Capítulo 6 - Integração e Diferenciação Numérica

Carlos Balsa

balsa@ipb.pt

Departamento de Matemática
Escola Superior de Tecnologia e Gestão de Bragança

2º Ano - Eng. Civil, Química e Gestão Industrial

Outline

Integração Numérica

- Queremos calcular

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

mas 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
  $a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{j-1} < x_j < \cdots < x_n = b$, i.e.,
  $x_j - x_{j-1} = h, \quad j = 1, \cdots, n$
- 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 area abaixo da função no intervalo j através da área de um trapézio, i.e,

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

Regra dos Trapézios, continuação

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

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

- Erro cometido

$$\varepsilon_T = -\frac{h^2}{12}(b-a) f''(\xi), \quad \xi \in [a, b]$$

- 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

Exemplo: Regra dos Trapézios

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

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

para intervalos de comprimento $h = 0.25$ e faça uma estimativa do erro cometido

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

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

- Repetindo o processo para todos os pares de subintervalos entre $[a\ b]$

$$\begin{aligned}
I &\approx I_2 + I_4 + \cdots + I_n \\
I &\approx \tfrac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + f_2\right) + \tfrac{h}{3}\left(f_2 + 4f_3 + f_4\right) + \cdots + \tfrac{h}{3}\left(f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n\right) \\
I &\approx \tfrac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n\right) \\
I &\approx \tfrac{h}{3}\left(f_0 + f_n + 4\sum_{j=1}^{n/2} f_{2j-1} + 2\sum_{j=2}^{n/2} f_{2j-2}\right)
\end{aligned}$$

Regra de Simpson, 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

$$\varepsilon_s = -\frac{h^4}{180}(b-a)\, f^{(iv)}(\xi)\,, \quad \xi \in [a, b]$$

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

Exemplo: Regra dos Trapézios

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

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

para intervalos de comprimento $h = 0.25$ e faça uma estimativa do erro cometido

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

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

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

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

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

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*

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

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*

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

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

Diferenciação Numérica, continuação

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

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

cuja exactidão é também de segunda ordem.

Exemplo: Diferenciação Numérica

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

1. Aproxime numericamente a primeira derivada de $f(x)$ usando
   1. Formula da diferença em avanço
   2. Formula da diferença em atraso
   3. Formula da diferença centrada
2. Aproxime numericamente a segunda derivada de $f(x)$ e faça uma estimativa do erro cometido