Matemática - RC/UFG

Laboratório de Simulação Matemática

Parte 3[2]

Prof. Thiago Alves de Queiroz

2/2017

[2][Cap. 4] BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. Numerical Analysis (9th ed). Cengage Learning, 2010.

Diferenciação Numérica

- Grande parte dos métodos para aproximar derivadas e integrais usam polinômios;
- A derivada da função f em x_0 é:

$$f'(x_0) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}. \tag{1}$$

- Um ponto de partida para gerar uma aproximação para $f'(x_0)$ é calcular, para um pequeno valor de h:

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}. \tag{2}$$

- Seja $x_0 \in (a, b)$ e f, f' e f'' contínuas em $[a, b]$, tal que $x_1 = x_0 + h$ é um valor suficientemente pequeno para $h \neq 0$ e $x_1 \in [a, b]$. Assim:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi). \tag{3}$$

Diferenciação Numérica

- A fórmula (3) é chamada de *fórmula da diferença superior* quando $h > 0$.
- No caso de $h < 0$, tem-se a *fórmula da diferença inferior*.

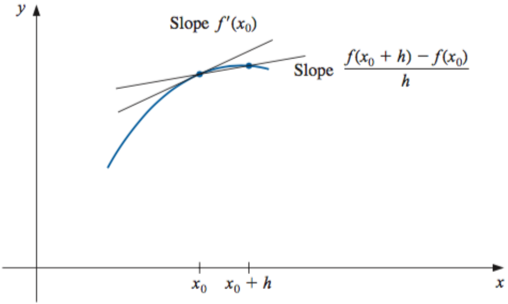

Figura: Fórmula da diferença superior.

Exemplo

- **Exemplo.** Use a fórmula da diferença superior para aproximar $f(x) = \ln(x)$ em $x_0 = 1,8$ usando $h = 0,1$, $h = 0,05$ e $h = 0,01$. Determine os erros.
- **Resposta.** Aplicando a fórmula, tem-se: $\frac{f(1{,}8+h)-f(1{,}8)}{h} = \frac{ln(1{,}8+h)-ln(1{,}8)}{h}$.
- Para $h = 0,1$: $\frac{0{,}64185389-0{,}58778667}{0{,}1} = 0,5406722$;
- Para $h = 0,05$: $\frac{0{,}61518564-0{,}58778667}{0{,}05} = 0,5479794$;
- Para $h = 0,01$: $\frac{0{,}59332685-0{,}58778667}{0{,}01} = 0,5540180$;

Diferenciação Numérica

- A partir da aplicação do polinômio interpolador $P(x)$, chega-se na fórmula de $(n+1)$ pontos para aproximar $f'(x)$:

$$f'(x_j) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L'_k(x_j) + \frac{f^{n+1}(\xi(x_j))}{(n+1)!} \prod_{k=0, k\neq j}^{n} (x_j - x_k), \qquad (4)$$

  sendo que $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ são $(n+1)$ pontos distintos no intervalo I e que as derivadas de f (pelo menos até a $(n+1)$-ésima) são contínuas em I.
- As fórmulas mais comuns envolvem 3 ou 5 pontos, devido ao número de avaliações e crescimento do erro de truncamento.
- A *fórmula de três pontos* centrada é dada por:

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[f(x_0+h) - f(x_0-h)\right] - \frac{h^2}{6} f'''(\xi), \qquad (5)$$

  em que $x_0 - h < \xi < x_0 + h$ e o erro é de segunda ordem.

Fórmula de Três Pontos

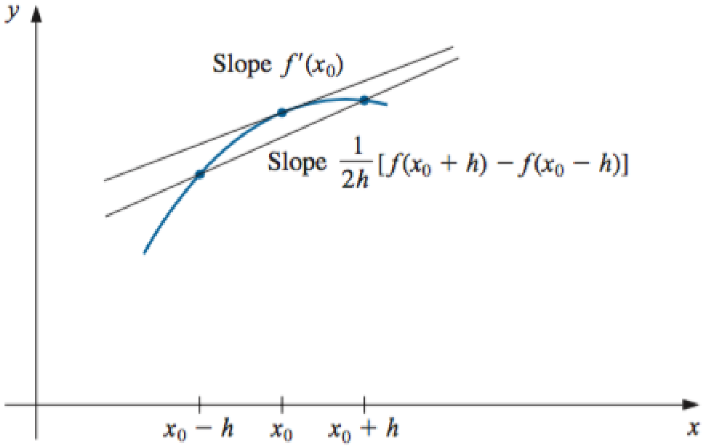

Figura: Aproximação pela fórmula de três pontos centrada.

Fórmula de Cinco Pontos

- Envolvem a avaliação da função em mais dois pontos adicionais. Assim, a *fórmula de cinco pontos* centrada:

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}\left[f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)\right] + \frac{h^4}{30} f^5(\xi), \quad (6)$$

  em que $x_0 - 2h < \xi < x_0 + 2h$ e o erro é de quarta ordem.
- **Exemplo.** Aproxime $f(x) = xe^x$ pelas fórmulas de três e cinco pontos considerando $h = 0,1$, $x_0 = 2$ e $f(1,8) = 10,889365$, $f(1,9) = 12,703199$, $f(2) = 14.778112$, $f(2,1) = 17,148957$ e $f(2,2) = 19,855030$.
- **Resposta.** Aplicando na fórmula de três pontos: $f'(x_0) \approx \frac{1}{2h}[f(x_0 + h) - f(x_0 - h)] = \frac{1}{0,2}[f(2,1) - f(1,9)] =$ $= 5(17,148957 - 12,7703199) = 22,228790.$

Exemplo

- Aplicando na fórmula de cinco pontos:
  $f'(x_0) \approx \frac{1}{12h}[f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] =$
  $= \frac{1}{1{,}2}[f(1,8) - 8f(1,9) + 8f(2,1) - f(2,2)]$
  $= \frac{1}{1{,}2}[10,889365 - 8(12,703199) + 8(17,148957) - 19,855030] =$
  $= 22,166999.$
- Sabendo que o valor exato é $f'(2) = (2+1)e^2 = 22,167168$, tem-se os erros absoluto abaixo.
- O erro para a fórmula de três pontos:
  $|22,167168 - 22,228790| = 0,061622.$
- O erro para a fórmula de cinco pontos:
  $|22,167168 - 22,166999| = 0,000169.$

Fórmula para Derivadas de Ordem 2

- A obtenção da fórmula ocorre a partir do polinômio de Taylor de ordem 3.
- A fórmula centrada para a segunda derivada é então:

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}\left[f(x_0 - h) - 2f(x_0) + f(x_0 + h)\right] + \frac{h^2}{12} f^4(\xi), \qquad (7)$$

  em que $x_0 - h < \xi < x_0 + h$ e o erro é de segunda ordem.
- **Exemplo.** Calcule a aproximação para $f''(2)$ sabendo que $f(x) = xe^x$, $h = 0,1$ e $f(1,9) = 12,703199$, $f(2) = 14,778112$ e $f(2,1) = 17,148957$.
- **Resposta.** Aplicando a fórmula para a derivada de ordem 2: $f''(2) \approx \frac{1}{0,1^2}[f(1,9) - 2f(2) + f(2,1)] =$
  $= 100[12,703199 - 2(14.778112) + 17,148957] = 29,593200.$

Integração Numérica

- Existem integrais sem antiderivadas conhecidas, daí a necessidade de calcular numericamente a integral definida.
- O método básico envolve aproximar $\int_a^b f(x)dx$ usando a *quadratura numérica* baseada na soma $\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$.
- Os métodos do tipo quadratura seguem dos polinômios interpoladores, com a ideia de selecionar pontos distintos $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ no intervalo $[a, b]$.
- A *regra do trapézio* e de *Simpson* partem dos polinômios primeiro e segundo de Lagrange com pontos igualmente espaçados, sabendo que:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) \tag{8}$$

com erro: $E(f) = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) f^{n+1}(\xi(x))dx$.

Regra do Trapézio

- Seja $x_0 = a$, $x_1 = b$ e $h = b - a = x_1 - x_0$, então a *regra do Trapézio* é:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right] - \frac{h^3}{12}f''(\xi). \tag{9}$$

- A regra dá um resultado exato quando a segunda derivada de f é nula.

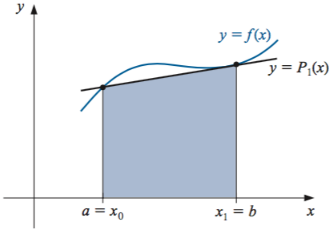

Figura: A integral é aproximada pela área de um trapézio.

Regra de Simpson

- Seja $x_0 = a$, $x_2 = b$, $x_1 = a + h$ e $h = \frac{b-a}{2}$, então a *regra de Simpson* é:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right] - \frac{h^5}{90} f^4(\xi). \qquad (10)$$

- A regra dá um resultado exato quando a quarta derivada de f é nula.

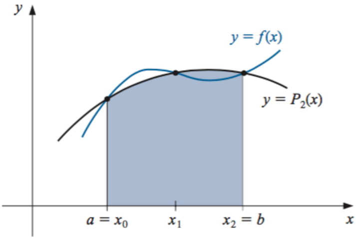

Figura: Aproximação da integral pela regra de Simpson.

Exemplo

- **Exemplo.** Compare as regras do Trapézio e de Simpson para aproximar $\int_0^2 x^2 dx$.
- **Resposta.** No intervalo $[0, 2]$, as regras possuem a fórmula:
  Trapézio: $\int_0^2 f(x)dx \approx f(0) + f(2)$,
  Simpson: $\int_0^2 f(x)dx \approx \frac{1}{3}[f(0) + 4f(1) + f(2)]$.
- Ao considerar que $f(x) = x^2$, tem-se:
  Trapézio: $\int_0^2 x^2 dx \approx 0^2 + 2^2 = 4$,
  Simpson: $\int_0^2 x^2 dx \approx \frac{1}{3}[0^2 + 4(1^2) + 2^2] = \frac{8}{3}$.
- O valor exato é $\int_0^2 x^2 dx = \frac{8}{3}$ que coincide com a regra de Simpson.
- A regra de Simpson é ligeiramente melhor do que a regra do Trapézio neste exemplo.

Integração Numérica Composta

- Para uma integral arbitrária $\int_a^b f(x)dx$, escolhe-se um inteiro n para subdividir o intervalo $[a, b]$ em n subintervalos.
- Em seguida, aplica-se a regra escolhida em cada par de subintervalos consecutivos.

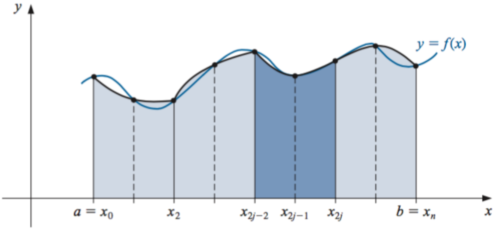

Figura: Regra de Simpson Composta para n subintervalos.

Regra de Simpson Composta

- **Teorema.** Seja f, f', f'', f''' e f^4 contínuas em $[a, b]$, n um inteiro par, $h = \frac{b-a}{n}$ e $x_j = a + jh$, para $j = 0, 1, \ldots, n$. Existe $\mu \in (a, b)$ que permite escrever a *regra de Simpson Composta* para n subintervalos como:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}[f(a) + 2\sum_{j=1}^{\frac{n}{2}-1} f(x_{2j}) + \\ + 4\sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} f(x_{2j-1}) + f(b)] - \frac{b-a}{180}h^4 f^4(\mu). \quad (11)$$

em que o erro é de quarta ordem.

Regra de Simpson Composta

INPUT endpoints a, b; even positive integer n.

OUTPUT approximation XI to I.

Step 1 Set $h = (b - a)/n$.

Step 2 Set $XI0 = f(a) + f(b)$;
$XI1 = 0$; (*Summation of* $f(x_{2i-1})$.)
$XI2 = 0$. (*Summation of* $f(x_{2i})$.)

Step 3 For $i = 1, \ldots, n-1$ do Steps 4 and 5.

Step 4 Set $X = a + ih$.

Step 5 If i is even then set $XI2 = XI2 + f(X)$
else set $XI1 = XI1 + f(X)$.

Step 6 Set $XI = h(XI0 + 2 \cdot XI2 + 4 \cdot XI1)/3$.

Step 7 OUTPUT (XI);
STOP.

Figura: Pseudo-código para a regra de Simpson Composta.

Exemplo

- **Exemplo.** Use a regra de Simpson composta para aproximar $\int_0^4 e^x dx$ para $n = 4$.
- **Resposta.** Sendo $n = 4$ e $f(x) = e^x$, tem-se $h = \frac{4-0}{4} = 1$ e $x_j = 4 + j$ para $j = 0, 1, 2, 3, 4$. Assim:
$\int_0^4 e^x dx \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 2\sum_{j=1}^{1} f(x_{2j}) + 4\sum_{j=1}^{2} f(x_{2j-1}) + f(x_4)\right] =$
$= \frac{1}{3}[f(x_0) + 2f(x_2) + 4f(x_1) + 4f(x_3) + f(x_4)] =$
$= \frac{1}{3}[f(0) + 2f(2) + 4f(1) + 4f(3) + f(4)] =$
$= \frac{1}{3}[e^0 + 2e^2 + 4e^1 + 4e^3 + e^4] =$
$\frac{1}{3}[1 + 14,778112 + 10,873127 + 80,342148 + 54,598150] =$
$= 53,863846$
- Sabendo que o valor exato é $e^4 - e^0 = 53,59815$. Então, obtém-se o erro absoluto:
$|53,598150 - 53,863846| = 0,265696$.

Regra do Trapézio Composta

- **Teorema.** Seja f, f' e f'' contínuas em $[a, b]$, $h = \frac{b-a}{n}$ e $x_j = a + jh$, para $j = 0, 1, \ldots, n$. Existe $\mu \in (a, b)$ que permite escrever a *regra do Trapézio Composta* para n subintervalos como:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(b)\right] - \frac{b-a}{12}h^2 f''(\mu). \quad (12)$$

em que o erro é de segunda ordem.

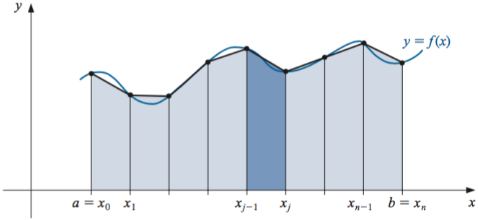

Figura: Regra do Trapézio Composta para n subintervalos.