
Métodos Numéricos

Um curso para o Mestrado Integrado em Engenharia Informática e
Computadores da FEUP

Carlos Madureira
Cristina Vila
José Soeiro de Carvalho

Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto
Departamento de Engenharia de Minas

Copyright ©1995-2015 Carlos M. N. Madureira, Maria Cristina C. Vila, José Manuel S. Soeiro de Carvalho

Reservados todos os direitos de publicação, tradução e adaptação.

Interdita a reprodução parcial ou integral sem prévia autorização dos autores.

Este documento é uma versão provisória, de utilização exclusiva no âmbito da disciplina de Métodos Numéricos do Mestrado Integrado em Engenharia Informática e Computadores da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto.

Todas as correcções e contribuições são bem-vindas!

Carlos M. N. Madureira (cmad@fe.up.pt)

Maria Cristina C. Vila (mvila@fe.up.pt)

José M. S. Soeiro de Carvalho (jmsoeiro@fe.up.pt)

Conteúdo

Introdução	1
1 O Erro em Análise Numérica	5
1.1 Matemáticas e Análise Numérica	6
1.2 A representação dos números numa máquina	8
1.2.1 Representação, Codificação	10
1.2.2 Representação de quantidades	10
1.2.3 Conversão entre bases	13
1.2.4 Notação	14
1.2.5 Representação IEEE	20
1.3 Erros	23
1.4 Arredondamento e Truncatura	24
1.4.1 Diferentes maneiras de calcular uma expressão	31
1.4.2 Os erros nos dados	36
1.4.3 Cálculo dos erros	38
1.5 Conclusão	41
2 Zeros reais de uma função real	43
2.1 Isolamento das raízes	48
2.2 Método da Bissecção	55
2.3 Método da Corda	58
2.4 Método da tangente	62
2.5 Método de iteração de Picard-Peano	64
2.6 Resolução de Sistemas pelo Método de Iteração	69
3 Sistemas de Equações Lineares	73
3.1 Eliminação Gaussiana	73
3.2 O Erro no Método de Gauss	77
3.3 Técnicas Clássicas para Minimização dos Erros	85
3.4 Ordem e Condição de um Sistema	86
3.5 Método de Khaletsky	93
3.6 Métodos iterativos	94
3.6.1 Método de Gauss-Jacobi	95
3.6.2 Método de Gauss-Seidel	96
4 Quadratura e Cubatura	99
4.1 Introdução	99

4.2	Regra dos Trapézios	101
4.2.1	A "fórmula" do erro	101
4.2.2	Controlo do erro	103
4.3	Regra de Simpson	105
4.3.1	A "fórmula" de erro	106
4.3.2	Controlo do erro	106
4.4	Integrais impróprios	107
4.5	Integrais singulares	108
4.6	Cubatura	110
5	Integração de equações diferenciais ordinárias	115
5.1	O significado de uma solução: Método de Euler	115
5.2	Um melhoramento do Método de Euler	120
5.3	Métodos de Runge-Kutta	122
6	Optimização	125
6.1	Introdução	125
6.1.1	A Síntese: projecto e decisão optimizados	126
6.1.2	A Análise: os princípios de optimidade	128
6.2	Conceitos gerais	130
6.2.1	Programação linear	132
6.2.2	Programação convexa	132
6.3	As técnicas concretas	135
6.3.1	Pesquisa unidimensional	135
6.3.2	Pesquisa multidimensional	137
6.3.3	Método da quádrlica	142
6.3.4	Método de Levenberg-Marquardt	143
6.3.5	O problema das restrições	143
6.4	Programação não-convexa	147
6.5	Preparação da optimização	148
6.6	Análise do problema da Optimização	152
6.7	Ajustamento	155
6.7.1	A construção de uma função objectivo	155
6.7.2	O caso dos parâmetros lineares	156
6.7.3	O caso dos parâmetros não-lineares	157
7	Exemplos perversos	159
7.0.1	O zero da caixa preta	159
Índice		163

Lista de Figuras

1.1	Números racionais possíveis para o domínio inteiro $[-3,3]$	12
2.1	Várias soluções	46
2.2	Isolamento de raízes	49
2.3	Isolamento de raízes	51
2.4	Isolamento de raízes	53
2.5	Interpretação geométrica do método da corda	59
2.6	Aplicação do método da corda	60
2.7	Convergência do método da corda	61
2.8	Método da tangente	62
2.9	Não convergência no método da tangente	64
2.10	Método de Picard-Peano em escada	66
2.11	Método de Picard-Peano em teia de aranha	66
2.12	Método de Picard-Peano em escada divergente	67
2.13	Método de Picard-Peano em teia de aranha divergente	67
2.14	Resolução de duas equações simultâneas	69
4.1	Regra de Simpson	110

Lista de Tabelas

1.1	Codificação de números e caracteres	11
1.2	Cálculo posicional	12
1.3	Bases Numéricas	12
1.4	Conversão de 100_{10} para base 3	13
1.5	Vírgula fixa e flutuante	14
1.6	Comparação de notações em vírgula fixa e flutuante	15
2.1	Isolamento de raízes	54
2.2	Exemplo de bissecção sucessiva	56
2.3	Aplicação do método da corda	60
2.4	Aplicação do método da tangente	63
2.5	Aplicação do método da tangente, com ponto inicial diferente	64
3.1	Aplicação dos Métodos de Gauss-Jacobi e Gauss-Seidel	97

4 Quadratura e Cubatura

Contents

4.1	Introdução	99
4.2	Regra dos Trapézios	101
4.2.1	A "fórmula" do erro	101
4.2.2	Controlo do erro	103
4.3	Regra de Simpson	105
4.3.1	A "fórmula" de erro	106
4.3.2	Controlo do erro	106
4.4	Integrais impróprios	107
4.5	Integrais singulares	108
4.6	Cubatura	110

Figures

4.1	Regra de Simpson	110
-----	------------------	-----

4.1 Introdução

Uma situação muito corrente tanto na Ciência como na Engenharia é a de a solução de um problema ser dada na forma de um integral que não pode ser calculado em forma cerrada (isto é, analítica) quer porque a integranda tem forma analítica intratável quer porque a integranda é dada sob a forma de uma tábua de valores ou, o que vem a dar no mesmo, é especificada através de um algoritmo que não tem expressão analítica cerrada. Há dois casos completamente diferentes desta situação:

- um é o caso do *integral indefinido*

$$F_a(x) = \int_a^x f(t) .dt$$

que, do ponto de vista numérico, exige a construção de uma tábua de valores e que consideraremos no Capítulo seguinte como caso particular, e particularmente simples, de integração de uma equação diferencial ordinária;

4 Quadratura e Cubatura

- o segundo caso é o do *integral definido*

$$F_a = \int_a^b f(x) . dx$$

que é um número único.

A ideia geral para o cálculo numérico de um integral definido consiste basicamente em substituir a integranda $y = f(x)$ por uma função que a aproxime satisfatoriamente no intervalo $[a, b]$ e que seja dotada de expressão analítica primitivável, $g(x)$, escrevendo

$$\int_a^b f(x) . dx \cong \int_a^b g(x) . dx = [G(x)]_a^b$$

Posto nestes termos, o problema reduz-se ao problema de determinar uma aproximação adequada, $g(x)$, à função $y = f(x)$ no intervalo $[a, b]$. Uma solução frequentemente apontada que contempla de modo muito simples a questão da integrabilidade consiste em

1. definir $y = f(x)$ pelos seus valores em $n + 1$ pontos do intervalo (a, b) ;
2. dar a $g(x)$ a forma de um polinómio $p_n(x)$ de grau n e obrigar este a passar pelos $n + 1$ pontos conhecidos.

Deste modo, a solução será exacta para qualquer função $f(x) = a, a.x, \dots, a.x^n$ e, naturalmente, também para qualquer combinação linear destas formas, isto é, para qualquer polinómio de grau igual ou inferior a n . No caso mais geral de uma função $y = f(x)$ qualquer, a solução será apenas aproximada e, frequentemente, apenas grosseiramente aproximada. Encontramos, assim, perante o problema genérico muito complexo de definir uma aproximação analítica óptima a uma função dada e, naturalmente, antes de mais, de definir em que sentido é que essa função deve ser óptima. Infelizmente, não nos é possível abordar aqui esse problema genérico, pelo que teremos que procurar uma alternativa mais simples, embora com a consciência de que, assim, nos limitamos a soluções relativamente toscas. Essa alternativa será procurada dentro da hipótese de que a divisão do intervalo (a, b) em n subintervalos é suficiente fina para que o problema da qualidade das aproximações

$$g_i(x) : x \in (x_{i-1}, x_i)$$

não seja crítico; devido à própria natureza desta hipótese, os métodos que exporemos em seguida aplicam-se apenas ao caso das funções contínuas; no caso das funções com descontinuidades de 1ª espécie (saltos), aplicar-se-ão, em separado, a cada um dos subintervalos resultantes da partição do intervalo original pelo ponto de descontinuidade; no caso das descontinuidades de espécie superior, esses métodos não são, pura e simplesmente, aplicáveis. Por razões de simplicidade, consideraremos apenas o caso da divisão do intervalo original em partes iguais:

$$\begin{aligned} x_{i+1} - x_i &= h & y_i &= f(x_i) \\ x_0 &= a & \delta y_i &= y_{i+1} - y_i \\ x_{n+1} &= x_0 + n.h = b \end{aligned}$$

4.2 Regra dos Trapézios

Neste método, a ideia central consiste em substituir, em cada intervalo, o arco da curva pela sua corda, calculando em seguida a área sob a poligonal assim definida.

Evidentemente, para o primeiro trapézio é

$$\int_{x_0}^{x_1} y \cdot dx = \frac{h}{2} \cdot [y_1 + y_0]$$

de modo que, para o segundo trapézio será:

$$\int_{x_1}^{x_2} y \cdot dx = \frac{h}{2} \cdot [y_2 + y_1]$$

e assim sucessivamente, até

$$\int_{x_{n-1}}^{x_n} y \cdot dx = \frac{h}{2} \cdot [y_n + y_{n-1}]$$

Somando todos os termos, temos

$$\int_{x_0}^{x_n} y \cdot dx = \frac{h}{2} \cdot [y_0 + 2 \cdot y_1 + \dots + 2 \cdot y_{n-1} + y_n] \quad (4.1)$$

4.2.1 A "fórmula" do erro

A estimativa do erro cometido pode fazer-se considerando que $y = g(x)$ é apenas a aproximação de primeira ordem no desenvolvimento de $y = f(x)$ em série de Taylor em torno de x_i :

$$f(x)_i = f(x_i) + (x - x_i) \cdot f'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2} \cdot f''(x_i) + \frac{(x - x_i)^3}{3!} \cdot f'''(x_i) + \dots$$

Substituindo esta expressão em ambos os membros de

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} y \cdot dx = \frac{h}{2} \cdot [y_{i+1} - y_i]$$

obtem-se o seguinte valor para o erro:

$$\epsilon_i = -\frac{h^3}{12} \cdot f''(x_i) + \dots$$

ao qual, mediante o uso do teorema da média do cálculo diferencial (teorema de Lagrange), pode dar-se a forma:

$$\epsilon_i = -\frac{h^3}{12} \cdot f''(\xi_i) \quad (x_i \leq \xi_i \leq x_{i+1})$$

4 Quadratura e Cubatura

Somando sobre todos os valores de i , obtemos

$$\begin{aligned}\varepsilon &= -\frac{n \cdot h^3}{12} \cdot f''(\xi) \\ &= -\frac{(x_n - x_0) \cdot h^2}{12} \cdot f''(\xi) \quad (x_0 \leq \xi_i \leq x_n) \\ &= -\frac{(x_n - x_0)^3}{12n^2} \cdot f''(\xi)\end{aligned}\quad (4.2)$$

que fornece um majorante para o erro, pelo facto de depender de $f''(\xi)$, o máximo da derivada no intervalo.

Esta expressão é importante porque mostra que

- para uma dada amplitude do intervalo, o erro varia com o inverso do quadrado do número de intervalos ou, de outro modo, com o quadrado do passo de integração, pelo que o método dos trapézios se diz de *segunda ordem*;
- para um dado número de passos de integração (e sob a hipótese muito forte de que o majorante da segunda derivada se mantém), o erro cresce com o cubo da amplitude do intervalo, pelo que, se multiplicarmos o intervalo por k e quisermos manter a precisão, devemos multiplicar o número de passos por $k^{3/2}$ (o que mostra as sérias dificuldades que teremos se quisermos abordar por este método o problema do integral impróprio).

Exemplo 4.1 Regra dos Trapézios

Seja o integral

$$I_{\pi/2} = \int_0^{\pi/2} \sin(x) \cdot dx = 1$$

cujo erro *calculado* pode ser majorado pela expressão (4.2), mas cujo valor *observado* pode ser obtido pela diferença ao resultado da integração analítica. Calculando I pela regra dos trapézios (ver [Integral_seno.xls](#)), dá:

n	80	40	20	10	5
h	1,963495E-02	3,926991E-02	7,853982E-02	1,570796E-01	3,141593E-01
S	9,999679E-01	9,998715E-01	9,994859E-01	9,979430E-01	9,917618E-01
Erro Calc.	5,046595E-05	2,018638E-04	8,074551E-04	3,229820E-03	1,291928E-02
Erro Obs.	3,212782E-05	1,285138E-04	5,140948E-04	2,057014E-03	8,238231E-03

Vemos que, efectivamente, o erro diminui à medida que aumenta o número de passos da integração. Dado que, neste caso, foi possível estimar f'' com grande rigor, a estimativa do erro encontra-se bastante próxima do erro real.

Seja agora o integral

$$I_{\pi} = \int_0^{\pi} \sin(x) \cdot dx = 2$$

que, calculado pela regra dos trapézios, dá:

n	80	40	20	10	5
h	3,926991E-02	7,853982E-02	1,570796E-01	3,141593E-01	6,283185E-01
S	1,999743E+00	1,998972E+00	1,995886E+00	1,983524E+00	1,933766E+00
Erro Calc.	4,037276E-04	1,614910E-03	6,459641E-03	2,583856E-02	1,033543E-01
Erro Obs.	2,570276E-04	1,028190E-03	4,114027E-03	1,647646E-02	6,623440E-02

O erro cometido é oito vezes maior que no caso anterior, como seria de esperar visto que a amplitude do intervalo duplicou.

Seja agora o integral

$$I_{3\pi/2} = \int_0^{3\pi/2} \sin(x) \cdot dx = 1$$

que, calculado pela regra dos trapézios, dá:

n	80	40	20	10	5
h	5,890486E-02	1,178097E-01	2,356194E-01	4,712389E-01	9,424778E-01
S	9,997108E-01	9,988431E-01	9,953693E-01	9,814256E-01	9,248584E-01
Erro Calc.	1,362581E-03	5,450322E-03	2,180129E-02	8,720515E-02	3,488206E-01
Erro Obs.	2,891653E-04	1,156862E-03	4,630663E-03	1,857436E-02	7,514159E-02

O erro observado é agora apenas nove vezes maior que o do primeiro exemplo, enquanto poderia esperar-se que fosse $3^3 = 27$ vezes maior; trata-se aqui de um típico efeito de compensação parcial dos erros em tramos de curvatura contrária. Pelo contrário, o erro calculado, é, efectivamente, 27 vezes maior, mas absolutamente fictício; torna-se evidente que, se não forem tomadas especiais precauções para garantir a sua validade, a "fórmula" do erro pode, para efeitos práticos, tornar-se absolutamente inútil.

Seja o integral

$$I_{2\pi} = \int_0^{2\pi} \sin(x) \cdot dx = 0$$

que, calculado pela regra dos trapézios, dá:

n	80	40	20	10	5
h	7,853982E-02	1,570796E-01	3,141593E-01	6,283185E-01	1,256637E+00
S	-3,616790E-16	5,911324E-16	1,533436E-16	-7,697835E-17	-1,444196E-17
Erro Calc.	3,229820E-03	2,583856E-02	2,067085E-01	1,653668E+00	1,322934E+01
Erro Obs.	3,616790E-16	-5,911324E-16	-1,533436E-16	7,697835E-17	1,444196E-17

O efeito de compensação dos erros é, aqui, particularmente nítido, como seria de esperar. Um efeito mais surpreendente surge, porém: o aumento do número de passos de integração não aumenta de modo nenhum a precisão dos resultados porque os erros não provêm da aproximação do método em si (truncatura do processo de passagem ao limite, truncatura da série de Taylor) mas apenas dos efeitos de arredondamento do cálculo na máquina.

4.2.2 Controlo do erro

Na impossibilidade de calcular um erro ou, sequer, um seu majorante correspondente à aplicação do método a um dado caso, temos, necessariamente, que procurar um modo de avaliar o erro ou, pelo menos, mantê-lo sob controlo.

Um caminho possível e que é frequente ouvir-se recomendar é o seguinte: utilizar a regra dos trapézios para dois espaçamentos h e $h' = h/2$ e comparar os resultados; se estes não diferirem significativamente (o nível de significado terá sempre que ser fixado pelo utilizador em face das suas necessidades concretas mas, por razões de realismo, deve sempre ficar razoavelmente longe da precisão da representação dos números na máquina), poderemos razoavelmente esperar que tenhamos já um resultado correcto; no entanto, a experiência mostra que este critério é, mais frequentemente que o que gostaríamos, demasiado optimista; com efeito:

4 Quadratura e Cubatura

- o erro não depende apenas da amplitude do intervalo e do passo de integração, mas da própria forma da integranda, através do parâmetro incontrolável ξ ;
- a fórmula do erro só é válida para valores de h "suficientemente pequenos", condição que não podemos saber *a priori* o que significa em cada caso concreto.

Um critério mais exigente, e que responde explicitamente a esta última consideração, parte de três cálculos, correspondentes a h , $h' = h/2$ e $h'' = h/4$, a que corresponderão os resultados calculados S , S' e S'' , tais que:

$$I = S + \varepsilon = S' + \varepsilon' = S'' + \varepsilon''$$

e em que, de acordo com a fórmula do erro, esperamos que

$$\varepsilon \approx 4.\varepsilon' \approx 16.\varepsilon''$$

de modo que

$$\begin{aligned} S' - S &= \varepsilon - \varepsilon' \approx \frac{3}{4}.\varepsilon \\ S'' - S' &= \varepsilon' - \varepsilon'' \approx \frac{3}{4}.\varepsilon' \approx \frac{3}{16}.\varepsilon \end{aligned}$$

ou

$$\frac{S' - S}{S'' - S'} \approx 4 \quad (4.3)$$

Assim, se os números $(S' - S)$ e $(S'' - S')$ estiverem entre si na razão aproximada de 4 para 1, isso significa que, provavelmente, os passos de integração se encontram já todos dentro do domínio de validade da fórmula do erro; nestas condições, $(S'' - S')$ pode servir como estimador de ε'' na forma

$$S'' - S' \approx 3\varepsilon'' \quad (4.4)$$

o que nos permitirá estimar se S'' se encontra já dentro da precisão desejada. Como é evidente, pode acontecer que o cumprimento da condição (4.3) exija uma precisão superior àquela em que estamos interessados, o que corresponderia a um certo desperdício de esforço de cálculo, certamente um preço justo a pagar pela segurança.

Para n crescente, o cociente (4.3) começa em geral por diminuir até próximo do valor teórico, por efeito da diminuição do erro de truncatura, voltando mais tarde a aumentar, o que testemunha domínio do erro de arredondamento sobre o erro de truncatura. Se, porém, o crescimento se inicia antes de o cociente se ter sequer aproximado do valor teórico, isso indica claramente que o método não é aplicável com a precisão de representação da máquina que estamos a utilizar.

Exemplo 4.2 Cociente de convergência

Apliquemos este raciocínio aos integrais do exemplo anterior (ver [Integral_seno.xls](#)): Para $I_{\pi/2}$ temos:

n	80	40	20	10	5
h	1,963495E-02	3,926991E-02	7,853982E-02	1,570796E-01	3,141593E-01
S	9,999679E-01	9,998715E-01	9,994859E-01	9,979430E-01	9,917618E-01
cociente	4,000386E+00	4,001543E+00	4,006184E+00		
ε''	3,212865E-05	1,285270E-04	5,143063E-04		
Erro Obs.	3,212782E-05	1,285138E-04	5,140948E-04	2,057014E-03	8,238231E-03

o que significa que, a partir de $n = 20$, já o passo é suficiente para funcionar como infinitesimal. Por outro lado, observar-se-á que esta nova estimativa do erro é francamente razoável.

Para I_π temos:

n	80	40	20	10	5
h	3,926991E-02	7,853982E-02	1,570796E-01	3,141593E-01	6,283185E-01
S	1,999743E+00	1,998972E+00	1,995886E+00	1,983524E+00	1,933766E+00
cociente	4,001543E+00	4,006184E+00	4,024930E+00		
ϵ''	2,570540E-04	1,028613E-03	4,120812E-03		
Erro Obs.	2,570276E-04	1,028190E-03	4,114027E-03	1,647646E-02	6,623440E-02

o que significa que, também neste caso, $n = 20$ é perfeitamente suficiente.

O mesmo acontece para $I_{3\pi/2}$:

n	80	40	20	10	5
h	5,890486E-02	1,178097E-01	2,356194E-01	4,712389E-01	9,424778E-01
S	9,997108E-01	9,988431E-01	9,953693E-01	9,814256E-01	9,248584E-01
cociente	4,003475E+00	4,013960E+00	4,056830E+00		
ϵ''	2,892322E-04	1,157934E-03	4,647900E-03		
Erro Obs.	2,891653E-04	1,156862E-03	4,630663E-03	1,857436E-02	7,514159E-02

Para $I_{2\pi}$, porém, o cálculo deixa claramente de ser de confiança dado o número ridículamente baixo de casas significativas que retivemos no resultado:

n	80	40	20	10	5
h	7,853982E-02	1,570796E-01	3,141593E-01	6,283185E-01	1,256637E+00
S	-3,616790E-16	5,911324E-16	1,533436E-16	-7,697835E-17	-1,444196E-17
cociente	-4,594706E-01	5,261029E-01	-2,715173E-01		
ϵ''	-3,176038E-16	1,459296E-16	7,677398E-17		
Erro Obs.	3,616790E-16	-5,911324E-16	-1,533436E-16	7,697835E-17	1,444196E-17

4.3 Regra de Simpson

Um defeito óbvio da regra dos trapézios é o de cometer um erro sistemático em intervalos em que a segunda derivada da integranda mantém sinal constante. Para o evitar e para aumentar, na generalidade, a precisão da aproximação, foi criado um algoritmo novo, a regra de Simpson que, em vez de substituir a curva pelas cordas definidas por cada par de pontos consecutivos, a substitui pelas parábolas definidas por cada trio de pontos consecutivos.

É fácil estabelecer que essa parábola é da forma

$$y = y_i + \frac{x - x_i}{h} \cdot (y_{i+1} - y_i) + \frac{(x - x_i) \cdot (x - x_{i+1})}{2h^2} \cdot (y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i)$$

de onde resulta que

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+2}} y \cdot dx &= \\ &= \int_{x_i}^{x_{i+2}} \left[y_i + \frac{x - x_i}{h} \cdot (y_{i+1} - y_i) + \frac{(x - x_i) \cdot (x - x_{i+1})}{2h^2} \cdot (y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i) \right] \cdot dx = \\ &= 2h \cdot \left[y_i + y_{i+1} - y_i + \frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i}{6} \right] = \frac{h}{3} [y_i + 4y_{i+1} + y_{i+2}] \end{aligned}$$

4 Quadratura e Cubatura

de modo que a soma dá

$$\int_{x_0}^{x_{2n}} y \cdot dx = \frac{h}{3} \cdot [y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + \dots + 4y_{2n-3} + 2y_{2n-2} + 4y_{2n-1} + y_{2n}] \quad (4.5)$$

4.3.1 A "fórmula" de erro

Quanto à fórmula do erro, procedendo como anteriormente, obtemos:

$$\varepsilon_i = -\frac{h^5}{90} \cdot f''''(\xi_i) \quad (x_i \leq \xi_i \leq x_{i+2})$$

e, somando sobre todos os valores de i , obtemos

$$\begin{aligned} \varepsilon &= -\frac{n \cdot h^5}{90} \cdot f''''(\xi) \\ &= -\frac{(x_n - x_0) \cdot h^4}{90} \cdot f''''(\xi) \quad (x_0 \leq \xi_i \leq x_{2n}) \\ &= -\frac{(x_n - x_0)^5}{90n^4} \cdot f''''(\xi) \end{aligned} \quad (4.6)$$

de onde resulta que:

- para uma dada amplitude do intervalo, o erro varia com o inverso da quarta potência do número de intervalos ou, de outro modo, com a quarta potência do passo de integração, pelo que o método dos trapézios se diz de *quarta ordem*; dado o facto de a complexidade computacional da fórmula de Simpson ser da mesma ordem da dos trapézios e a melhoria significativa da precisão que ela representa, preferi-la-emos em todos os casos;
- para um dado número de passos de integração (e sob a hipótese muito forte de que o majorante da terceira derivada se mantém), o erro cresce com a quinta potência da amplitude do intervalo, pelo que, se multiplicarmos o intervalo por k e quisermos manter a precisão, devemos multiplicar o número de passos por $k^{5/4}$.

4.3.2 Controlo do erro

Naturalmente, no caso mais corrente de não dispormos de um majorante da quarta derivada, poderemos sempre, como anteriormente, recorrer ao critério

$$\frac{S' - S}{S'' - S'} \approx 16 \quad (4.7)$$

com $h = h'/2 = h''/4$, e, quando ele for cumprido, poderemos estimar

$$S'' - S' \approx 15\varepsilon'' \quad (4.8)$$

Exemplo 4.3 Regra de Simpson

Sejam os integrais do exemplo anterior:

n	80	40	20	10
$I_{\pi/2}$	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
I_{π}	2.00011	2.00001	2.00000	2.00000
$I_{3\pi/2}$	1.00028	1.00002	1.00000	1.00000
$I_{2\pi}$	0	-2.1×10^{-13}	-2.6×10^{-13}	-4.1×10^{-12}

Observa-se, em relação ao exemplo anterior, um notável aumento da precisão, salvo no último integral, em que dominam os erros de arredondamento sobre os de truncatura.

Exercício 4.1 O leitor calculará I_{π} com a precisão adequada, tanto pelo método dos trapézios como pelo método de Simpson, de modo a poder calcular e comparar os cocientes de convergência e os erros calculados.

Exercício 4.2 Será o leitor capaz de estabelecer um cociente de convergência para um método de integração de ordem n e de estabelecer o correspondente estimador do erro?

Exercício 4.3 Enumere as dificuldades numéricas do cálculo do cociente de convergência, e quais as suas consequências em termos de utilização? (observe com cuidado o seu comportamento no exemplo 4.2)

4.4 Integrais impróprios

Um integral

$$\int_a^b f(x) . dx$$

diz-se impróprio se um dos limites (ou ambos) não é um número finito. Por razões de simplicidade, limitaremos a nossa discussão ao caso do integral

$$\int_a^{\infty} f(x) . dx$$

visto que o caso

$$\int_{-\infty}^b f(x) . dx = - \int_{+\infty}^b f(-x) . dx = \int_b^{+\infty} f(-x) . dx$$

se reduz a este sem qualquer dificuldade.

O *integral impróprio* diz-se *convergente* se existir I tal que

$$I = \lim_{b \rightarrow \infty} \left(\int_a^b f(x) . dx \right)$$

Se tal limite não existir ou for finito, então o integral diz-se *divergente* e não tem qualquer sentido, quer em termos analíticos quer numéricos. No que segue, suporemos, portanto, que o integral é convergente. Em cada caso particular, porém, o leitor terá que certificar-se previamente, por todos os meios ao seu alcance, da convergência do integral: com efeito, a abordagem por cálculo numérico sem tal certeza expõe-no a sérios riscos; para o efeito, a Análise Matemática fornece critérios e testes de convergência adequados; porém, em situações concretas, o próprio significado físico do integral e a natureza das aproximações e simplificações realizadas ao construir o modelo matemático do real poderão ajudar a determinar a validade de uma hipótese de convergência sem necessidade do recurso a testes analíticos.

O cálculo do integral impróprio, quando convergente, consegue-se, com uma precisão pre-especificada, se o representarmos na forma

$$\int_a^\infty f(x) . dx = \int_a^b f(x) . dx + \int_b^\infty f(x) . dx$$

Com efeito, o primeiro integral, qualquer que seja b finito, é um integral ordinário e o segundo tende para 0 quando b cresce; na prática, o valor de b pode ser estabelecido como aquele a partir do qual, dentro da precisão preestabelecida, já se não observa (persistentemente!) variação do resultado; porém, para isso, deve ir-se fazendo variar o passo de integração com a amplitude do intervalo de modo a manter constante o erro, tendo em consideração a ordem do método utilizado.

Exercício 4.4 Com base no que ficou dito, estabeleça uma estratégia para calcular um integral da forma

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

supondo que se sabe que é convergente.

4.5 Integrais singulares

Quando o intervalo de integração é finito mas a integranda (x) tem um número finito de descontinuidades infinitas (singularidades) nesse intervalo, estamos em presença do que chamamos um *integral singular*. Dado que é sempre possível (embora nem sempre fácil) partir o intervalo de integração em partes tais que, em cada uma, exista apenas uma singularidade, podemos limitar o nosso estudo ao caso de uma singularidade única. Um artifício adequado para o cálculo de um valor aproximado do integral singular é o *método de Kantorovich* que consiste em extrair da integranda $f(x)$ uma certa função $g(x)$ que

- tenha uma singularidade do mesmo tipo e ordem da de $f(x)$;
- seja integrável analiticamente;
- a diferença $f(x) - g(x)$ seja contínua.

Sob estas hipóteses, teremos

$$\int_a^b f(x) \cdot dx = \int_a^b g(x) \cdot dx + \int_a^b (f(x) - g(x)) \cdot dx$$

No presente estudo consideraremos apenas o caso de

- integrais da forma

$$\int_a^b \frac{f(x)}{(x-x_0)^\alpha} \cdot dx \quad a < x_0 < b \quad 0 < \alpha < 1$$

- sendo $f(x)$ contínuo em (a, b)
- e $f(x)$ dotada de derivadas contínuas em (a, b) até à ordem $n+1$.

Sob estas condições, podemos escrever $f(x)$ na forma de desenvolvimento em série de Taylor truncado:

$$f(x) = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} \cdot (x-x_0)^k + \varepsilon(x)$$

com

$$\varepsilon(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \cdot (x-x_0)^{n+1} \quad a < \xi < b$$

de onde resulta

$$\begin{aligned} \int_a^b \frac{f(x)}{(x-x_0)^\alpha} \cdot dx &= \\ &= \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} \cdot \int_a^b (x-x_0)^{k-\alpha} \cdot dx + \int_a^b \frac{\varepsilon(x)}{(x-x_0)^\alpha} \cdot dx \\ &= \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x_0)}{(k+1-\alpha)} \cdot \left[(b-x_0)^{k+1-\alpha} - (a-x_0)^{k+1-\alpha} \right] + \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \cdot (x-x_0)^{n+1-\alpha} \cdot dx \\ &= \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x_0)}{(k+1-\alpha)} \cdot \left[(b-x_0)^{k+1-\alpha} - (a-x_0)^{k+1-\alpha} \right] + f^{(n+1)}(\xi) \int_a^b \frac{(x-x_0)^{n+1-\alpha}}{(n+1)!} \cdot dx \end{aligned}$$

Este último integral é, por força das hipóteses, um integral próprio calculável analiticamente, pelo que o problema está resolvido a menos da incerteza introduzida por ξ ; para diminuir esta incerteza, podemos reduzir $b-a$ (continuando a impor $a < \xi < b$) a um valor tão pequeno quanto necessário para que a variação de $f^{(n+1)}(\xi)$ seja insignificante face à precisão exigida.

Exercício 4.5 Investigue as eventuais dificuldades da aplicação do método de Kantorovich ao

4 Quadratura e Cubatura

caso de a singularidade ocorrer precisamente em um dos extremos do intervalo de integração. Aplique os resultados a que chegar ao cálculo de

$$\int_0^{0.5} x^{-0.5} \cdot (1-x)^{-0.5} \cdot dx$$

4.6 Cubatura

As fórmulas da cubatura aplicam-se ao cálculo de *integrais duplos*

$$\int_a^A dx \cdot \int_b^B f(x, y) \cdot dy$$

Uma das mais simples e úteis resulta de aplicar a *regra de Simpson* nos seguintes termos: sendo o domínio de integração $aAbb$ um rectângulo de lados paralelos aos eixos, partamo-lo em quatro partes iguais pelas medianas dos lados e calculemos os integral interior pela regra de Simpson:

$$\begin{aligned} \int_a^A dx \cdot \int_b^B f(x, y) \cdot dy &= \\ &= \int_a^A \frac{h_y}{3} \cdot [f(x, y_0) + 4f(x, y_1) + f(x, y_2)] \cdot dx \\ &= \frac{h_y}{3} \cdot \left[\int_a^A f(x, y_0) \cdot dx + 4 \cdot \int_a^A f(x, y_1) \cdot dx + \int_a^A f(x, y_2) \cdot dx \right] \end{aligned}$$

Aplicando de novo a regra de Simpson a estes integrais, obtemos

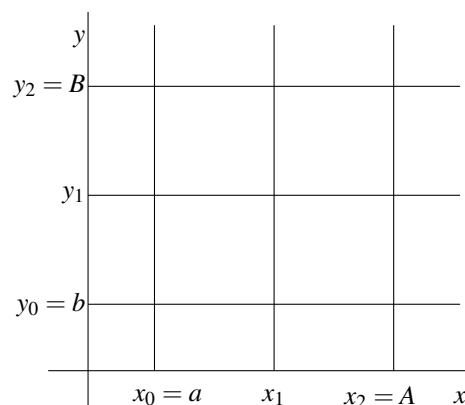


Figura 4.1: Regra de Simpson

$$\begin{aligned}
& \int_a^A dx. \int_b^B f(x, y) . dy = \\
& = \frac{h_x \cdot h_y}{9} \cdot \left\{ \begin{aligned} & [f(x_0, y_0) + 4f(x_1, y_0) + f(x_2, y_0)] + \\ & + 4 \cdot [f(x_0, y_1) + 4f(x_1, y_1) + f(x_2, y_1)] + \\ & + [f(x_0, y_2) + 4f(x_1, y_2) + f(x_2, y_2)] \end{aligned} \right\} \\
& = \frac{h_x \cdot h_y}{9} \cdot \left\{ \begin{aligned} & [f(x_0, y_0) + 4f(x_0, y_2) + f(x_2, y_0) + f(x_2, y_2)] + \\ & + 4 \cdot [f(x_1, y_0) + 4f(x_1, y_1) + f(x_2, y_1) + f(x_1, y_2)] + 16f(x_1, y_1) \end{aligned} \right\}
\end{aligned}$$

com

$$h_x = \frac{A - a}{2} \quad h_y = \frac{B - b}{2}$$

A fórmula de Simpson da cubatura é, portanto, da forma:

$$\iint f(x, y) . dx . dy = \frac{h_x \cdot h_y}{9} \cdot [\Sigma_0 + 4\Sigma_1 + 16\Sigma_2]$$

em que:

Σ_0 = soma dos valores de f nos vértices da malha

Σ_1 = soma dos valores de f nos pontos médios dos lados da malha

Σ_2 = valor de f no centro da malha

Se o rectângulo de integração é grande, a divisão a meio não chega, de modo que o domínio é dividido em $m \times n$ rectângulos, a cada um dos quais se aplica a fórmula anterior. Se o domínio de integração não é rectangular, considera-se o menor rectângulo que o contém e aplica-se o mesmo método fazendo $f = 0$ fora do domínio.

Exercício 4.6 Desenvolva uma fórmula de Simpson para o integral triplo.

Bibliografia

- [CB81] Conte and De Boor. *Elementary Numerical Analysis, an algorithmic approach*. McGraw-Hill International Editions, Singapore, 1981.
- [DB74] Dahlquist and Björck. *Numerical Methods*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, 1974.
- [Gol90] Herman H. Goldstine. *Remembrance of things past*. ACM Press - Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1990.
- [Gol91] Goldberg. What every computer scientist should know about floating-point arithmetic. *ACM Computing Surveys*, 23(1), March 1991.
- [Ham71] Hamming. *Introduction to applied numerical analysis*. McGraw-Hill-Kogakusha, Ltd., Tokyo, 1971.
- [JR75] Jensen and Rowland. *Methods of Computation*. Scott, Foresman & Co, Glenview, 1975.
- [Lie68] Lieberstein. *A course in numerical analysis*. Harper and Row, New York, 1968.
- [Moo63] Moore. *Interval Analysis*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1963.
- [Mul89] Muller. *Arithmétique des ordinateurs*. Masson, Paris, 1989.
- [Wal90] Wallis. *Improving floating-point programming*. Wiley, New York, 1990.
- [Wil65] Wilkinson. *Rounding errors in algebraic processes*. Clarendon Press, Oxford, 1965.
- [Zac96] Joseph L. Zachary. *Introduction to scientific programming: computational problem solving using Maple and C*. Springer Verlag New York Inc., New York, 1 edition, 1996.

Bibliografia

Índice

Ficheiros

Integral_seno.xls, 102, 104

Exemplos

Cociente de convergência, 104

Regra de Simpson, 106

Regra dos Trapézios, 102

integrais duplos, 110

integral definido, 100

integral impróprio, 108

integral indefinido, 99

integral singular, 108

método de Kantorovich, 108

regra de Simpson, 110

Impresso em 29 de Setembro de 2015 a partir dos seguintes ficheiros:

Analise_Numerica.tex	1.12	2015/09/29
Analise_Numerica.sty	1.13	2015/09/29
Titulo.tex	1.7	2015/09/29
4_Quadratura.tex	1.10	2015/09/24
