j-1} + 2 \sum_{j=2}^{n/2} f_{2j-2} \right)$$

Regra de Simpson Composta, continuação

- Como este método se baseia em agrupar os subintervalos dois a dois, o número total de intervalos ***n* tem de ser par**
- Erro cometido

$$\Delta_S = -\frac{(b-a)^5}{180n^4} \bar{f}^{(4)},$$

com $\bar{f}^{(4)} \approx \frac{\sum_{i=1}^n f^{(4)}(\xi_i)}{n}$, $\xi_i \in [a_i, b_i]$, o valor médio da quarta derivada no intervalo $[a, b]$

- Tal como no métodos dos trapézios ξ não é conhecido, pelo que deve ser escolhido de forma a majorar o valor absoluto do erro

Exercício 2: Regra de Simpson

- Determine, pela regra de Simpson, um valor aproximado de

$$I = \int_0^1 e^{-x^2} dx$$

para intervalos de comprimento $h = 0.25$

Exercício 2: Resolução

Como $h = 0.25$, $n = (b - a)/h = (1 - 0)/0.25 = 4$ subintervalos.

$$\begin{aligned} I &\approx \frac{h}{3} \left(f_0 + f_4 + 4 \sum_{j=1}^2 f_{2j-1} + 2 \sum_{j=2}^2 f_{2j-2} \right) \\ I &\approx \frac{h}{3} [f_0 + f_4 + 4(f_1 + f_3) + 2f_2] \\ I &\approx \frac{h}{3} \left[e^{-x_0^2} + e^{-x_4^2} + 4(e^{-x_1^2} + e^{-x_3^2}) + 2e^{-x_2^2} \right] \\ I &\approx \frac{0.25}{3} \left[e^{-0^2} + e^{-1^2} + 4(e^{-0.25^2} + e^{-0.75^2}) + 2e^{-0.5^2} \right] \\ I &\approx 0.74686 \end{aligned}$$

Exercício 2: Resolução, continuação

Trabalhamos em valor absoluto: $|\Delta_S| = \left| -\frac{(b-a)^5}{180n^4} \bar{f}^{(4)} \right|$

Estimamos por excesso o valor de $\bar{f}^{(4)}(x)$

$$|\Delta_S| = \left| -\frac{(b-a)^5}{180n^4} \bar{f}^{(4)} \right| \leq \left| -\frac{(b-a)^5}{180n^4} M \right|$$

com $M = \max_{0 \leq x \leq 1} f^{(4)}(x)$

Como $f^{(4)}(x) = (12 - 48x^2 + 16x^4) e^{-x^2}$, $M = f^{(4)}(0) = 12$

$$|\Delta_S| \leq \frac{(1-0)^5}{180 \times 4^4} \times 12 \approx 0.27 \times 10^{-3}$$

Diferenciação Numérica

- Dada uma função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ e os passos h e $-h$, para aproximar a primeira e a segunda derivada em x expandimos em séries de Taylor

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

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

- Resolvendo em ordem a $f'(x)$ na primeira série obtemos a *formula da diferença em avanço*

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{f''(x)}{2}h + \dots \\ &\approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \end{aligned}$$

de primeira ordem pois o maior termo desprezado é $\mathcal{O}(h)$.

Diferenciação Numérica, continuação

- Da mesma maneira, a partir da segunda série derivamos a *formula da diferença em atraso*

$$\begin{aligned}f'(x) &= \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{f''(x)}{2}h + \dots \\ &\approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h},\end{aligned}$$

que também é de primeira ordem pois o maior termo desprezado é igualmente $\mathcal{O}(h)$.

Diferenciação Numérica, continuação

- Subtraindo a segunda série à primeira obtemos a *formula da diferença centrada*

$$\begin{aligned}f'(x) &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(x)}{6}h^2 + \dots \\ &\approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h},\end{aligned}$$

que é de segunda ordem pois o maior termo desprezado é $\mathcal{O}(h^2)$.

Diferenciação Numérica, continuação

- Finalmente, adicionando as duas séries obtemos a *formula da diferença centrada para a segunda derivada*

$$\begin{aligned} f''(x) &= \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{f^{(iv)}(x)}{12}h^2 + \dots \\ &\approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}, \end{aligned}$$

cujas exactidão é também de segunda ordem.

Exercício 3: Diferenciação Numérica

Considere $f(x) = e^{-x^2}$

- 1 Aproxime numericamente a primeira derivada de $f(x)$, em $x = 0.5$ utilizando $h = 0.25$, através de
 - 1 Formula da diferença em avanço
 - 2 Formula da diferença em atraso
 - 3 Formula da diferença centrada
- 2 Aproxime numericamente a segunda derivada de $f(x)$, em $x = 0.75$ utilizando $h = 0.25$, e faça uma estimativa do erro cometido

Considerações Finais

→ *Métodos Disponíveis na NMLibforOctave:*

- Método dos trapézios: `I = inte_trapez(fun, a, b, n)`
- Método de Simpson: `I = inte_simpson(fun, a, b, n)`

→ *BIBLIOGRAFIA: Exposição baseada essencialmente em*

- A. Santos e C. Balsa. *Texto de Apoio à disciplina de Métodos Numéricos*, DMat-ESTiG, 2007 (Capítulo 6)
- Steven C. Chapra e Raymond P. Canale, "Métodos Numéricos para Engenharia", McGraw-Hill, 2008 (Capítulo 20, parte 6)