Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro

Programa de Pós-Graduação Mestrado em Modelagem Matemática e Computacional

Apostila da Disciplina: Métodos Numéricos: Parte 1

Prof. Carlos Andrés Reyna Vera-Tudela

Maio/2018

Parte 1

- INTRODUÇÃO

Equações Diferenciais são ferramentas essenciais na modelagem científica e devem ser familiares para profissionais das diversas áreas do conhecimento. São muitos os métodos conhecidos para resolver equações diferenciais e todos eles nos permitem conhecer o comportamento de um fenômeno dado, ou seja, a solução matemática de uma equação diferencial representa o comportamento físico do sistema estudado.

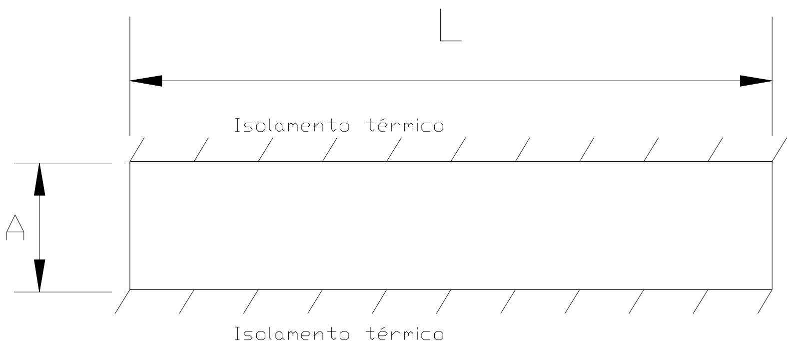
Desta forma, nossa expectativa deve ser tentar entender, tanto quanto possível, o que acontece a uma função que satisfaz a solução de uma equação diferencial. Assim, a um nível muito básico, poderemos saber o que acontece ou o que poderia acontecer no futuro nesse sistema.

Recentemente, com o avanço rápido na tecnologia dos computadores e sua capacidade de processamento crescendo cada dia mais, os métodos numéricos tornaram-se uma ferramenta de grande importância no desenvolvimento de novos algoritmos ou na melhora de outros. Então a pergunta que os iniciantes se fazem é quando utilizar os métodos numéricos? Em principio, podemos dizer que seu uso seria em equações diferenciais que no tem solução analítica conhecida, mas também podemos afirmar que, ainda que seja conhecida esta solução, muitas vezes ao resolver numericamente um problema temos um ganho considerável no tempo de trabalho.

Ao resolver uma equação diferencial de forma numérica estamos introduzindo naturalmente um erro devido às aproximações realizadas e é fundamental que este erro seja mantido a níveis bastante reduzidos de forma a garantir a correta representação do fenômeno.

- Revisão de Equações Diferenciais

Condução de Calor numa Barra



Considere:

- Barra de comprimento: L

- Seção Transversal: A

- Material condutor uniforme de calor

- Superfície lateral da barra isolada termicamente

O fluxo de calor se da somente na direção longitudinal. Assim o problema é considerado unidimensional, ou seja, as várias grandezas físicas são constantes em cada seção transversal.

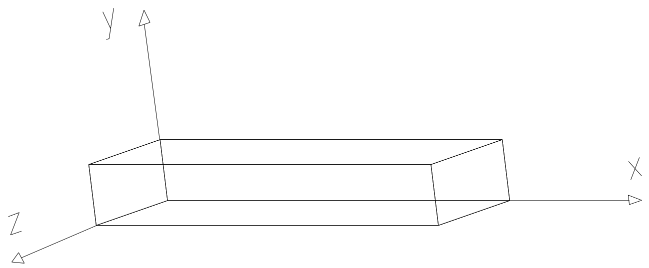
Lei de Resfriamento de Fourier: Considere duas placas P_1 e P_2, de áreas iguais a A, mantidas constantemente às temperaturas T_1 e T_2, respectivamente; se colocadas paralelamente a uma distância d uma da outra, haverá passagem de calor da placa mais quente para a mais fria, e a quantidade de calor, por unidade de tempo, transferida de uma placa para outra é dada por

$$Q = \frac{kA\,|T_2 - T_1|}{d} \tag{1}$$

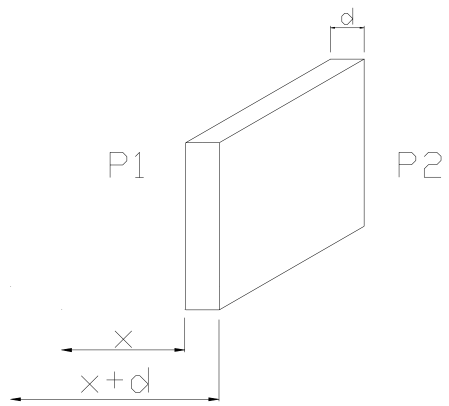
Onde k é a condutibilidade térmica do material entre as placas (cal/cm-s-ºC)

Seja:

$u(x,t)$ temperatura de um ponto de abscissa *x*, no tempo *t*.



Tomemos duas seções transversais da barra



Como a temperatura varia com o tempo, não podemos aplicar a Lei de Fourier. Para superar essa dificuldade, vamos introduzir a grandeza fluxo de calor através de uma seção *x*, num instante *t*.

- Fixe o tempo *t* na Eq. (1), faça $T_2 = u(x+d,t)$ e $T_1 = u(x,t)$

$$q(x,t) = \frac{kA\,|u(x+d,t) - u(x,t)|}{d}$$

e passe o limite quando d tende a zero. Assim:

$$q(x,t) = -kA\,u_x(x,t) \tag{2}$$

Onde : se $T_2 > T_1 \quad \Rightarrow \; u_x > 0$, mas como $Q\ (\longleftarrow) \;\Rightarrow\; q < 0$

se $T_1 > T_2 \quad \Rightarrow \; u_x < 0$, mas como $Q\ (\longrightarrow) \;\Rightarrow\; q > 0$

Fixemos um elemento de barra entre x_0 e $x_0 + \delta$, e vejamos qual é a quantidade de calor q que aí entra, no período de tempo entre t_0 e $t_0 + \tau$.

$$q(x,t) = \int_{t_0}^{t_0+\tau} q(x_0,t)dt - \int_{t_0}^{t_0+\tau} q(x_0+\delta,t)dt$$

ou

$$q(x,t) = \int_{t_0}^{t_0+\tau} kA\,[\,u_x(x_0+\delta,t) - \; u_x(x_0,t)]\,dt \tag{3}$$

Por outro lado, sabe-se que o calor especifico (c) de uma substância é a quantidade de calor necessária para elevar em 1º Celsius a temperatura de uma grama dessa substância e é dada pela expressão:

$$q(x,t) = \int_{t_0}^{t_0+\tau} \int_{x_0}^{x_0+\delta} c\,u_t(x,t)\;dx\,\rho\,A\,dt \tag{4}$$

onde ρ é a densidade da substância.

Usando o teorema fundamental do cálculo na Eq. (3)

$$q(x,t) = \int_{t_0}^{t_0+\tau} \int_{x_0}^{x_0+\delta} k\, A\, u_{xx}(x,t)\; dx\, dt \tag{5}$$

Podemos igualar as Eqs. (4) e (5) como segue:

$$\int_{t_0}^{t_0+\tau} \int_{x_0}^{x_0+\delta} k\, A\, u_{xx}(x,t)\; dx\, dt = \int_{t_0}^{t_0+\tau} \int_{x_0}^{x_0+\delta} c\, u_t(x,t)\; dx\, \rho\, A\, dt \tag{6}$$

Como a Eq. (6) é válida para todo $t_0 > 0$, todo $0 < x_0 < L$ e todos os $\tau > 0$ e $\delta > 0$, concluímos que:

$$k\, u_{xx}(x,t) = c\, \rho\, u_t(x,t)$$

Ou seja

$$u_t(x,t) = K\, u_{xx}(x,t) \tag{7}$$

onde $K = \frac{k}{\rho\, c}$ é chamado de difusibilidade térmica.

A Eq. (7) é a Equação de Calor Unidimensional e tem muitas soluções como por exemplo:

$$u(x,t) = c$$
$$u(x,t) = cx \qquad \text{c= constante}$$

Qual delas vai representar a distribuição de temperaturas na barra?

- Condição Inicial:

$$u(x,0) = f(x)$$

onde $f: [0, L] \to \mathbb{R}$

- Condições de Contorno ou de fronteira:

Tipo I: Suponhamos que as extremidades da barra sejam mantidas a temperaturas conhecidas

$$u(0,t) = T_1 \quad e \quad u(L,t) = T_2$$

Um caso mais complexo seria aquele em que se conhece a variação de temperatura em uma extremidade (ou em ambas), isto é:

$$u(0,t) = h_0(t) \quad e \quad u(L,t) = h_1(t)$$

Tipo II: Suponhamos que as extremidades estejam isoladas termicamente, ou seja, os fluxos de calor de $x = 0$ e $x = L$ são nulos,

Da Eq. (2) temos

$$u_x(0,t) = u_x(L,t) = 0$$

Tipo III: Suponhamos que o meio ambiente tenha temperatura u_0 e que haja transferência de calor entre a barra e o meio ambiente, regida pela lei

$$k\, u_x(0,t) = e\,\{u(0,t) - u_0\}$$

$$-k\, u_x(L,t) = e\,\{u(L,t) - u_0\}$$

onde e é uma constante, dita emissividade, característica do par constituído pelo material da barra e pelo meio ambiente.

Tipo IV: Uma combinação de duas quaisquer das condições acima, como por exemplo:

$$u(0,t) = 0 \quad e \quad u_x(L,t) = 0$$

Exercicios

1.- Deduza a equação diferencial do Pendulo Simples e depois, fazendo as simplificações necessárias, obtenha a formula utilizada na física.

2.- Disserte sobre a leis de Kepler.

- DERIVAÇÃO E INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

1 Diferenciação Numérica[1]

A derivada da função f em x_0 é

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

Então, uma aproximação de $f'(x)$ é

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

é valido para pequenos valores de h. Ainda que isso possa parecer óbvio, esse procedimento não é muito bem sucedido em virtude do erro de arredondamento. Mas certamente é um ponto de partida.

Para aproximar $f'(x_0)$ suponhamos primeiro que $x_0 \in (a,b)$, onde $f \in C^2[a,b]$ e $x_1 = x_0 + h$ para qualquer $h \neq 0$ suficientemente pequeno para assegurar que $x_1 \in [a,b]$. Construiremos o polinômio de Lagrange $P_{0,1}(x)$ de 1º grau para f determinado por x_0 e x_1 com o termo de erro:

$$f(x) = P_{0,1}(x) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2!} f''(\xi(x))$$

$$= \frac{f(x_0)(x-x_0-h)}{-h} + \frac{f(x_0+h)(x-x_0)}{h} + \frac{(x-x_0)(x-x_0+h)}{2!} f''(\xi(x))$$

com o termo de erro $\xi(x)$ em $[a,b]$. Diferenciando a equação anterior, temos

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

[1] Burden, R.L. e Faires, J.D., 2008, Análise Numérica, Ed. Thomson

$$= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + \frac{2(x - x_0) - h}{2} f''(\xi(x))$$
$$+ \frac{(x - x_0)(x - x_0 + h)}{2!} D_x(f''(\xi(x)))$$

e então

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

Uma dificuldade com essa formulação é que não temos nenhuma informação sobre $D_x(f''(\xi(x)))$, de maneira que o erro de truncamento não pode ser estimado. Quando *x* é igual a x_0, o coeficiente de $D_x(f''(\xi(x)))$ é igual a zero, e a formula é simplificada para

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

Para pequenos valores de *h*, o quociente da diferença $\frac{[f(x_0+h)-f(x_0)]}{h}$ pode ser utilizado para aproximar $f'(x_0)$ com erro limitado por $\frac{M\,|h|}{2}$, onde *M* é o limite em $|f''(x)|$ para $x \in [a, b]$. Essa formula é conhecida como fórmula da diferença superior se $h>0$, e fórmula da diferença inferior se $h<0$.

Assim, resumindo:

Diferença superior ou ascendente: $f'(x_0) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$

Diferença inferior ou descendente: $f'(x_0) = \frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}$

Diferença central; $f'(x_0) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$

Exemplo 1

Seja $f(x) = \ln x$ e $x_0 = 1.8$

A formula de diferença superior

$$\frac{f(1.8 + h) - f(1.8)}{h}$$

é utilizada para aproximar $f'(1.8)$ com erro

$$\frac{|hf''(\xi(x))|}{2} = \frac{h}{2\xi^2} \leq \frac{h}{2(1.8)^2} \quad onde \quad 1.8 < \xi < 1.8 + h$$

Então

h	$f(1.8+h)$	$\dfrac{f(1.8+h)-f(1.8)}{h}$	$\dfrac{h}{2(1.8)^2}$
0.1	0.64185389	0.5406722	0.0154321
0.01	0.59332685	0.5540180	0.0015432
0.001	0.58834207	0.5554013	0.0001543

Como $f'(x) = \frac{1}{x}$, o valor exato de $f'(1.8)$ é $0.55\bar{5}$ e os limites de erro são bastante próximos do verdadeiro erro de aproximação.

Código Máxima: arquivo Ex1_Cap2.wxm

Para obter fórmulas gerais de aproximação de derivadas, vamos supor que $\{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$ sejam *n+1* números diferentes em algum intervalo I e que $f \in C^{n+1}(I)$.

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)L_k(x) + \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x))$$

para qualquer $\xi(x)$ em I, onde $L_k(x)$ indica o k-ésimo coeficiente polinomial de Lagrange para f em $x_0, x_1, \cdots, x_n$.

Diferenciando temos

$$f'(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)L_k'(x) + D_x\left[\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!}\right] f^{(n+1)}(\xi(x)) + \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} D_x\left[f^{(n+1)}(\xi(x))\right]$$

Novamente, temos um problema para estimar o erro de truncamento, a menos que x seja um dos números x_j. Nesse caso, o termo que multiplica $D_x\left[f^{(n+1)}\left(\xi(x)\right)\right]$ é zero, e a formula se torna

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

que é chamada fórmula de *(n+1)* pontos para aproximar $f'\left(x_j\right)$.

- Fórmula de Três pontos

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \quad \rightarrow L'_0(x) = \frac{2x-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

Do mesmo modo:

$$L'_1(x) = \frac{2x-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

$$L'_2(x) = \frac{2x-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

Portanto

$$f'\left(x_j\right) = f(x_0)\left[\frac{2x_j-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\right] + f(x_1)\left[\frac{2x_j-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\right]$$
$$+ f(x_2)\left[\frac{2x_j-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\right] + \frac{1}{6}f^{(3)}\left(\xi_j\right)\prod_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{2}\left(x_j-x_k\right) \qquad j = 0,1,2$$

Consideremos que os nós têm um espaçamento igual

$$\begin{matrix} x_1 = x_0 + h \\ x_2 = x_0 + 2h \end{matrix} \quad para\ qualquer\ h \neq 0$$

Seja $x_j = x_0$, temos

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}\left[-\frac{3}{2}f(x_0) + 2f(x_1) - \frac{1}{2}f(x_2)\right] + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)$$

Para $x_j = x_1$

$$f'(x_1) = \frac{1}{h}\left[-\frac{1}{2}\, f(x_0) + \frac{1}{2} f(x_2)\right] - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1)$$

E para $x_j = x_2$

$$f'(x_2) = \frac{1}{h}\left[\frac{1}{2}\, f(x_0) - 2f(x_1) + \frac{3}{2} f(x_2)\right] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_2)$$

Na medida em que $x_1 = x_0 + h$ e $x_2 = x_0 + 2h$ podemos escrever

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}\left[-\frac{3}{2}\, f(x_0) + 2f(x_0 + h) - \frac{1}{2} f(x_0 + 2h)\right] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_0)$$

$$f'(x_0 + h) = \frac{1}{h}\left[-\frac{1}{2}\, f(x_0) + \frac{1}{2} f(x_0 + 2h)\right] - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1)$$

e

$$f'(x_0 + 2h) = \frac{1}{h}\left[\frac{1}{2}\, f(x_0) - 2f(x_0 + h) + \frac{3}{2} f(x_0 + 2h)\right] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_2)$$

Por uma questão de conveniência, a substituição da variável $x_0 + h$ por x_0 é utilizada na equação do meio para mudar essa fórmula para uma aproximação de $f'(x_0)$. Uma mudança similar $x_0 + 2h$ por x_0 é utilizada na última equação. Isto nos dá três fórmulas para aproximar $f'(x_0)$.

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3\, f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_0)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-\, f(x_0 - h) + f(x_0 + h)] - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1)$$

e

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[\, f(x_0 - 2h) - 4f(x_0 - h) + 3f(x_0)] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_2)$$

Finalmente, cabe notar que, na medida em que a última dessas equações pode ser obtida a partir da primeira simplesmente substituindo h por $-h$, existem na verdade apenas duas formulas

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3\,f(x_0) + 4f(x_0+h) - f(x_0+2h)] + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)$$

onde ξ_0 está entre x_0 e x_0+2h, e

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[f(x_0+h) - f(x_0-h)] - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)$$

onde ξ_1 está entre (x_0-h) e (x_0+h).

- Fórmula de cinco pontos

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

onde ξ está entre $x_0 - 2h$ e $x_0 + 2h$

Nos extremos

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}\,[-25\,f(x_0) + 48f(x_0+h) - 36\,f(x_0+2h) + 16\,f(x_0+3h) - 3\,f(x_0+4h)] + \frac{h^4}{5}\,f^{(5)}(\xi)$$

onde ξ está entre x_0 e $x_0 + 4h$

Exemplo 2

Os valores de $f(x) = xe^x$ são

x	*f(x)*
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

Como $f'(x) = (x+1)e^x$ temos $f'(2.0) = 22.167168$

Fórmulas de três pontos

$$h = 0.1 \quad \rightarrow \frac{1}{0.2}[-3\,(f(2.0) + 4f(2.1) - f(2.2)] = 22.03231 \qquad e = 1.35x10^{-1}$$

$$h = -0.1 \quad \rightarrow \frac{1}{-0.2}[-3\,(f(2.0) + 4f(1.9) - f(1.8)] = 22.054525 \quad e = 1.13x10^{-1}$$

$$h = 0.1 \quad \rightarrow \frac{1}{0.2}[\,(f(2.1) - f(1.9)] = 22.22879 \qquad e = -6.16x10^{-2}$$

$$h = 0.2 \quad \rightarrow \frac{1}{0.4}[\,(f(2.2) - f(1.8)] = 22.414163 \qquad e = -2.47x10^{-1}$$

Fórmula de cinco pontos

$$h = 0.1 \rightarrow \frac{1}{0.2}[(f(1.8) - 8f(1.9) + 8f(2.1) - f(2.2)] = 22.166996$$

$$e = 1.69x10^{-4}$$

Código Máxima: arquivo Ex2_Cap2.wxm

- Aproximação para a derivada segunda

Vamos expandir uma função f em um polinômio de Taylor de 3º Grau em torno do ponto x_0 e calcular $x_0 + h$ e $x_0 - h$.

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{1}{2}f''(x_0)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x_0)h^3 + \frac{1}{24}f^{(4)}(\xi_1)h^4$$

e

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{1}{2}f''(x_0)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x_0)h^3 + \frac{1}{24}f^{(4)}(\xi_{-1})h^4$$

onde $x_0 - h < \xi_{-1} < x_0 < \xi_1 < x_0 + h$.

Somando membro a membro

$$f(x_0 + h) + f(x_0 - h) = 2f(x_0) + f''(x_0)h^2 + \frac{1}{24}\left[f^{(4)}(\xi_{-1}) + f^{(4)}(\xi_1)\right]h^4$$

Resolvendo para $f''(x_0)$

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}[f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)] - \frac{h^2}{24}\left[f^{(4)}(\xi_{-1}) + f^{(4)}(\xi_1)\right]$$

Suponha que $f^{(4)}$ seja contínua em $[x_0 - h, x_0 + h]$. Como

$$\frac{1}{2}\left[f^{(4)}(\xi_{-1}) + f^{(4)}(\xi_1)\right]$$

está entre $f^{(4)}(\xi_{-1})$ e $f^{(4)}(\xi_1)$, o Teorema do Valor Intermediário implica que existe um número ξ entre ξ_1 e ξ_{-1} e portanto em $(x_0 - h, x_0 + h)$, com

$$f^{(4)}(\xi) = \frac{1}{2}\left[f^{(4)}(\xi_{-1}) + f^{(4)}(\xi_1)\right]$$

Finalmente

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

para qualquer ξ entre $x_0 - h < \xi < x_0 + h$.

Exemplo 3

Com os dados do exemplo anterior para $f(x) = xe^x$ aproximar $f''\,(2.0)$

$$f''\,(x) = (x + 2)e^x \rightarrow f''\,(2.0) = 29.556224$$

Sol.

$$h = 0.1 \rightarrow f''\,(2.0) = \frac{1}{0.01}[f(1.9) - 2f(2.0) + f(2.1)] = 29.5932$$

$$e = -3.70x10^{-2}$$

$$h = 0.2 \rightarrow f''(2.0) = \frac{1}{0.01}[f(1.8) - 2f(2.0) + f(2.2)] = 29.704275$$

$$e = -1.48x10^{-1}$$

Código Máxima: arquivo Ex3_Cap2.wxm

2 Integração Numérica[2]

Freqüentemente nos deparamos com a necessidade de calcular a integral definida de uma função sem antiderivada explícita ou cuja antiderivada não é simples de obter. O método básico envolvido na aproximação de $\int_a^b f(x)dx$ é chamado de quadratura numérica, e utiliza um somatório

$$\sum_{i=0}^{n} a_i\, f(x_i)$$

para aproximar $\int_a^b f(x)dx$

Os métodos de quadratura neste texto estão baseados no polinômio interpolador de Lagrange

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)L_i(x)$$

Inicialmente selecionamos um conjunto de nós distintos $\{x_0, x_1, \cdots, x_n\}$ do intervalo $[a, b]$, e integramos o polinômio de Lagrange e o seu termo de erro para obter:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \sum_{i=0}^{n} f(x_i)L_i(x)\ dx + \int_a^b \prod_{i=0}^{n}(x - x_j)\frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}dx$$

$$= \sum_{i=0}^{n} a_i\, f(x_i) + \int_a^b \prod_{i=0}^{n}(x - x_j)\frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}dx$$

onde $\xi(x)$ está em $[a, b]$ para cada x e

$$a_i = \int_a^b L_i(x)\ dx$$

para cada $i = 0, 1, 2, 3, \cdots, n$

A formula de quadratura é

[2] Burden, R.L. e Faires, J.D., 2008, Análise Numérica, Ed. Thomson

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

Com um erro dado por:

$$E(f) = \int_a^b \prod_{i=0}^{n} \left(x - x_j\right) \frac{f^{(n+1)}\left(\xi(x)\right)}{(n+1)!}\, dx$$

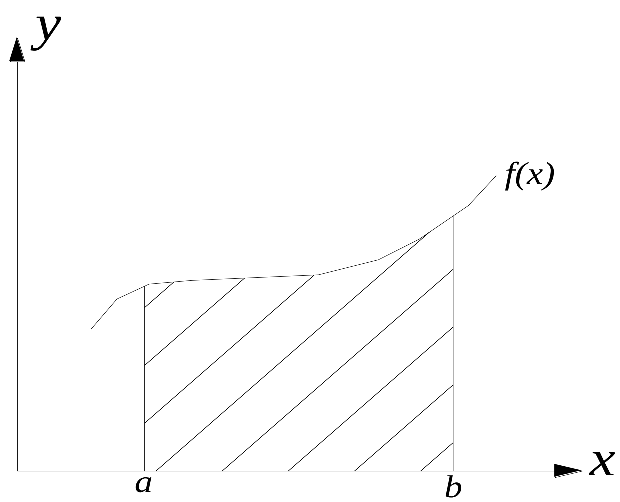
- Regra do Trapézio

Façamos $x_0 = a,\, x_1 = b,\, h = b - a$

$$P_1(x) = \frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)}\, f(x_0) + \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)}\, f(x_1)$$

Assim

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} \left[\frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)}\, f(x_0) + \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)}\, f(x_1)\right] dx$$
$$+ \frac{1}{2} \int_{x_0}^{x_1} f''\left(\xi(x)\right)(x - x_0)\,(x - x_1)\, dx$$



Como $(x - x_0)(x - x_1)$ não mudam de sinal em $[x_0, x_1]$ o Teorema do Valor Médio Ponderado para Integrais pode ser aplicado ao termo de erro, para dar, para qualquer ξ em (x_0, x_1).

$$\int_{x_0}^{x_1} f''\left(\xi(x)\right)(x - x_0)\,(x - x_1)\,dx = f''(\xi)\int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)\,(x - x_1)\,dx$$

$$= f''(\xi)\left[\frac{x^3}{3} - \frac{(x_1 + x_0)}{2}x^2 + x_0x_1x\right]_{x_0}^{x_1} = -\frac{h^3}{6}f''(\xi)$$

Então

$$\int_a^b f(x)dx = \left[\frac{(x - x_1)^2}{2(x_0 - x_1)}\,f(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2(x_1 - x_0)}\,f(x_1)\right]_{x_0}^{x_1} - \frac{h^3}{6}f''(\xi)$$

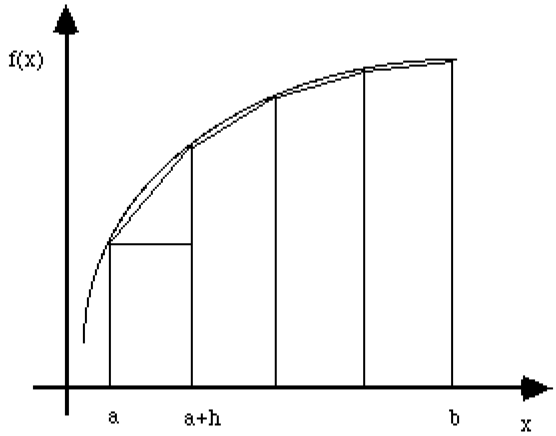
$$= \frac{(x_1 - x_0)}{2}[f(x_0) + f(x_1)] - \frac{h^3}{6}f''(\xi)$$

$$= \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] - \frac{h^3}{6}f''(\xi)$$

Na medida em que o termo de erro envolve f'', a regra dá o resultado exato quando aplicada a qualquer função cuja derivada de 2ª ordem seja igual a zero, isto é, a qualquer polinômio de 1º grau ou menor.

- Regra de Simpson

É resultado da integração em $[a, b]$ do polinômio de Lagrange de 2ª ordem com nós $x_0 = a$, $x_2 = b$ e $x_1 = a + h$, onde $h = \frac{b-a}{2}$



$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} \left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\, f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\, f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\, f(x_2)\right] dx + \int_{x_0}^{x_2} f^{(3)}\left(\xi(x)\right)\frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{6}\, dx$$

Derivar a regra de Simpson desse modo, entretanto, nos fornece apenas um termo de erro $O(h^4)$ envolvendo $f^{(3)}$. Abordando o problema de outra maneira, um termo de ordem mais alta envolvendo $f^{(4)}$ pode ser derivado.

Vamos supor que *f* seja expandida no polinômio de Taylor de 3º grau centrado em x_1. Nesse caso, para cada *x* em $[x_0, x_2]$ existe um número $\xi(x)$ em (x_0, x_2) tal que

$$f(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x-x_1) + \frac{f''(x_1)}{2}(x-x_1)^2 + \frac{f'''(x_1)}{6}(x-x_1)^3 + \frac{f^{(4)}\left(\xi(x)\right)}{24}(x-x_1)^4$$

e

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \left[f(x_1)(x-x_1) + \frac{f'(x_1)}{2}(x-x_1)^2 + \frac{f''(x_1)}{6}(x-x_1)^3 \right.$$

$$\left. + \frac{f'''(x_1)}{24}(x-x_1)^4\right]_{x_0}^{x_2} + \frac{1}{24}\int_{x_0}^{x_2} f^{(4)}\big(\xi(x)\big)(x-x_1)^4 dx$$

Como $(x-x_1)^4 \geq 0$ em $[x_0, x_2]$, o TVM Ponderado para Integrais

$$\frac{1}{24}\int_{x_0}^{x_2} f^{(4)}\big(\xi(x)\big)(x-x_1)^4 dx = \frac{f^{(4)}(\xi_1)}{24}\int_{x_0}^{x_2}(x-x_1)^4\,dx = \frac{f^{(4)}(\xi_1)}{120}(x-x_1)^5\Big|_{x_0}^{x_2}$$

Para qualquer ξ_1 em (x_0, x_2).

Entretanto $h = x_2 - x_1 = x_1 - x_0$

$$(x_2-x_1)^2 - (x_0-x_1)^2 = (x_2-x_1)^4 - (x_0-x_1)^4 = 0$$

onde

$$(x_2-x_1)^3 - (x_0-x_1)^3 = 2h^3$$

e

$$(x_2-x_1)^5 - (x_0-x_1)^5 = 2h^5$$

então

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = 2hf(x_1) + \frac{h^3}{3}f''(x_1) + \frac{f^{(4)}(\xi_1)}{60}h^5$$

se substituirmos

$$f''(x_1) = \frac{1}{h^2}[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_2)$$

$$\Rightarrow \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^5}{12}\left[\frac{1}{3}f^{(4)}(\xi_2) - \frac{1}{5}f^{(4)}(\xi_1)\right]$$

Então a Regra de Simpson fica

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$$

dá resultados exatos quando aplicada a qualquer polinômio de 3º grau ou menor.

Exemplo 4

$f(x)$	x^2	x^4	$1/(1+x)$	$\sqrt{1+x^2}$	$\sin x$	e^x
Valor Exato	2.667	6.400	1.099	2.958	1.416	6.389
Trapezoidal	4.000	16.000	1.333	3.326	0.909	8.389
Simpson	2.667	6.667	1.111	2.964	1.425	6.421

Para *f* no intervalo *[0,2]*

As regras Trapezoidal e de Simpson são exemplos de uma categoria de métodos conhecido como formula de Newton-Cotes. Há dois tipos de fórmulas de Newton-Cotes, a aberta e a fechada.

Algumas das fórmulas fechadas de Newton-Cotes

- n=1 : regra trapezoidal

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] - \frac{h^3}{6} f''(\xi) \quad onde \quad x_0 < \xi < x_1$$

- n=2 : regra de Simpson

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi) \quad onde \quad x_0 < \xi < x_2$$

- n=3 : regra dos Três Oitavos de Simpson.

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{8}[f(x_0) + 3f(x_1) + 3\,f(x_2) + \,f(x_3)]$$

$$-\frac{3h^5}{80}f^{(4)}(\xi) \qquad onde \qquad x_0 < \xi < x_3$$

- n=4 :

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = \frac{2h}{45}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12\,f(x_2) + 32\,f(x_3) + 7f(x_4)]$$

$$-\frac{8h^7}{945}f^{(6)}(\xi) \qquad onde \qquad x_0 < \xi < x_4$$

Algumas fórmulas abertas de Newton-Cotes

- n=0 : regra do Ponto Médio

$$\int_{x_{-1}}^{x_1} f(x)dx = 2hf(x_0) + \frac{h^3}{3}f''(\xi) \quad onde \quad x_{-1} < \xi < x_1$$

- n=1 :

$$\int_{x_{-1}}^{x_2} f(x)dx = \frac{3h}{2}[f(x_0) + f(x_1)] + \frac{3h^3}{4}f''(\xi) \quad onde \quad x_{-1} < \xi < x_2$$

- n=2 :

$$\int_{x_{-1}}^{x_3} f(x)dx = \frac{4h}{3}[2f(x_0) - f(x_1) + 2f(x_2)] + \frac{14h^5}{45} f^{(4)}(\xi) \quad onde \quad x_{-1} < \xi < x_3$$

- n=3 :

$$\int_{x_{-1}}^{x_4} f(x)dx = \frac{5h}{24}[11f(x_0) + f(x_1) + f(x_2) + 11\, f(x_3)]$$

$$+ \frac{95h^5}{144} f^{(4)}(\xi) \qquad onde \qquad x_{-1} < \xi < x_4$$

Exemplo 5

Usando as fórmulas abertas e fechadas de Newton-Cotes para aproximar

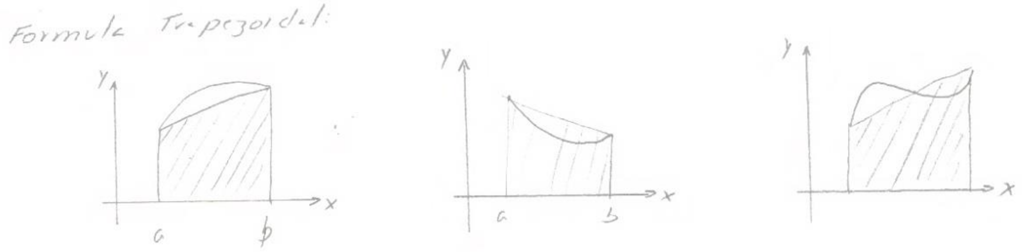
$$\int_0^{\frac{\pi}{4}} \sin x\, dx = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \approx 0.29289322$$

n	0	1	2	3	4
F. Fechadas		0.27768018	0.29293264	0.29291070	0.29289318
Erro		0.01521303	0.00003942	0.00001748	0.0000004
F. Abertas	0.30055887	0.29798754	0.29285866	0.29286923	
Erro	0.00766565	0.00509432	0.00003456	0.00002399	

Código Máxima: arquivo Ex5_Cap2.wxm

- Quadratura Gaussiana

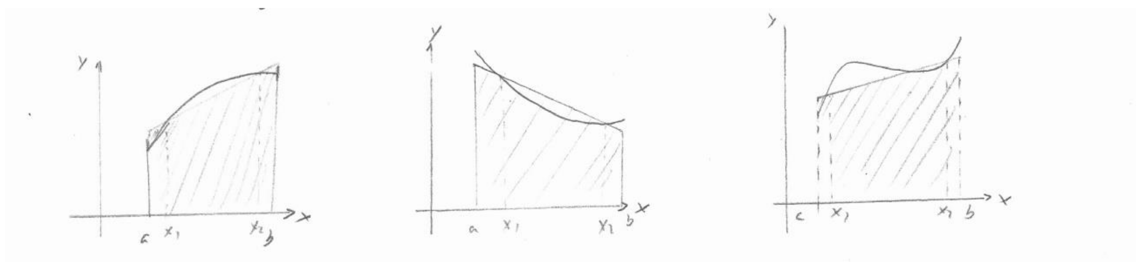
As fórmulas de Newton-Cotes foram obtidas integrando-se polinômios interpoladores. Como o termo de erro em um polinômio interpolador de grau *n* envolve a *(n+1)*-ésima derivada da função a ser aproximada, uma fórmula desse tipo é exata quando utilizada na aproximação de qualquer polinômio de grau igual ou menor que *n*.



A quadratura guassiana escolhe os pontos para se calcular a aproximação em uma maneira ótima, em vez de considerar apenas pontos igualmente espaçados.

Os nós $x_1, x_2, \cdots, x_n$ no intervalo $[a, b]$ e os coeficientes $c_1, c_2, \cdots, c_n$ são escolhidos de modo a minimizar o erro esperado no cálculo da aproximação.

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} c_i f(x_i)$$



Exemplo 6

Selecionar os coeficientes e nós quando *n=2* e o intervalo de integração é [-1, 1]

Queremos determinar c_1, c_2, x_1, x_2 de

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2)$$

para $f(x)$ um polinômio de grau $2n - 1 = 2(2) - 1 = 3$

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$$

para qualquer conjunto a_0, a_1, a_2, a_3

$$\int_{-1}^{1} (a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3)\, dx$$

$$= a_0 \int_{-1}^{1} 1\, dx + a_1 \int_{-1}^{1} x\, dx + a_2 \int_{-1}^{1} x^2\, dx + a \quad \int_{-1}^{1} x^3\, dx$$

Este fato equivale a mostrar que a fórmula dá resultados exatos quando $f(x)$ é igual a $1, x, x^2, x^3$.

Assim

$$c_1(1) + c_2(1) = \int_{-1}^{1} 1\, dx = 2$$

$$c_1x_1 + c_2x_2 = \int_{-1}^{1} x\, dx = 0$$

$$c_1x_1^2 + c_2x_2^2 = \int_{-1}^{1} x^2\, dx = \frac{2}{3}$$

$$c_1x_1^3 + c_2x_2^3 = \int_{-1}^{1} x^3\, dx = 0$$

Finalmente, resolvendo o sistema

$$c_1 = 1 \qquad c_2 = 1$$

$$x_1 = -\frac{\sqrt{3}}{3} = -0.5773502692$$

$$x_2 = \frac{\sqrt{3}}{3} = 0.5773502692$$

Então

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx (1)f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + (1)f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

Teorema

Suponha que $x_1, x_2, \cdots, x_n$ sejam raízes do polinômio de Legendre de enésimo grau $P_n(x)$ e que para cada $i = 1, 2, \cdots, n$ os números c_i sejam dados por

$$c_i = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\, dx$$

Se $P(x)$ é qualquer polinômio de grau menor que *2n*, então

$$\int_{-1}^{1} P(x)dx = \sum_{i=1}^{n} c_i P(x_i)$$

Tanto as constantes como as raízes dos polinômios de Legendre estão extensamente tabulados.

Uma integral do tipo

$$\int_{a}^{b} f(x)dx$$

em um intervalo $[a, b]$ arbitrário pode ser transformado em uma integral em $[-1, 1]$ utilizando a mudança de variáveis

$$t = \frac{2x - a - b}{b - a} \Leftrightarrow x = \frac{1}{2}[(b - a)t + a + b]$$

E

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \int_{-1}^{1} f\left(\frac{(b - a)t + a + b}{2}\right) \frac{b - a}{2}\, dt$$

Exemplo 7

Calcule a integral seguinte usando a quadratura gaussiana

$$\int_{1}^{1.5} e^{-x^2} dx$$

Sol:

$$\frac{b-a}{2} = \frac{1.5-1}{2} = \frac{0.5}{2} = \frac{1}{4}$$

$$\frac{b+a}{2} = \frac{1.5+1}{2} = \frac{2.5}{2} = \frac{5}{4}$$

$$x = \frac{t}{4} + \frac{5}{4}$$

Então

$$\int_{1}^{1.5} e^{-x^2} dx = \frac{1}{4} \int_{-1}^{1} e^{-(t+5)^2/16} dt$$

Para n=2

$$\int_{1}^{1.5} e^{-x^2} dx \approx \frac{1}{4} \left[e^{-(0.5773502692+5)^2/16} + e^{-(-0.5773502692+5)^2/16} \right] = 0.1094003$$

Para n=3

$$\int_{1}^{1.5} e^{-x^2} dx \approx \frac{1}{4} \left[(0.555555556) e^{-(0.7745966692+5)^2/16} + (0.888888889) e^{-(0.0+5)^2/16} \right.$$
$$\left. + (0.555555556) e^{-(-0.7745966692+5)^2/16} \right] = 0.1093642$$

Exemplo 8

Calcule a integral seguinte usando a quadratura gaussiana

$$\int_{1}^{1.5} x^2 \ln x \, dx$$

Sol:

$$\frac{b-a}{2} = \frac{1.5-1}{2} = \frac{0.5}{2} = \frac{1}{4}$$

$$\frac{b+a}{2} = \frac{1.5+1}{2} = \frac{2.5}{2} = \frac{5}{4}$$

$$x = \frac{t}{4} + \frac{5}{4}$$

Então

$$\int_{1}^{1.5} x^2 \ln x \, dx = \frac{1}{4} \int_{-1}^{1} \frac{(t+5)^2}{16} \ln\left(\frac{t+5}{4}\right) dt$$

Para n=2

$$\int_{1}^{1.5} x^2 \ln x \, dx \approx \frac{1}{64} \Bigg[(0.577350269+5)^2 \ln\left(\frac{0.577350269+5}{4}\right) + (-0.577350269+5)^2 \ln\left(\frac{-0.577350269+5}{4}\right) \Bigg] = 0.1922687$$

Para n=3

$$\int_{1}^{1.5} x^2 \ln x \, dx \approx \frac{1}{64} \Bigg[(0.555556)(0.774597+5)^2 \ln\left(\frac{0.774597+5}{4}\right) + (0.888889)(5)^2 \ln\left(\frac{5}{4}\right) + (0.555556)(-0.774597+5)^2 \ln\left(\frac{-0.774597+5}{4}\right) \Bigg] = 0.1922687$$

Para n=4

$$\int_{1}^{1.5} x^2 \ln x \, dx \approx \frac{1}{64}\Big[(0.3478548)(0.8611363+5)^2 \ln\left(\frac{0.8611363+5}{4}\right)$$
$$+ (0.652145)(0.339981+5)^2 \ln\left(\frac{0.339981+5}{4}\right)$$
$$+ (0.652145)(-0.339981+5)^2 \ln\left(\frac{-0.339981+5}{4}\right)$$
$$+ (0.3478548)(-0.8611363+5)^2 \ln\left(\frac{-0.8611363+5}{4}\right)\Big]$$
$$= 0.1922593$$

Exemplo 9

$$\int_{0}^{\frac{\pi}{2}} \sin(x)\, dx$$

Quadratura de Gauss

n	**Abscisass** ξ_i	**Weights** w_i
2	±0.5773502691896257645091488	1.0000000000000000000000000
	0	0.8888888888888888888888889
3	±0.7745966692414833770358531	0.5555555555555555555555556
	±0.3399810435848562648026658	0.6521451548625461426269361
4	±0.8611363115940525752239465	0.3478548451374538573730639
	0	0.5688888888888888888888889
	±0.5384693101056830910363144	0.4786286704993664680412915
5	±0.9061798459386639927976269	0.2369268850561890875142640
	±0.2386191860831969086305017	0.4679139345726910473898703
	±0.6612093864662645136613996	0.3607615730481386075698335
6	±0.9324695142031520278123016	0.1713244923791703450402961
	0	0.4179591836734693877551020
	±0.4058451513773971669066064	0.3818300505051189449503698
	±0.7415311855993944398638648	0.2797053914892766679014678
7	±0.9491079123427585245261897	0.1294849661688696932706114
	±0.1834346424956498049394761	0.3626837833783619829651504
	±0.5255324099163289858177390	0.3137066458778872873379622
	±0.7966664774136267395915539	0.2223810344533744705443560
8	±0.9602898564975362316835609	0.1012285362903762591525314
	0	0.3302393550012597631645251
	±0.3242534234038089290385380	0.3123470770400028400686304
	±0.6133714327005903973087020	0.2606106964029354623187429
	±0.8360311073266357942994298	0.1806481606948574040584720
9	±0.9681602395076260898355762	0.0812743883615744119718922
	±0.1488743389816312108848260	0.2955242247147528701738930
	±0.4333953941292471907992659	0.2692667193099963550912269
	±0.6794095682990244062343274	0.2190863625159820439955349
	±0.8650633666889845107320967	0.1494513491505805931457763
10	±0.9739065285171717200779640	0.0666713443086881375935688