Instituto Superior de Engenharia de Coimbra

Análise Matemática II

Atividade03Trabalho

Máquina para Derivação e Integração

Licenciatura em Engenharia Informática

2019 / 2020

TheForgotten

someone@isec.pt

Conteúdo

1. Introdução

Tal como sugerido, neste trabalho foi realizada uma máquina para derivação e integração. O objetivo desta máquina é ser capaz de calcular analiticamente e numericamente derivadas e integradas (definidas).

Esta máquina é baseada em 3 GUIs: uma GUI "mãe" e duas GUIs "filhas". A primeira é responsável por obter as soluções analíticas para a derivada ou integrada duma dada função, as outras duas são responsáveis por obter as soluções aproximadas para o mesmo utilizando para isso os métodos numéricos sugeridos no enunciado.

2. Métodos Numéricos para Derivação

2.1. Fórmulas

Para todos os métodos, a fórmula para obter h, que se trata do passo de discretização, para o intervalo $[a, b]$ e n iterações é a seguinte:

$$\boldsymbol{h = \frac{b - a}{n}}$$

2.1.1. Diferenças finitas em 2 pontos

Progressivas:

$$\boldsymbol{f'(x_k) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h}}$$

Regressivas:

$$\boldsymbol{f'(x_k) = \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{h}}$$

2.1.2. Diferenças finitas em 3 pontos

Progressivas:

$$\boldsymbol{f'(x_k) = \frac{-3f(x_k) + 4f(x_{k+1}) - f(x_{k+2})}{2h}}$$

Regressivas:

$$f'(x_k) = \frac{f(x_{k-2}) - 4f(x_{k-1}) + 3f(x_k)}{2h}$$

Centradas:

$$f'(x_k) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_{k-1})}{2h}$$

2ª Derivada:

$$f''(x_k) = \frac{f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1})}{h^2}$$

2.2. Algoritmos / Funções

Todas as funções começam por calcular um vetor x que vai conter os valores de x que vamos usar para obter a aproximação e o n que corresponde ao número de iterações. Após isso todas elas verificam se recebem 4 argumentos e, no caso de ser verdade, cria um vetor y que vai conter os valores da função f para os x obtidos anteriormente. De seguida, alocam espaço para o vetor dydx que vai conter as aproximações.

Por fim, aplicam o método e, antes de acabarem, colocam para os valores incalculáveis o valor possível mais próximo, de modo a que o gráfico fique mais belo.

2.2.1. Diferenças finitas em 2 pontos

Progressivas:

```
function [x, y, dydx] = NDerivacaoDFP2(f, a, b, h, y)
x = a: h: b;
n = length(x);

if nargin == 4
    y = f(x);
end

dydx = zeros(1, n);

for i = 1: (n - 1)
    dydx(i) = (y(i + 1) - y(i)) / h;
end

dydx(n) = (y(n) - y(n - 1)) / h;
end
```

Por se tratar dum método progressivo, o ciclo for começa no valor 1 e vai até ao valor n-1.

Regressivas:

```
function [x, y, dydx] = NDerivacaoDFR2(f, a, b, h, y)
x = a: h: b;
n = length(x);

if nargin == 4
    y = f(x);
end

dydx = zeros(1, n);

for i = n: -1: 2
    dydx(i) = (y(i) - y(i - 1)) / h;
end

dydx(1) = (y(2) - y(1)) / h;

end
```

Por se tratar dum método regressivo, o ciclo for começa no valor n e vai até ao valor 2.

2.2.2. Diferenças finitas em 3 pontos

Progressivas:

```
function [x, y, dydx] = NDerivacaoDFP3(f, a, b, h, y)
x = a: h: b;
n = length(x);

if nargin == 4
    y = f(x);
end

dydx = zeros(1, n);

for i = 1: (n - 2)
    dydx(i) = (-3 * y(i) + 4 * y(i + 1) - y(i + 2)) / (2 * h);
end

dydx(n - 1) = (-3 * y(n - 2) + 4 * y(n - 1) - y(n)) / (2 * h);
dydx(n) = (-3 * y(n - 2) + 4 * y(n - 1) - y(n)) / (2 * h);
end
```

Por se tratar dum método progressivo o, o ciclo for começa no valor 1 e, por causa de ser em 3 pontos, vai até ao valor n-2.

Regressivas:

```
function [x, y, dydx] = NDerivacaoDFR3(f, a, b, h, y)
x = a: h: b;
n = length(x);

if nargin == 4
    y = f(x);
end

dydx = zeros(1, n);

for i = n: -1: 3
    dydx(i) = (y(i - 2) -4 * y(i - 1) + 3 * y(i)) / (2 * h);
end

dydx(2) = (y(1) -4 * y(2) + 3 * y(3)) / (2 * h);
dydx(1) = (y(1) -4 * y(2) + 3 * y(3)) / (2 * h);
end
```

Por se tratar dum método regressivo, o ciclo for começa no valor n e, por causa de ser em 3 pontos, vai até ao valor 3.

Centradas:

```
function [x, y, dydx] = NDerivacaoDFC3(f, a, b, h, y)
x = a: h: b;
n = length(x);

if nargin == 4
    y = f(x);
end

dydx = zeros(1, n);

for i = 2: (n - 1)
    dydx(i) = (y(i + 1) - y(i - 1)) / (2 * h);
end

dydx(1) = (y(3) - y(1)) / (2 * h);
dydx(n) = (y(n) - y(n - 2)) / (2 * h);
end
```

Por se tratar dum método centrado, o ciclo for começa no valor 2 e vai até ao valor n-1.

2ª Derivada:

```
function [x, y, dydx] = NDerivacaoDF2D(f, a, b, h, y)
x = a: h: b;
n = length(x);

if nargin == 4
    y = f(x);
end

dydx = zeros(1, n);

for i = 2: (n - 1)
    dydx(i) = (y(i + 1) - 2 * y(i) + y(i - 1)) / h^2;
end

dydx(1) = (y(3) - 2 * y(2) + y(1)) / h^2;
dydx(n) = (y(n) - 2 * y(n - 1) + y(n - 2)) / h^2;
end
```

Por se tratar dum método centrado, o ciclo for começa no valor 2 e vai até ao valor n-1.

3. Derivação Simbólica no MatLab

3.1. diff

Apesar de poder ser usada de mais maneiras, neste trabalho apenas utilizamos a função `diff()` com a sintaxe `diff(f(x))` pois apenas estamos interessados em calcular a primeira derivada da função fornecida. Se, por exemplo, quiséssemos calcular a terceira derivada, poderíamos chamar a função com um argumento extra que indica o número de vezes que derivamos, ou seja, `diff(f(x), 3)`.

Com isto, na derivação, há a pequena chance de a derivada ser uma constante e, nesse caso, o vetor com as soluções exatas passaria a ser um valor e isso cria problemas para o resto do programa (deixa de funcionar corretamente). Para contornar isto incluí o seguinte pedaço de código:

```
if size(sExata) == 1
      sExata = zeros(length(x), 1) + sExata;
      sExata = sExata.';
end
```

Basicamente, isto verifica se o tamanho do "vetor" sExata é 1 e, se isso se verificar, o que ele faz preencher esse vetor com 0 de modo a ficar com o mesmo tamanho que o vetor x (vetor que guarda os valores para os quais calculamos a diferencial) e em seguida soma a cada um desses 0 a constante. Por fim, transforma esse vetor (que fica na vertical) no seu transposto de modo a conseguir funcionar corretamente com o restante código.

4. Métodos Numéricos para Integração

4.1. Fórmulas

Para todos os métodos, a fórmula para obter h, que se trata do passo de discretização, para o intervalo $[a, b]$ e n iterações é a seguinte:

$$\boldsymbol{h = \frac{b-a}{n}}$$

4.1.1. Regra dos Trapézios

$$\boldsymbol{I_T(f) = \frac{h}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)]}$$

4.1.2. Regra de Simpson

$$\boldsymbol{I_S(f) = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)]}$$

4.2. Algoritmos / Funções

Ambas começam por calcular h e, de seguida, por fazer x = a e s = 0. Isto é necessário para que x tome o valor inicial que para que s esteja nulo de modo a se poder constantemente somar os valores do "interior" da fórmula sem adicionar lixo.

Como o algoritmo para estes métodos é fornecido pelo professor penso que dispensa grandes explicações.

4.2.1. Regra dos Trapézios

```
function sol = Trapezios(f, a, b, n)
    h = (b - a) / n;

    x = a;
    s = 0;

    for i = 1: (n - 1)
        x = x + h;
        s = s + (2 * f(x));
    end

    sol = (h / 2) * (f(a) + s + f(b));
end
```

4.2.2. Regra de Simpson

```
function sol = Simpson(f, a, b, n)
    h = (b - a) / n;

    x = a;
    s = 0;

    for i = 1: (n - 1)
        x = x + h;

        if (mod(i, 2) == 0)
            s = s + (2 * f(x));
        else
            s = s + (4 * f(x));
        end
    end

    sol = (h / 3) * (f(a) + s + f(b));
end
```

Como para este método é necessário fazer a distinção entre i ser par e i ser ímpar, a minha solução foi usar a função `mod()`. Da maneira que é chamada, esta função vai devolver o resto da divisão inteira de i por 2. Se o resto for 0 significa que i é par, se não significa que i é ímpar.

5. Integração Simbólica no MatLab

5.1 int

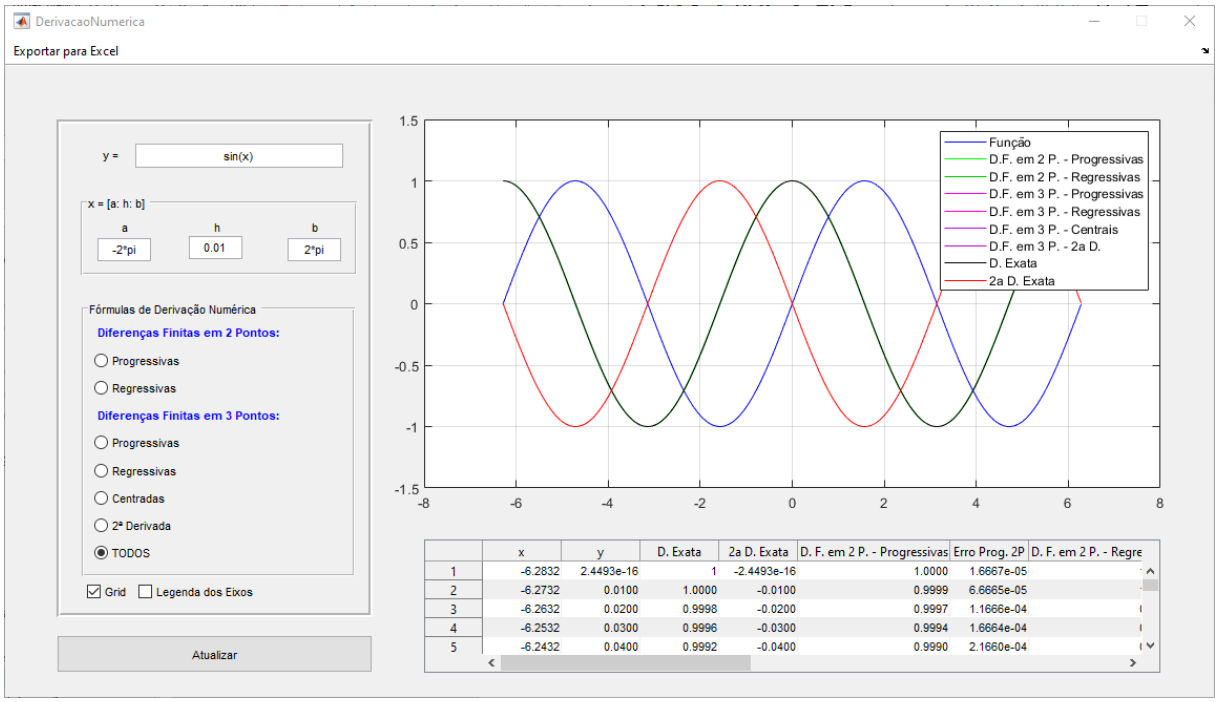
Esta função é utilizada para obter o valor exato dum dado determinado definido. Para isso, esta função deve ser invocada `int(f, x, a, b)` onde f é a função a integrar, x a variável escalar a respeitar e [a, b] o intervalo do integral.

Isto vai devolver uma expressão simbólica o que para o nosso caso é um problema pois para imprimir para a tabela os valores é necessário que estes sejam convertidos para string e não há maneira fácil de converter uma expressão simbólica para string em MatLab. Assim, o que podemos fazer é transformar a expressão simbólica num número usando `double()` e, em seguida, converter esse número para string usando `num2str()`.

6. Exemplos de Aplicação e Teste dos Métodos

6.1. Métodos Numéricos para Derivação

Seja $f(x) = \sin(x)$. Escrevendo esta função na nossa GUI e aplicando todos os métodos, podemos visualizar o seguinte:



Devido às limitações da GUI do MatLab, torna-se muito complicado gerir e manipular informação diretamente nela. Assim, comecemos por exportar os dados para Excel usando o botão no menu.

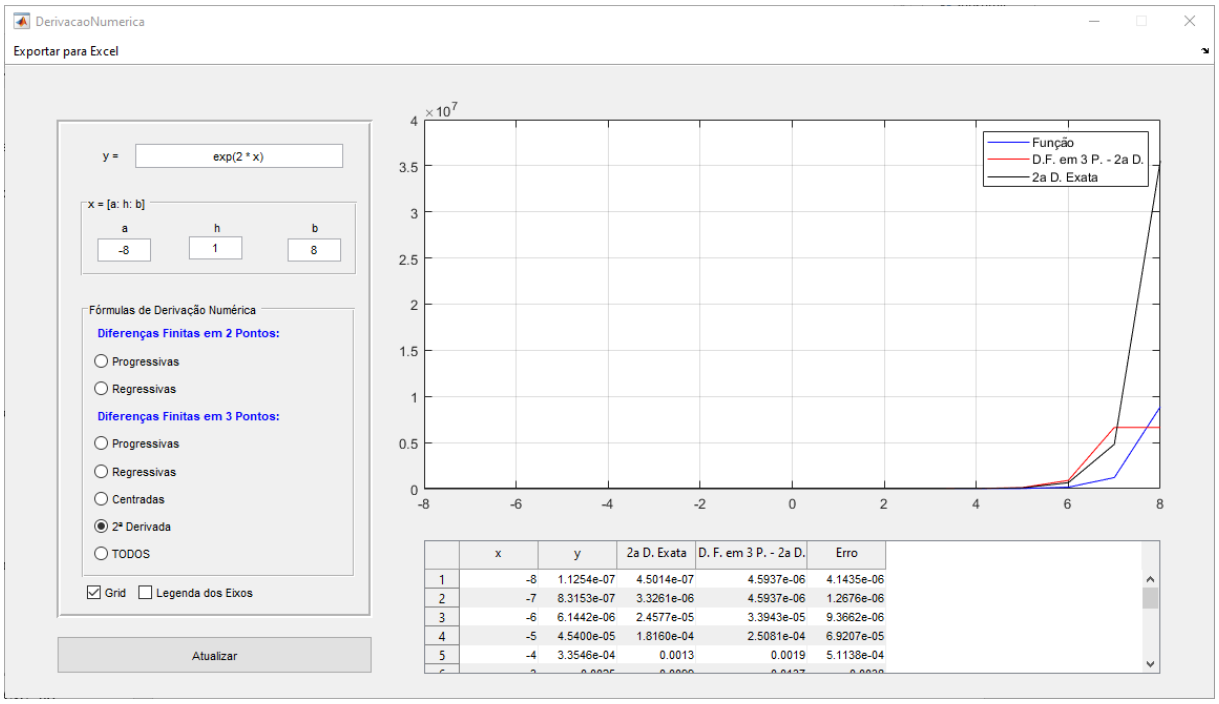
Já com os dados no Excel, para este caso, temos três colunas que não nos interessam de momento, que são as colunas para a segunda derivada, que serão apagadas. Dando uso às ferramentas disponibilizadas pelo Excel, facilmente obtemos a média do erro cometido por cada método numérico de derivação.

Método	Média Erro
Prog. 2P	0,003182191
Regr. 2P	0,003182188
Prog. 3P	2,15485E-05
Regr. 3P	0,000288465
Centrais 3P	1,07423E-05

Deste modo, podemos concluir que o método que oferece menor erro (em média) é o método centrado das diferenças finitas em 3 pontos.

Seja $f(x) = e^{2x}$. Qual o valor de $f''(-4)$?

Usando a GUI programada, inserindo a função no respetivo campo e selecionando o método para a segunda derivada, obtemos o seguinte:



O intervalo escolhido foi [-8, 8] e o $h = 1$ de modo a ter contido o valor que pretendemos obter.

Podemos assim concluir que $f''(-4) = 0.0013$ e que a solução aproximada dada pela fórmula da diferença finita em 3 pontos para a segunda derivada nos diz que $f''(-4) \approx 0.0019$.

6.2. Métodos Numéricos para Integração

Os exercícios foram tirados do PDF "Cap5_IntegracaoNumerica.pdf" que pode ser encontrado na secção **Derivação e Integração Numérica** da página da disciplina (AM2 no Moodle).

Exercício 1:

- a)

```
>> syms x
>> diff(exp(sin(x)), 2)

ans =

exp(sin(x))*cos(x)^2 - exp(sin(x))*sin(x)
```

Deste modo, ficamos a saber que $f^{(2)}(x) = e^{\sin(x)}[cos^2(x) - \sin(x)]$.

Utilizando a função `max()` do MatLab, conseguimos obter o máximo local para o intervalo de iteração sem ser preciso manipular a derivada da expressão.

```
>> dx = 0.000001;
>> x = pi/3: dx: pi/2;
>> for i = 1: length(x)
fx(i) = exp(sin(x(i))) * cos(x(i))^2 - exp(sin(x(i))) * sin(x(i));
end
>> [M, idx] = max(fx);
>> M

M =

   -1.4646
```

Deste modo, sabemos que $M_2 = -1.4646$.

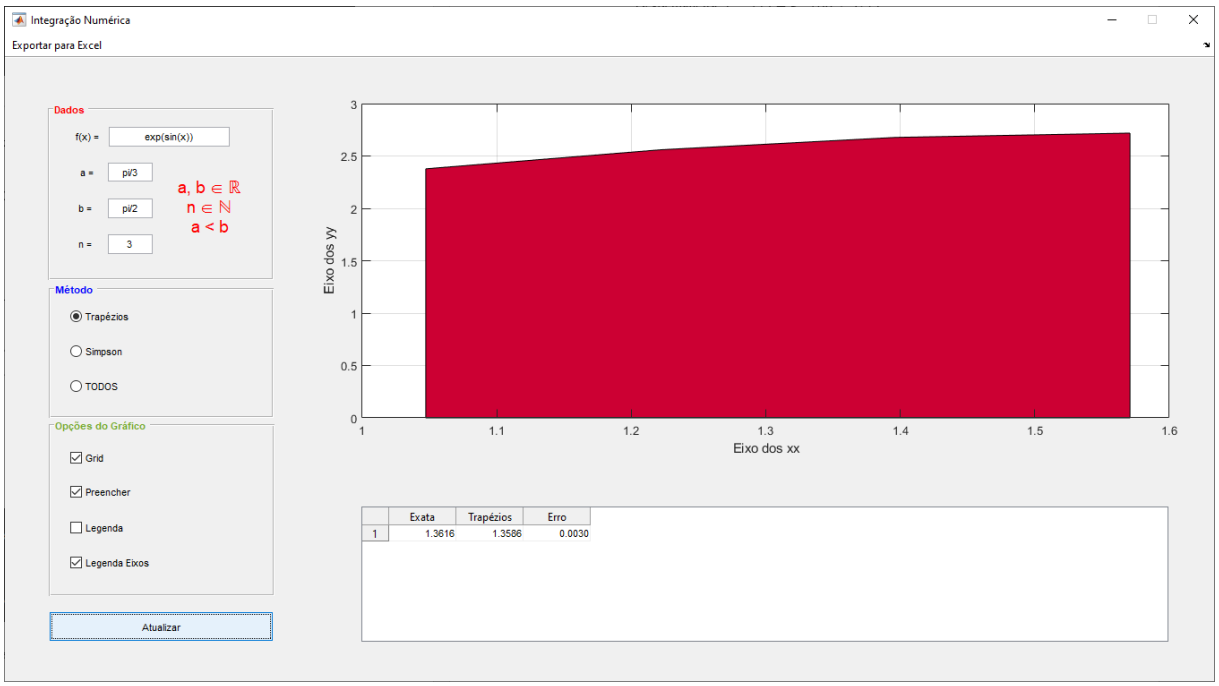
Assim, aplicando a fórmula do erro:

$$\frac{b-a}{12}h^2M_2 \leq 0.0031 \Leftrightarrow \frac{\frac{\pi}{2}-\frac{\pi}{3}}{12}h^2 * (-1.4646) \leq 0.0031 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \frac{\frac{\pi}{2}-\frac{\pi}{3}}{12}h^2 \leq -0.0021 \Leftrightarrow \left(\frac{\pi}{2}-\frac{\pi}{3}\right)h^2 \leq -0.0254 \Leftrightarrow 0.5236h^2 \leq -0.0254 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow h^2 \leq |-0.0485| \Leftrightarrow h^2 \leq 0.0485 \Rightarrow h \leq 0.2202$$

Assim, façamos $h = 0.2$. Para obter n façamos $n = \frac{\frac{\pi}{2}-\frac{\pi}{3}}{h} = 2.6180$. Deste modo, para manter o erro inferior a 0.0031, consideremos $n = 3$.



- b)

Para obter os pontos que precisamos de conhecer da integranda basta-nos apenas calcular um vetor que contenha os valores do intervalo [a, b] de h em h passos.

```
>> n = 3;
>> a = pi/3;
>> b = pi/2;
>> h = (b - a) / n;
>> a: h: b

ans =

    1.0472    1.2217    1.3963    1.5708
```

Assim, como podemos visualizar, os pontos que precisamos de conhecer da função integranda são $x = \{1.0472;\ 1.2217; 1.3963; 1.5708\}$.

Exercício 4:

- a)

```
>> syms x
>> diff(x * exp(2*x), 4)

ans =

32*exp(2*x) + 16*x*exp(2*x)
```

Deste modo, ficamos a saber que $f^{(4)}(x) = e^{2x}(32 + 16x)$.

Para calcularmos o máximo de $f^{(4)}$ precisamos da sua derivada.

```
>> diff(32*exp(2*x) + 16*x*exp(2*x))

ans =

80*exp(2*x) + 32*x*exp(2*x)
```

Desta maneira, $f^{(4)\prime}(x) = e^{2x}(80 + 32x)$.

Assim, calculando os zeros da função para posteriormente podermos obter o máximo no intervalo de integração:

$$f^{(4)\prime}(x) = 0 \Leftrightarrow e^{2x}(80 + 32x) = 0 \Leftrightarrow e^{2x} = 0\ (eq.imp.) \wedge 80 + 32x = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow 32x = -80 \Leftrightarrow x = -2.5$$

x	-2		-1
$f^{(4)\prime}$	+	+	+
$f^{(4)}$	mínimo local	+	Máximo local

$$f^{(4)}(-1) = e^{2*(-1)}(32 + 16 * (-1)) = \frac{1}{e^2}(32 - 16) = \frac{16}{e^2} \approx 2.1654$$

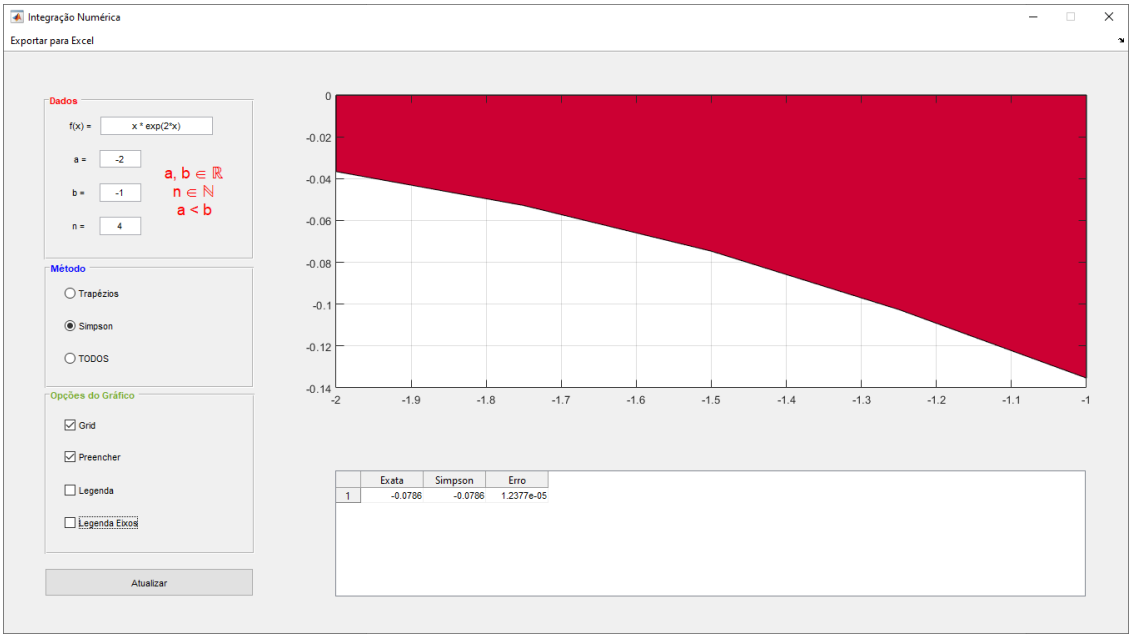
Deste modo, aplicando a fórmula do erro:

$$\frac{b-a}{180}h^4 M_4 \leq 0.0005 \Leftrightarrow \frac{-1-(-2)}{180}h^4 * 2.1654 \leq 0.0005 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \frac{h^4}{180} \leq 0.00023090 \Leftrightarrow h^4 \leq 0.0416 \Rightarrow h \leq 0.4516$$

- b)

Assim, façamos $h = 0.4$. Para obter n façamos $n = \frac{-1-(-2)}{h} = 2.5$. Deste modo, para manter o erro inferior a 0.0005, e como n tem de ser par para a regra de Simpson, consideremos $n = 4$.



7. Conclusão

Após a realização deste trabalho sinto que estou muito mais à vontade e entendo melhor o conceito de derivadas e integrais e os métodos numéricos dos mesmos. Assim, fico grato por ter a oportunidade de ter realizado este trabalho.