Métodos Numéricos I

Tema 5. Diferenciação e Integração Numérica.

Prof. Dany S. Dominguez
dsdominguez@gmail.br
Sala 1 – NBCGIB
(73) 3680 5212 – ramal 30

ROTEIRO

- Introdução
- Diferenciação numérica
  - Fórmula de Euler
  - Fórmulas de três pontos
  - Derivadas de ordem superior
- Integração numérica
  - Fórmula dos trapézios
  - Fórmula de Simpson
  - Grau de precisão
- Comentários finais

Introdução

- A diferenciação e a integração de funções aparece em numerosas aplicações das ciências e a engenharia
- A diferenciação está relacionada a fenômenos caracterizados por gradientes ou variações das grandezas em tempo e espaço
- Exemplos:
  - Segunda lei de Newton: $\vec{F} = m\dfrac{d\vec{v}}{dt}$
  - Lei da condução do calor: $Fluxo\ de\ Calor = -k\dfrac{dT}{dx}$
  - Movimento retilíneo uniforme: $v(t) = \dfrac{dS(t)}{dt}$

Introdução

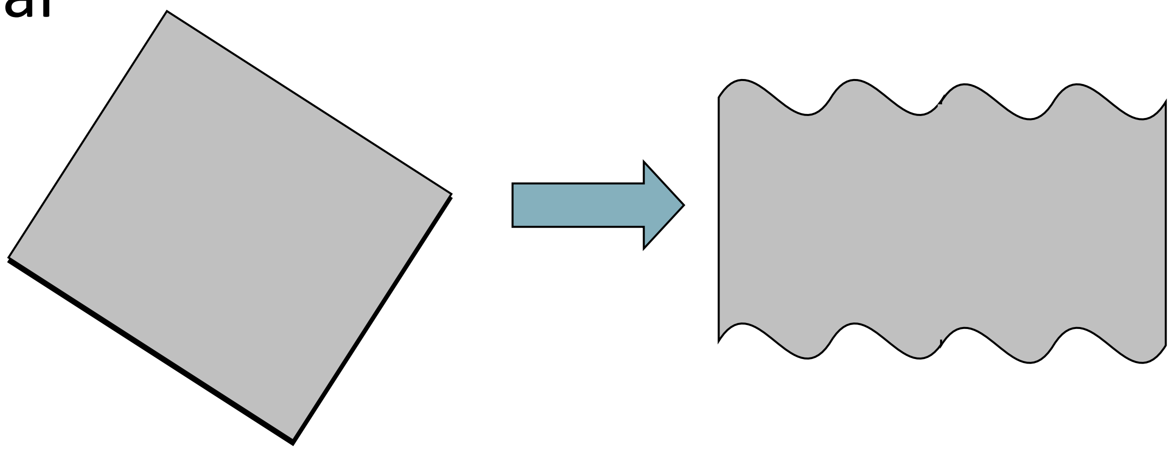
- A integração é utilizada em muitos modelos como as equações integrais e integro-diferencias,
- Ademais serve para quantificar grandezas médias ou totais.
- Exemplos:
  - Média de uma função: $Media = \frac{1}{b-a}\int_a^b f(x)dx$
  - Quantidades totais: $Total = \iiint_V f(x,y,z)dxdydz$
  - Distância percorrida: $S = \int_0^t v(t)dt$

Introdução

- Como diferenciar ou integrar uma função?
  1. **Função contínua simples** (polinomial, exponencial ou trigonométrica) o resultado é obtido analiticamente usando as regras do cálculo;
  2. **Função contínua complexa** neste caso é impossível ou tem um alto custo obter resultados analíticos;
  3. **Função tabulada (discreta)** onde valores de x e $f(x)$ são fornecidos para um número discreto de pontos, frequentemente estes dados são resultado de alguma pesquisa experimental ou estatística.
- Nas alternativas 2 e 3 devemos utilizar métodos numéricos que permitam obter valores aproximados da derivado ou integral.

Introdução

- **Exemplo 1**: Uma telha ondulada é construída prensando-se uma folha plana de alumínio de maneira que ela passe a ter a forma de onda senoidal



Uma folha ondulada de 1m de comprimento é necessária, a altura de cada onda é 0,1m e cada onda tem o período de 0,25m. Encontre o comprimento da folha plana inicial de alumínio.

Introdução

- **Exemplo 1** . . .
  - Equação da senoide

$$f(x) = Asen(\omega x)$$

$$\omega = \frac{2\pi}{T}$$

$$f(x) = Asen\left(\frac{2\pi x}{T}\right)$$

$$f(x) = \frac{1}{10} sen(8\pi x)$$

A – amplitude (altura da onda)
ω – frequência angular
T - período

$$A = 0,1$$

$$T = 0,25$$

  - Longitude do arco

$$L = \int_0^{\ell} \sqrt{1 + \left[f'(x) \right]^2} dx$$

Introdução

- **Exemplo 1** . . .
  - Derivada de f(x)

$$f'(x) = \frac{4\pi}{5}\cos(8\pi x)$$

  - Longitude do arco

$$L = \int_0^1 \sqrt{1 + \frac{16\pi^2}{25}\cos^2\left(8\pi x\right)}dx$$

  - Integral elíptica de segunda ordem,
  - Alta complexidade,
  - Mais simples utilizar uma aproximação numérica.

ROTEIRO

- Introdução
- Diferenciação numérica
  - Fórmula de Euler
  - Fórmulas de três pontos
  - Derivadas de ordem superior
- Integração numérica
  - Fórmula dos trapézios
  - Fórmula de Simpson
  - Grau de precisão
- Comentários finais

Diferenciação numérica

- Para resolver problemas de diferenciação e integração numérica pode-se utilizar aproximação polinomial
- As derivadas e integrais de polinômios são avaliadas de forma simples
- A maioria dos procedimentos numéricos para aproximar derivadas e integrais se baseiam em utilizar polinômios algébricos para representar as funções.

Diferenciação numérica

- **Teorema**: Se x_0, x_1, ... , x_{n-1} são números distintos no intervalo $[a,b]$ e se $f \in C^{n+1}[a,b]$, então para cada $x \in [a,b]$ existe um número $\zeta(x)$ em (a,b) tal que

$$f(x) = P_n(x) + \frac{f^{(n+1)}\left[\zeta(x)\right]}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n),$$

onde $P_n(x)$ é o polinômio interpolante de Lagrange

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} L_{n,k}(x) f(x_k) \quad .$$

Diferenciação numérica

- Considere uma função $f \in C^2[a,b]$ e um ponto arbitrário $x_0 \in [a,b]$
- Precisamos encontrar um método numérico para aproximar $f'(x_0)$
- Seja $x_1 = x_0 + h$ com $h \neq 0$ e pequeno o suficiente para $x_1 \in [a,b]$, usando o teorema anterior podemos escrever

$$f(x) = P_1(x) + \frac{f''\left[\zeta(x)\right]}{2}\left(x - x_0\right)\left(x - x_1\right)$$

onde $P_1(x)$ é o polinômio de Lagrange de primeira ordem.

Diferenciação numérica

- Substituindo a expressão do polinômio de Lagrange $P_1(x)$

$$f(x) = \frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)} f(x_0) + \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)} f(x_1) + \frac{f''[\zeta(x)]}{2}(x - x_0)(x - x_1)$$

- Considerando a definição $x_1 = x_0 + h$

$$f(x) = \frac{(x - x_0 - h)}{-h} f(x_0) + \frac{(x - x_0)}{h} f(x_0 + h) +$$

$$+ \frac{f''[\zeta(x)]}{2}(x - x_0)(x - x_0 - h)$$

Diferenciação numérica

- Derivando a equação anterior

$$f'(x) = \frac{f(x_0)}{-h} + \frac{f(x_0+h)}{h} + \frac{d}{dx}\left\{f''\left[\zeta(x)\right]\right\}\frac{\left(x-x_0\right)\left(x-x_0-h\right)}{2}$$
$$+\frac{2\left(x-x_0\right)-h}{2}f''\left[\zeta(x)\right]$$

- Avaliando a derivada em $x = x_0$

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} - \frac{h}{2}f''\left[\zeta(x)\right]$$

- Para pequenos valores de h podemos usar a **Fórmula de Euler** para aproximar $f'(x_0)$

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} \quad ,$$

Diferenciação numérica

- **Fórmula de Euler**
  - Apresenta limite superior para o erro $\dfrac{h}{2}M$,
  - onde M representa o máximo valor absoluto de $f''(x)$ em $[a,b]$.
  - Muitas vezes é chamada de aproximação em diferenças da primeira derivada
  - Fórmula de diferenças avançada se $h>0$
  - Fórmula de diferenças recuada se $h<0$
  - Coerente com a definição da primeira derivada de uma função num ponto $x=x_0$ quando $h\to 0$

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

Diferenciação numérica

- **Exemplo 2**: Considere a função $f(x)=ln(x)$. Use a fórmula de diferença avançada para avaliar $f'(1,8)$, com $h=0,1$, $h=0,01$ e $h=0,001$. Em cada caso estime um limite superior para o erro e calcule o erro absoluto em relação ao valor exato

$$f(x) = \ln(x)$$

  - Diferença avançada

$$f'(x) = \frac{f\left(x_0 + h\right) - f\left(x_0\right)}{h}$$

$$f'(1.8) = \frac{\ln(1,8 + h) - \ln(1,8)}{h}$$

Diferenciação numérica

- **Exemplo 2** . . .
  - Valor exato

$$f'(x) = 1/x, \quad f'(1,8) = 0,555555$$

  - Cota do erro

$$\frac{h}{2}M$$

  - M máximo da segunda derivada em *[1,7; 1,9]*

$$f''(x) = -1/x^2, \quad f''[1,7;1,9] = [-0,346021,-0,277008]$$

$$M = 0,346021$$

  - Erro absoluto

$$e_a = \left| f'(1.8) - 0.555555 \right|$$

Diferenciação numérica

- **Exemplo 2** . . .

	$f'(1.8)$	$hM/2$	e_r
$h=0.1$	0.540672	1.7301E-2	1.488E-2
$h=0.01$	0.554018	1.7301E-3	1.537E-3
$h=0.001$	0.555401	1.7301E-4	1.540E-4

  - Note um aumento na precisão dos resultados em função da diminuição de h
  - Note que efetivamente a cota do erro é maior que o erro absoluto

Diferenciação numérica

- A fórmula de Euler permite aproximar a derivada utilizando informação de dois pontos,
- A seguir obtemos uma fórmula mais geral para aproximar derivadas usando *(n+1)* pontos

- Considere que o conjunto $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ são $(n+1)$ números distintos num intervalo I e que $f \in C^{n+1}[a,b]$, usando o teorema temos

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} L_{n,k}(x) f(x_k) + \frac{f^{(n+1)}\left[\zeta(x)\right]}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

onde $L_{n,k}$ são os coeficientes do polinômio interpolador de Lagrange

Diferenciação numérica

- Seguimos a mesma sequência de passos que na fórmula de Euler,
- Primeiro, derivamos a expressão anterior

$$f'(x) = \sum_{k=0}^{n} L'_{n,k}(x) f(x_k) + \frac{d}{dx}\left\{\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!}\right\} f^{(n+1)}[\zeta(x)] + \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!}\frac{d}{dx}\left\{f^{(n+1)}[\zeta(x)]\right\}$$

- Na eq. anterior, para avaliarmos o erro precisamos conhecer as derivadas de ordem (n+1) da função
- Entretanto, se consideramos o cálculo de $f'(x)$ apenas para os valores de $x \in \{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$, $x=x_j$

$$\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!}\frac{d}{dx}\left\{f^{(n+1)}\left[\zeta(x)\right]\right\} \Rightarrow 0 \text{ quando } x = x_j$$

Diferenciação numérica

- Então considerando $x=x_j$ teremos

$$f'(x_j)=\sum_{k=0}^{n} L'_{n,k}(x_j)f(x_k)+\frac{f^{(n+1)}\left[\zeta(x)\right]}{(n+1)!}\prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n}\left(x_j-x_k\right)$$

- A **fórmula dos *(n+1)* pontos** para estimar $f'(x_j)$ aparece como

$$f'(x_j)=\sum_{k=0}^{n} L'_{n,k}(x_j)f(x_k)$$

- Uma cota para o limite superior do erro calcula-se como

$$\frac{M}{(n+1)!}\prod_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{n}\left(x_j-x_k\right)$$

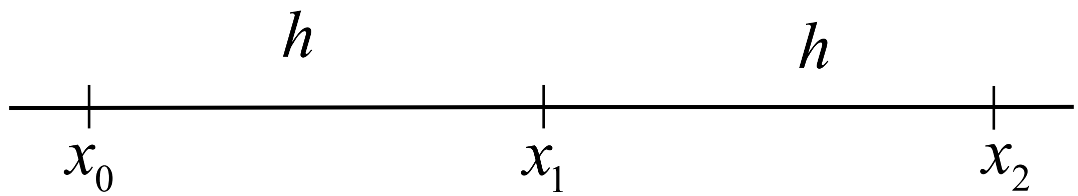
onde M é o máximo valor absoluto da derivada de ordem $n+1$ no intervalo

Diferenciação numérica

- A fórmula dos $(n+1)$ pontos é uma formulação geral
- Quanto maior o número de pontos utilizados na fórmula maior será a precisão da estimativa
- O elevado número de avaliações funcionais e o crescimento dos erros de arredondamento desencorajam a utilização de uma quantidade de pontos muito grande
- As fórmulas mais comuns são as de três e cinco pontos
- A seguir obtemos a fórmula de três pontos considerando o polinômio de Lagrange de segundo grau

Diferenciação numérica

- Considere três pontos equidistantes x_0, x_1 e x_2



$$j = 0,\ 1,\ 2 \qquad\qquad (n+1) = 3 \qquad\qquad n = 2$$

- A fórmula de 3 pontos aparece como

$$f'(x_j) = \sum_{k=0}^{2} L'_{2,k}(x_j) f(x_k) + \frac{M}{3!} \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^{2} \left(x_j - x_k \right)$$

$$f'(x_j) \cong L'_{2,0}(x_j) f(x_0) + L'_{2,1}(x_j) f(x_1) + L'_{2,2}(x_j) f(x_2) + R_2(x_j)$$

Diferenciação numérica

- Calculamos as derivadas dos coeficientes $L_{2,k}(x)$ do polinômio de Lagrange

$$L_{2,0}(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \rightarrow L'_{2,0}(x_j) = \frac{2x_j - x_1 - x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

$$L_{2,1}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \rightarrow L'_{2,1}(x_j) = \frac{2x_j - x_0 - x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

$$L_{2,2}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \rightarrow L'_{2,2}(x_j) = \frac{2x_j - x_0 - x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

- Os coeficientes da formula de 3 pontos para $x_j = x_0$,

$$L'_{2,0}(x_0) = -\frac{3}{2h} \qquad L'_{2,1}(x_0) = \frac{2}{h} \qquad L'_{2,2}(x_0) = -\frac{1}{2h}$$

Diferenciação numérica

- O resíduo quando $x_j = x_0$

$$R_2(x_0) = \frac{h^2}{3} M$$

- Substituindo, a fórmula para $f'(x_0)$ aparece como

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}\left[-\frac{3}{2} f\left(x_0\right) + 2 f\left(x_1\right) - \frac{1}{2} f\left(x_2\right)\right] + \frac{h^2}{3} M$$

- Seguindo o mesmo procedimento (Calcular os coeficientes e o resíduo)
- Obtemos $f'(x_1)$ e $f'(x_2)$

$$f'(x_1) = \frac{1}{h}\left[-\frac{1}{2} f\left(x_0\right) + \frac{1}{2} f\left(x_2\right)\right] - \frac{h^2}{6} M$$

$$f'(x_2) = \frac{1}{h}\left[\frac{1}{2} f\left(x_0\right) - 2 f\left(x_1\right) + \frac{3}{2} f\left(x_2\right)\right] + \frac{h^2}{3} M$$

Diferenciação numérica

- Reescrevemos as fórmulas de 3 pontos considerando $x_1=x_0+h$ e $x_2=x_0+2h$

$$f'(x_0)=\frac{1}{h}\left[-\frac{3}{2}f\left(x_0\right)+2f\left(x_0+h\right)-\frac{1}{2}f\left(x_0+2h\right)\right]+\frac{h^2}{3}M$$

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

$$f'(x_0+2h)=\frac{1}{h}\left[\frac{1}{2}f\left(x_0\right)-2f\left(x_0+h\right)+\frac{3}{2}f\left(x_0+2h\right)\right]+\frac{h^2}{3}M$$

- Por uma questão de conveniência consideramos as substituições na primeira $x_i= x_0$, na segunda $x_i=x_0+h$ e na terceira equação $x_i= x_0+2h$

Diferenciação numérica

- Fórmulas de 3 pontos . . .

$$f'(x_i) = \frac{1}{2h}[-3f(x_i) + 4f(x_i + h) - f(x_i + 2h)] + \frac{h^2}{3}M$$

$$f'(x_i) = \frac{1}{2h}[-f(x_i - h) + f(x_i + h)] - \frac{h^2}{6}M$$

$$f'(x_i) = \frac{1}{2h}[f(x_i - 2h) - 4f(x_i - h) + 3f(x_i)] + \frac{h^2}{3}M$$

- Notem, que a primeira e terceira fórmulas são equivalentes, isto pode ser comprovado ao substituirmos h por $-h$
- Existem então apenas duas fórmulas de 3 pontos

Diferenciação numérica

- **Fórmulas de 3 pontos**

$$f'(x_i) = \frac{1}{2h}[-3f(x_i) + 4f(x_i + h) - f(x_i + 2h)] + \frac{h^2}{3}M$$
$$f'(x_i) = \frac{1}{2h}[-f(x_i - h) + f(x_i + h)] - \frac{h^2}{6}M$$

  - Primeira = fórmula lateral
  - Segunda = fórmula centrada
  - As duas fórmulas apresentam erro da ordem $O(h^2)$
  - O erro da fórmula centrada é menor (metade) do erro da primeira
  - Isto é razoável, pois na fórmula centrada utilizamos informação a ambos os lados do ponto x_i

Diferenciação numérica

- **Fórmulas de 3 pontos . . .**
  - Na fórmula lateral utilizamos valores em apenas um lado (direita ou esquerda) do ponto x_i
  - Na fórmula centrada a função $f(x)$ é avaliada duas vezes e na fórmula lateral três vezes (custo)
  - A fórmula centrada e mais precisa e tem menor custo computacional que a fórmula lateral
  - Sempre que possível deve ser usada a fórmula centrada
  - Usamos a fórmula lateral para pontos nos extremos do intervalo, informações da função existem apenas de um lado
  - Usamos $h>0$ para o extremo esquerdo e $h<0$ para o direito

Diferenciação numérica

- **Exemplo 3:** Dada a função $f(x)=xe^x$ e considerando a tabela

Ponto	x	$f(x)$
0	1,8	10,889365
1	1,9	12,703199
2	2,0	14,778112
3	2,1	17,148957
4	2,2	19,855030

a) aproxime $f'(2,0)$ com os pontos *(0, 1 e 2)*

b) aproxime $f'(2,0)$ com os pontos *(1, 2 e 3)*

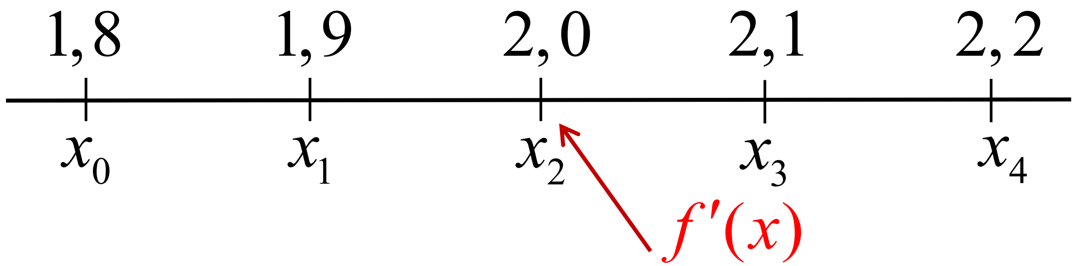
c) aproxime $f'(2,0)$ com os pontos *(2, 3 e 4)*

d) aproxime $f'(2,0)$ com os pontos *(0, 2 e 4)*

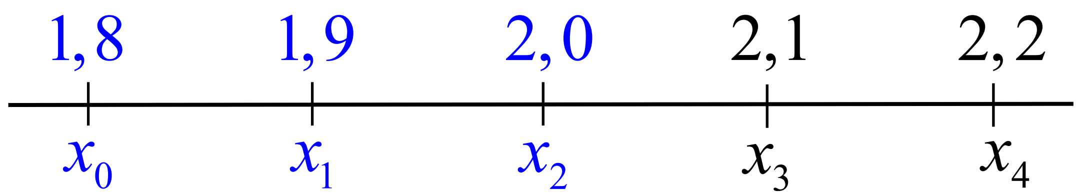
Em cada caso calcule o erro relativo com relação ao valor “exato” $f'(2.0)=22,16716830$

Diferenciação numérica

- **Exemplo 3 . . .**



a)



fórmula esquerda de três pontos $h = \textit{-0,1}$

$$f'(x_i) = \frac{1}{2|h|}[3f(x_i) - 4f(x_i - h) + f(x_i - 2h)]$$

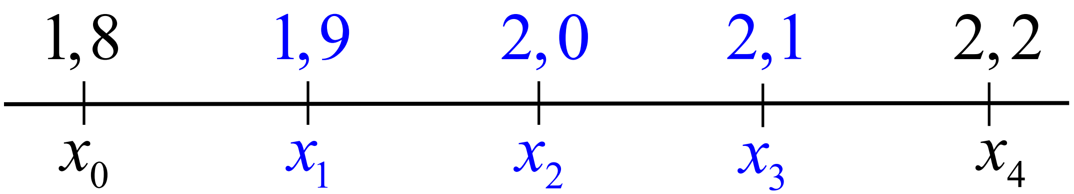
$$f'(2.0) = \frac{1}{2(0,1)}[3f(2,0) - 4f(1,9) + f(1,8)]$$

$$f'(2.0) = 22,054525 \qquad e_r = 5,081E - 3$$

Diferenciação numérica

- **Exemplo 3 . . .**

b)



fórmula centrada de três pontos $h = 0{,}1$

$$f'(x_i) = \frac{1}{2h}[-f(x_i - h) + f(x_i + h)]$$

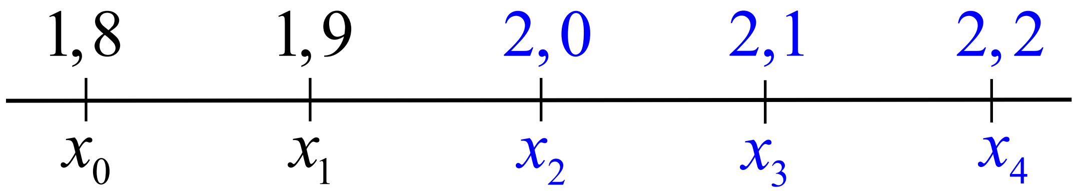
$$f'(2.0) = \frac{1}{2(0{,}1)}[-f(1{,}9) + f(2{,}1)]$$

$$f'(2.0) = 22{,}22879 \qquad e_r = 2{,}780E - 3$$

Diferenciação numérica

- **Exemplo 3 . . .**

c)



fórmula lateral (direita) de três pontos $h = 0,1$

$$f'(x_i) = \frac{1}{2h}[-3f(x_i) + 4f(x_i + h) - f(x_i + 2h)]$$

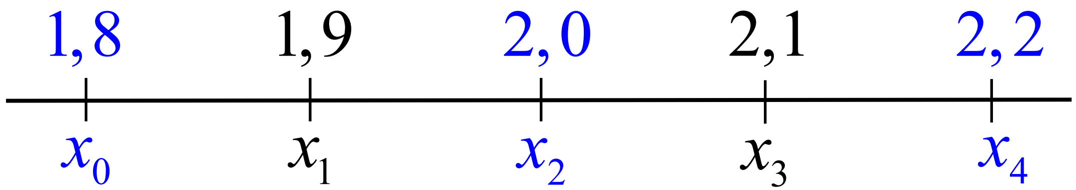
$$f'(2.0) = \frac{1}{2(0.1)}[-3f(2,0) + 4f(2,1) - f(2,2)]$$

$$f'(2.0) = 22,032310 \qquad e_r = 6,084E - 3$$

Diferenciação numérica

- **Exemplo 3 . . .**

d)



fórmula centrada de três pontos $h = 0,2$

$$f'(x_i) = \frac{1}{2h}[-f(x_i - h) + f(x_i + h)]$$

$$f'(2.0) = \frac{1}{2(0.2)}[-f(1.8) + f(2.2)]$$

$$f'(2.0) = 22.414163 \qquad e_r = 1.114E-3$$

Diferenciação numérica

- **Exemplo 3 . . .**
  - Resumo

	$f'(2.0)$	e_r
a)3P - LE h=0,1	22,054525	5,081E-3
b)3P - C h=0,1	22,228790	2,780E-3
c)3P - LD h=0,1	22,032310	6,084E-3
d)3P - C h=0,2	22,414163	1,114E-2

  - As fórmulas centradas oferecem resultados mais precisos e com menor custo computacional
  - O erro é proporcional ao quadrado do h

Diferenciação numérica

- Em algumas aplicações é desejável obtermos aproximações numéricas para derivadas de ordem superior
- Como poderíamos obter uma aproximação para a segunda derivada?
- A seguir obtemos uma fórmula de três pontos para aproximar a segunda derivada de uma função contínua
- Expandimos a função $f(x)$ em polinômios de Taylor de terceira ordem em torno do ponto x_0

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)\left(x - x_0\right) + f''(x_0)\frac{\left(x - x_0\right)^2}{2}$$

$$+ f'''(x_0)\frac{\left(x - x_0\right)^3}{6} + f^{(4)}(\zeta)\frac{\left(x - x_0\right)^4}{24}$$

Diferenciação numérica

- Para $x = x_0+h$

$$f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\zeta)$$

- Para $x = x_0-h$

$$f(x_0-h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) - \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\zeta)$$

- Somando e explicitando $f''(x_0)$

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}\left[f(x_0-h) - 2f(x_0) + f(x_0+h)\right] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\bar{\zeta})$$

- Podemos aproximar a segunda derivada na forma

$$f''(x_0) \cong \frac{1}{h^2}\left[f(x_0-h) - 2f(x_0) + f(x_0+h)\right]$$

Diferenciação numérica

- Com resíduo

$$\frac{h^2}{12}M$$

onde M representa o máximo da derivada de quarta ordem no intervalo $[x_0-h, x_0+h]$

- O erro da aproximação é de quarta ordem $O(h^2)$

- **Exemplo 4**: Usando os dados da tabela fornecida no exemplo 3 para a função $f(x)=xe^x$, aproxime $f''(2,0)$ com $h=0,1$ e $h=0,2$. Estime os erros relativos das aproximações.

Diferenciação numérica

- **Exemplo 4 . .**
  - Valor exato

$$f(x) = xe^x$$

$$f'(x) = e^x\left(x+1\right)$$

$$f''(x) = e^x\left(x+2\right)$$

$$f''(2,0) = 29,556224$$

  - Para $h = 0,1$

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

$$f''(2.0) = \frac{1}{\left(0,1\right)^2}\left[f\left(1,9\right) - 2f\left(2,0\right) + f\left(2,1\right)\right]$$

$$f''(2.0) = 29.5932 \qquad e_r = 1.251E-3$$

Diferenciação numérica

- **Exemplo 4 . .**
  - Para $h = 0,2$

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

$$f''(2,0) = \frac{1}{\left(0,2\right)^2}\left[f\left(1,8\right) - 2f\left(2,0\right) + f\left(2,2\right)\right]$$

$$f''(2,0) = 29,7043 \qquad e_r = 5,001E-3$$

	$f''(2.0)$	e_r
a)3P - C h=0,1	29,5932	1,251E-3
b)3P - C h=0,2	29,7043	5,001E-3

  - A estimativa para $h=0,1$ é superior a estimativa para $h=0,2$
  - O erro é proporcional a h^2