INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

Introdução

Em situações práticas, a função a ser integrada não é fornecida analiticamente, e sim por meio de pares (x, $f(x)$).

Nestes casos torna-se necessária a utilização de métodos numéricos para o cálculo do valor da integral de $f(x)$.

Os métodos mais utilizados podem ser classificados em dois grupos:

- Fórmulas de Newton-Côtes, que empregam valores de $f(x)$ onde os pontos são igualmente espaçados.
- Fórmula de quadratura gaussiana, que utiliza pontos diferentemente espaçados, onde este espaçamento é determinado por certas propriedades de polinômios ortogonais; $\left(I = \int_a^b f(x)d \cong \int_a^b p_n(x)d \right)$

Dentre as fórmulas de Newton-Côtes, as mais usadas são:

- Regra dos Trapézios;
- Regras de Simpson.

Polinômio Interpolador de Gregory-Newton

A aplicação das fórmulas de Newton-Côtes pré-supõem a utilização do polinômio interpolador de Gregory-Newton ($P_n(x)$), que se baseia no polinômio de Newton:

$$p_n = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \cdots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$$

Fazendo a seguinte substituição de variáveis: $\dfrac{x-x_0}{z} = h$

logo:

$$x - x_0 = hz$$

$$(x-x_1) = [x-(x_0+h)] = (x-x_0) - h = z\cdot h - h = h(z-1)$$

$$\vdots$$

$$(x-x_{n-1}) = h\cdot[z-(n-1)]$$

Substituindo no polinômio de Newton:

$$f(x) = p_n(x) = a_o + a_1\cdot h\cdot z + a_2\cdot h\cdot(z-1)\cdot h\cdot z + \cdots + a_n h[z-(n-1)]\cdots h\cdot z$$

$$p_n(x) = a_o + a_1\cdot h\cdot z + a_2\cdot h^2\cdot z\cdot(z-1) + \cdots + a_n h^n z\cdot(z-1)\cdots[z-(n-1)]$$

com:

$$a_1 h = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x_1-x_0) = \Delta y_0$$

$$a_2 h^2 = \frac{f[x_2,x_1]-f[x_1,x_0]}{x_2-x_0}\cdot h^2 = \frac{h}{2}\left\{\frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1} - \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}\right\}$$

$$a_2 h^2 = \frac{1}{2}\{\Delta^2 y_0\}$$

$$a_n h^n = \frac{1}{n!}\{\Delta^n y_0\}$$

logo:

$$p_n(x) = y_o + \frac{z}{1!}\Delta y_0 + \frac{z\cdot(z-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \cdots + \frac{z\cdot(z-1)\cdots[z-(n-1)]}{n!}\Delta^n y_0$$

Diferenças Finitas

$$x_i - x_{i-1} = h = cte.\ , \quad \forall i = 0, \cdots n$$

Então as diferenças abaixo são "diferenças finitas"

a) $\Delta^0 y_i = y_i \rightarrow ordem\ \ zero$

b) $\Delta y_i = \Delta^0 y_{i+1} - \Delta^0 y_i = y_{i+1} - y_i \rightarrow 1^a\ ordem$

c) $\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i = y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i \rightarrow 2^a$ ordem

d) $\Delta^n y_i = \Delta^{n-1} y_{i+1} - \Delta^{n-1} y_i \rightarrow n^a\ ordem$

Ex.: Construir a tabela das diferenças finitas para a função caracterizada pelos pontos da tabela abaixo:

i	x	y	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$
0	*1.00*	*5.00*	*2.50*	*-2.00*	*3.50*	*-6.00*
1	*1.50*	*7.50*	*0.50*	*1.50*	*-2.50*	-
2	*2.00*	*8.00*	*2.00*	*-1.00*	-	
3	*2.50*	*10.00*	*1.00*	-		
4	*3.00*	*11.00*	-			

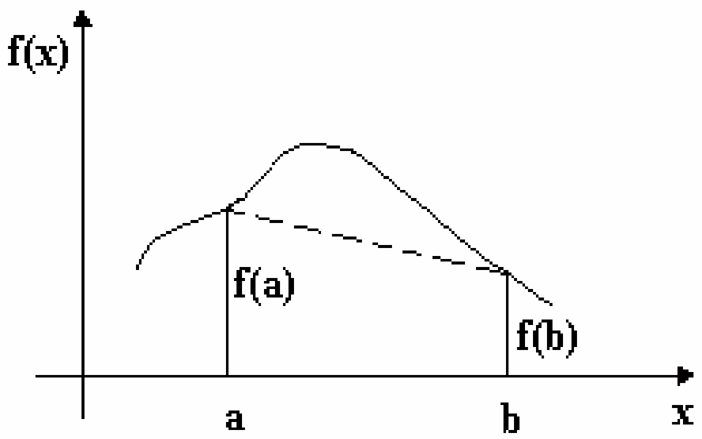
O polinômio de Gregory-Newton representativo da função tabelada é:

$$p_4(x) = 5.0 + 2.5\frac{z}{1!} + (-2.0)\frac{z(z-1)}{2!} + 3.5\frac{z(z-1)(z-2)}{3!} -$$
$$-6.0\frac{z(z-1)(z-2)(z-3)}{4!}$$

Regra do Trapézio

A fórmula de integração numérica através da regra do trapézio é obtida, considerando uma linearização da função dentro do intervalo de integração (*interpolação linear*).

Polinômio interpolador: ordem 1.



$$h = b - a; \quad z = \frac{x\text{-}a}{h} \quad \Rightarrow \quad dx = hdz$$

$$p_1(x) = y_o + \frac{z}{1!}\Delta y_0; \begin{cases} y_o = f(a) \\ \Delta y_0 = f(b) - f(a) \end{cases}$$

$$p_1(x) = f(a) + \frac{x-a}{b-a}\left[f(b) - f(a)\right]$$

$$p_1(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b-a}(x-a)$$

$$I \cong \int_a^b p_1(\mathrm{x})\,\mathrm{dx} = \frac{(b-a)}{2}\left[f(a) + f(b)\right] = \text{área do trapézio}$$

ou:

$$\boxed{I \cong \int_0^1 y_o + z\Delta y_0 \;\; h\,dz = \frac{h}{2}(y_0 + y_1)}$$

Erro de Truncamento

Para a interpolação linear tem-se:

$$E_T = \frac{f''(\varepsilon)}{2}(x - x_0)(x - x_1) = \frac{f''(\varepsilon)}{2}(x - a)(x - b)$$

Considerando que a representação exata de *f(x)* é:

$$f(x) = p_1(x) + E_T \Rightarrow \int_a^b f(x)dx = \int_a^b p_1(x)\,dx + \int_a^b E_T\,dx$$

Sendo: $\begin{cases} x - a = h \cdot z \\ x - b = h(z - 1) \\ dx = h \cdot dz \end{cases}$;

tem-se:

$$x = a, \Rightarrow z = 0, \quad x = b \Rightarrow z = 1$$

então

$$\int_a^b E_T\,dx = \int_0^1 \frac{f''(\varepsilon)}{2} \cdot hz \cdot h(z - 1)h\,dz = \frac{h^3}{2} f''(\varepsilon)\left[\frac{z^3}{3} - \frac{z^2}{2}\right]_0^1$$

$$E_T = -\frac{h^3}{12} f''(\varepsilon), \quad a \le \varepsilon \le b$$

Ex.: Determinar o erro máximo de truncamento cometido ao se avaliar a integral $I = \int_{1.0}^{2.0} \frac{1}{x} dx$ pela regra dos trapézios.

a) Cálculo pela regra dos trapézios:

$$I \cong \frac{h}{2}[\, f(b) + f(a)] \quad ; \quad a = 1.0 \;\; ; \;\; b = 2.0 \;\; ; \;\; h = 2\text{-}1 = 1 \; ;$$

$f(1) = 1 \;\; ; \;\; f(2) = 1/2$

$$I_{ap} \cong \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2} + 1\right] = \frac{3}{4} = 0.75$$

b) Cálculo do erro:

$$E = \frac{-h^3}{12} f''(\varepsilon) = \frac{-1}{12} f''(\varepsilon)$$

$$f'(x) = \frac{-1}{x^2} \qquad f''(x) = \frac{2x}{x^4} = \frac{2}{x^3}$$

$$E = \frac{-1}{12} \cdot \frac{2}{\varepsilon^3} \, , \; 1 \leq \varepsilon \leq 2 \quad \Rightarrow \quad E_{máx} = \frac{1}{12} \cdot \frac{2}{1^3} = \frac{1}{6}$$

Na verdade, $E_{máx}$ não é o valor do erro cometido, mas sim um limitante para este erro. Para conhecer seu valor absoluto, é necessário calcular o valor exato da integral.

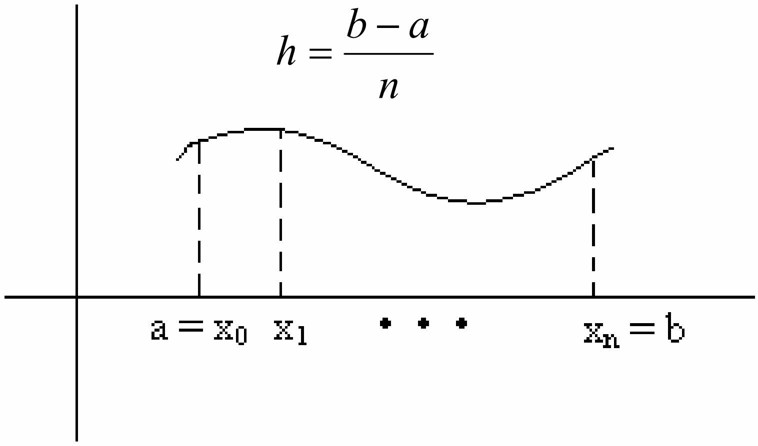
c) Cálculo exato:

$$I = \int_{1.0}^{2.0} \frac{1}{x} dx = ln(2) - ln(1) = 0.693$$

d) Erro relativo:

$$\Delta I_{ap} = I - I_{ap} = -0.057 \rightarrow \text{E}\% = -\frac{0.057}{0.693} = -8.2\%$$

Regra dos Trapézios para múltiplos segmentos



$$I = \int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\,dx$$

Aplicando, a regra dos trapézios para cada segmento:

$$I \cong \frac{h}{2}(y_0 + y_1) + \frac{h}{2}(y_1 + y_2) + \cdots + \frac{h}{2}(y_{n-1} + y_n) = \frac{h}{2}(y_0 + y_n) + \frac{h}{2}\sum_{i=1}^{n-1} 2 \cdot y_i$$

$$I \cong \frac{h}{2}(y_0 + y_n) + h \cdot \sum_{i=1}^{n-1} y_i = (b-a)\frac{y_0 + y_n + 2 \cdot \sum_{i=1}^{n-1} y_i}{2 \cdot n}$$

$$\boxed{I \cong \frac{h}{2}(y_0 + 2y_1 + \cdots + 2y_{n-1} + y_n)}$$

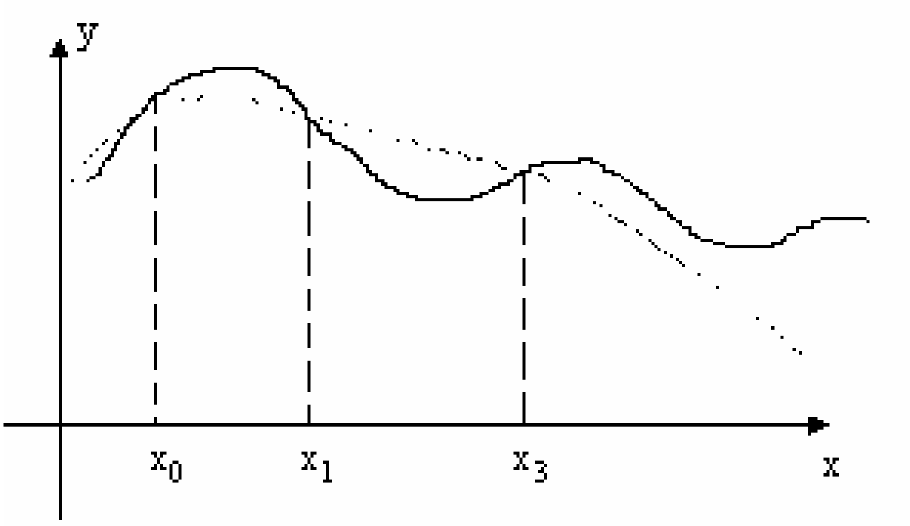
Erro de truncamento

$$E_T = \frac{(b-a)^3}{12 \cdot n^3} \sum_{i=1}^{n} f''(\varepsilon_i)$$

Definindo um valor médio da 2ª derivada em um ponto ε tal que: $n \cdot \overline{f''} = \sum_{i=1}^{n} f''(\varepsilon_i)$, tem-se:

$$E_T = \frac{(b-a)^3}{12 \cdot n^2}\overline{f''} \quad \Rightarrow \quad E_T \propto \frac{1}{n^2}$$

Primeira Regra de Simpson (*Regra do 1/3*)



Conhecendo-se os valores de uma função *f(x)* em três pontos igualmente espaçados $x_0 = a$, x_1 , $x_2 = b$, pode-se então aproximar a função por um polinômio do 2º grau e calcular o valor aproximado de sua integral no intervalo $[a,b]$, através da integral do polinômio interpolador.

Fazendo:

$$x_0 = a \ ; \ x_2 = b \ ; \ h = (b-a)/2;$$

tem-se:

$$z = \frac{x-a}{h} \Rightarrow dx = h \cdot dz$$

$$\begin{cases} x = a \Rightarrow z = 0 \\ x = b \Rightarrow z = 2 \end{cases}$$

A integral $I = \int_a^b f(x)\,dx$ pode então ser aproximada por:

$$I \cong \int_a^b p_2(x)\,dx$$

onde:

$$p_2(n) = y_0 + z \cdot \Delta y_0 + \frac{z \cdot (z-1)}{2} \Delta^2 y_0$$

então:

$$I \cong \int_0^2 \left[y_0 + z \cdot \Delta y_0 + \frac{z \cdot (z-1)}{2} \Delta^2 y_0 \right] h\,dz$$

Resolvendo a integral, obtém-se:

$$I \cong h\left[2y_0 + 2\Delta y_0 + \frac{1}{3} \Delta^2 y_0 \right]$$

Como:

$$\begin{cases} \Delta y_0 = y_1 - y_0 \\ \Delta y_1 = y_2 - y_1 \\ \Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0 = y_2 - 2y_1 + y_0 \end{cases}$$

tem-se:

$$\boxed{I \cong \frac{h}{3}\left[y_0 + 4y_1 + y_2 \right]}$$

Pode-se demonstrar que o erro de truncamento é dado, nesse caso, por:

$$E_T = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\varepsilon)$$

Primeira Regra de Simpson com Múltiplos Segmentos

- O desenvolvimento é idêntico ao da regra do trapézio com múltiplos segmentos.
- O intervalo de integração é dividido em *n* segmentos.
- Para cada dois segmentos é feita uma interpolação com polinômio de Lagrange de segundo grau.

$$I \cong \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4 \sum_{i=1,3,5,...}^{n-1} f(x_i) + 2 \sum_{i=2,4,6,...}^{n-2} f(x_f) + f(x_n) \right]$$

Ou:

$$\boxed{I \cong \frac{h}{3}\left[y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + 2y_4 + \ldots + 4y_{n-1} + y_n\right]}$$

Erro de truncamento

A expressão do erro de truncamento fica:

$$E_t = -\frac{(b-a)^5}{180n^4}\overline{f}^{(4)}(\xi)$$

Observe que um número par de segmentos é necessário na implementação do método.

Segunda Regra de Simpson (*Regra dos 3/8*)

Nesse caso, o intervalo de integração é dividido em 03 (três) segmentos para efetuar a interpolação.

Logo, o polinômio interpolador é de terceiro grau.

Considerando mais uma vez a fórmula de Gregory-Newton, agora para $p_3(x)$, tem-se:

$$I \cong \int_a^b \left[y_o + z\Delta y_0 + \frac{z \cdot (z-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \frac{z \cdot (z-1)(z-2)}{3!} \Delta^3 y_0 \right] dx$$

como:

$$\Delta^3 y_0 = \Delta^2 y_1 - \Delta^2 y_0; \quad \begin{cases} \Delta^2 y_1 = \Delta y_2 - \Delta y_1 \\ \Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0 \end{cases}; \quad \Delta y_2 = y_3 - y_2 \, ,$$

chega-se facilmente a:

$$\boxed{I \cong \frac{3h}{8} \left[y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3 \right]}$$

com: $h = (b-a)/3$

Erro de truncamento

O erro de truncamento é obtido através da integral:

$$E_T = \int_0^3 \left(\frac{z(z-1)(z-2)(z-3)}{4!} \; \overset{(4)}{f}(\varepsilon) \; h^5 \right) dz$$

Ou:

$$E_T = \frac{-3h^5}{80} \; \overset{(4)}{f}(\varepsilon) \qquad\qquad b \le \varepsilon \le a$$

Segunda Regra de Simpson com múltiplos segmentos

- O intervalo de integração é dividido em n subintervalos;
- Nesse caso n é múltiplo de 3.
- Após as integrações, obtém-se:

$$\boxed{I = \frac{3h}{8}\left(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + 2y_3 + 3y_4 + 3y_5 + 2y_6 + \cdots + 3y_{n-2} + 3y_{n-1} + y_n\right)}$$

com: $h = \dfrac{b-a}{n}$

Erro de truncamento

A expressão do erro de truncamento fica:

$$E_t = -\frac{(b-a)^5}{80n^4}\overline{f}^{(4)}(\varepsilon), \qquad a \le \varepsilon \le b$$

Ex.:

Dada a função $f(x) = 0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5$, determine numericamente a integral da função no intervalo [*0, 0.8*], utilizando o método do trapézio e a regra de Simpson. Compare os resultados obtidos com o valor exato:

$$I_{exato} = 1.64053334$$

Regra do Trapézio

$I = 0.17228$, $E_t = 1.46773334$ e $\varepsilon\% = 89.5\%$ (relativo a E_t)

Regra do Trapézio com Múltiplos Segmentos ($n = 4$), ($h = 0.2$)

$I = 1.4848$, $E_t = 0.15573$ e $\varepsilon\% = 9.5\%$

Primeira Regra de Simpson (*Regra de 1/3*)

$I = 1.36746667$, $E_t = 0.273066$ e $\varepsilon\% = 16.6\%$

Primeira Regra de Simpson com Múltiplos Segmentos ($n = 4$)

$I = 1.62346667$, $E_t = 0.0170667$ e $\varepsilon\% = 1.04\%$

Segunda Regra de Simpson (*Regra de 3/8*)

$I = 1.64507716$, $E_t = -0.0045383$ e $\varepsilon\% = -0.28\%$

Extrapolação de Richardson

É um método baseado na aplicação repetida das fórmulas de Newton-Cotes para integração numérica, com o objetivo de melhorar a precisão dos resultados obtidos.

Regra dos Trapézios

Chamando de I_1 o resultado obtido com a aplicação da regra dos trapézios, para n_1 segmentos, o valor exato da integral pode ser dado por:

$$I = I_1 + E_1 ; \quad \text{onde: } E_1 = -\frac{1}{n_1^2}\frac{(b-a)^3}{12} f''(\varepsilon)$$

Aplicando a mesma regra para n_2 segmentos, com $n_2 > n_1$, tem-se:

$$I = I_2 + E_2 ; \quad \text{onde: } E_2 = -\frac{1}{n_2^2}\frac{(b-a)^3}{12} f''(\varepsilon)$$

Combinando as equações acima, fica:

$$I_1 + E_1 = I_2 + E_2$$

ou:

$$I_2 - I_1 = \frac{(b-a)^3}{12} f''(\varepsilon)\left[\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right] \Rightarrow \frac{(b-a)^3}{12} f''(\varepsilon) = \frac{(I_2 - I_1)(n_1^2 n_2^2)}{n_1^2 - n_2^2}$$

Logo:

$$I = I_2 + \frac{n_1^2}{n_2^2 - n_1^2}(I_2 - I_1)$$

Aparentemente, o valor exato poderia então ser encontrado dessa forma.

É evidente que esse resultado só foi possível, devido a uma aproximação adotada durante a dedução: $f''(\varepsilon)$ foi considerado com o mesmo valor para números de segmentos distintos.

*Ex.:*Calcular $I = \int_0^{\pi} sen(x)\, dx$ pela regra dos trapézios para $n = 2$ e $n = 4$ e, posteriormente, melhorar o resultado através da extrapolação de Richardson.

a) Para 2 segmentos: $h = \dfrac{\pi}{2} \Rightarrow I_1 = \dfrac{\pi/2}{2}(y_0 + 2y_1 + y_2) = 1.571$

i	x_i	y_i	c_i
0	0	0.00	1
1	π/2	1.00	2
2	π	0.00	1

b) Para 4 segmentos: $I_2 = \dfrac{h}{2}\sum c_i y_i$; $h = \dfrac{\pi}{4} \Rightarrow I_2 = \dfrac{\pi/4}{2}(4.828) = 1.896$

i	x_i	y_i	c_i
0	0	0.00	1
1	π/4	0.707	2
2	π/2	1.000	2
3	3π/4	0.707	2
4	π	0.000	1

c) Pela equação de Richardson:

$$I = 1.896 + \frac{2^2}{4^2 - 2^2}(1.896 - 1.571) = 2.004$$

d) Analiticamente, $I = 2.000$

Regras de Simpson

Uma vez que em ambas as regras de Simpson o erro de truncamento é inversamente proporcional a n^4, tem-se, para ambas.

$$I = I_2 + \frac{n_1^4}{n_2^4 - n_1^4}(I_2 - I_1)$$

É claro que I_1 e I_2 devem ser calculados pela mesma regra.

Integração Dupla

Deseja-se calcular $I = \int_a^b \int_c^d f(x,y)\, dy\, dx$.

A integral I pode ser escrita ainda na forma:

$$I = \int_a^b \left(\int_c^d f(x,y)\, dy \right) dx$$

Fazendo:

$$G(x) = \int_c^d f(x,y)\, dy$$

Obtém-se:

$$I = \int_a^b G(x)\, dx$$

Pode-se utilizar qualquer regra de integração.

A título de ilustração, mostra-se abaixo o desenvolvimento através da regra do trapézio:

$$I = \int_a^b G(x)\, dx \cong \frac{h_1}{2} [\, G(a) + G(b)]\,, \qquad h_1 = b - a$$

Para o cálculo de $G(a)$ e $G(b)$, tem-se:

$$G(a) = \int_c^d f(a,y)\, dy \cong \frac{d-c}{2} [f(a,d) + f(a,c)]$$

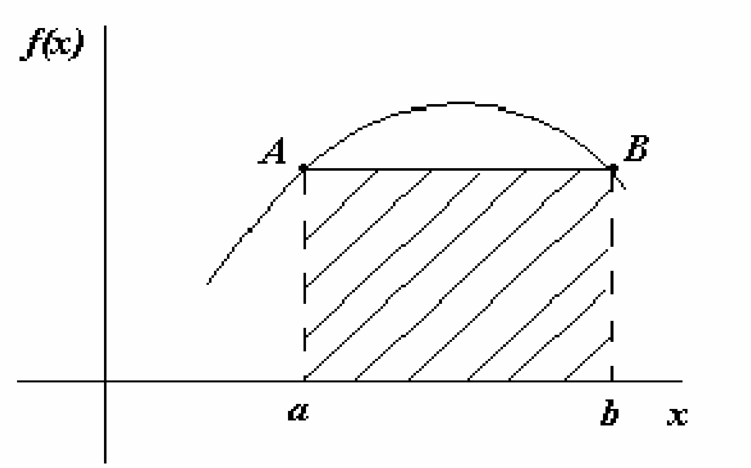
e

$$G(b) = \int_c^d f(b,y)\, dy \cong \frac{d-c}{2} [f(b,d) + f(b,c)]$$

Quadratura Gaussiana

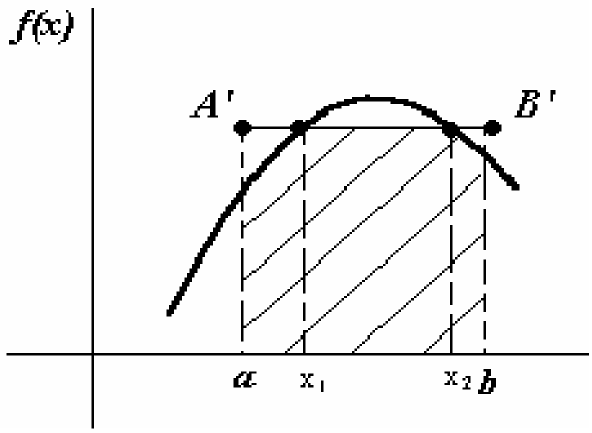
Os métodos de integração estudados anteriormente baseavam-se no conhecimento de pontos igualmente espaçados, i. e., no conhecimento prévio dos pontos utilizados na fórmula de integração da função. Isso pode implicar em desvantagens, como mostra o exemplo a seguir.

Considere, por exemplo, a integração pela regra do trapézio, como mostra a figura abaixo:



$$I \cong (b-a) \cdot \frac{f(a)+f(b)}{2} \qquad (*)$$

Agora, suponha que a mesma regra de integração seja aplicada, após o deslocamento do segmento de reta $\overline{AB}$ para cima, de tal forma que os erros positivos passem a ser compensados por erros negativos, como mostra a figura abaixo.



Nesse caso, a integral poderia ser obtida de forma exata, desde que x_1 e x_2 fossem escolhidos adequadamente.

Método dos coeficientes indeterminados

A fim de ilustrar esse método, que será usado para a quadratura gaussiana, escreve-se a equação (*) na forma geral:

$$I \cong c_1 f(a) + c_2 f(b) \qquad (**)$$

com c_1, c_2 constantes a determinar.

A partir daí, exige-se que a regra do trapézio forneça um valor exato, quando a função a integrar é uma constante ou uma reta, p. ex., para $y = 1$ e $y = x$. Assim:

$$c_1 f_1(a) + c_2 f_1(b) = \int_{-(b-a)/2}^{(b-a)/2} 1\,dx = b - a$$

$$c_1 f_2(a) + c_2 f_2(b) = \int_a^b x\,dx = \frac{1}{2}\left(b^2 - a^2\right) = \frac{1}{2}(a+b)(b-a)$$

Considerando que:

$f_1(a) = f_1(b) = 1$ e $\begin{cases} f_2(a) = a \\ f_2(b) = b \end{cases}$, respectivamente, obtém-se:

$$ac_1 + bc_2 = \frac{1}{2}(a+b)(-a+b)$$

$$c_1 + c_2 = b - a$$

$$-bc_1 - bc_2 = -b(b-a)$$

$$(a-b)c_1 = \frac{1}{2}\left[(a+2b)\cdot\frac{1}{2} - b\right]\cdot[-(a-b)]$$

$$c_1 = b - \frac{1}{2}(a+b) = \frac{b-a}{2}$$

$$c_2 = b - a - \frac{b-a}{2} = \frac{b-a}{2}$$

que, substituindo em (**) reproduz a fórmula da regra do trapézio:

$$I = \frac{b-a}{2} f(a) + \frac{b-a}{2} f(b) = \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right]$$

Quadratura de Gauss - Fórmula para 2 Pontos

Seja $I = \int_a^b f(x)dx$ a calcular.

A fim de obter a fórmula de Gauss para integração numérica, deve-se inicialmente realizar uma mudança de variável, tal que o intervalo de integração muda para [-1, 1]:

$$x = \alpha z + \beta \Rightarrow \begin{cases} a = \alpha(-1) + \beta \\ b = \alpha(1) + \beta \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \beta = \dfrac{a+b}{2} \\ \alpha = \dfrac{b-a}{2} \end{cases} \Rightarrow x = \frac{b-a}{2} z + \frac{b+a}{2}$$

daí:

$$f(x) = f\left(\frac{b-a}{2} z + \frac{b+a}{2}\right); \; dx = \frac{b-a}{2} dz$$

Logo:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^{1} F(z)dz$$

onde:

$$F(z) = \frac{b-a}{2} f\left(\frac{b-a}{2} z + \frac{b+a}{2}\right)$$

A fórmula de integração gaussiana se reporta à expressão geral de interpolação, para aproximar o resultado da integral acima:

$$I = \int_{-1}^{1} F(z)dz = \sum_{i=0}^{n-1} A_i F(z_i)$$

onde:

F	$\rightarrow$	Função de base
n	$\rightarrow$	nº de pontos
A_i	$\rightarrow$	Coeficientes ou pesos, a determinar
z_i	$\rightarrow$	Raízes, a determinar

Uma forma de obter fórmulas Gaussianas é procurar fazer com que sejam exatas ao se usar funções de base $1, z, z^2, \ldots, z^{2n-1}$, o que resulta em $2n$ condições determinação dos z_i e A_i.

*Ex.*1: Determinar os coeficientes e as raízes da fórmula de integração de Gauss, para dois pontos, utilizando como funções de base $F(z) = z^k$, $k = 0, 1, 2, 3$

Solução:

$$\int_{-1}^{1} z^k \, dz = A_0 F(z_0) + A_1 F(z_1)$$

Então:

$$k = 0 \Rightarrow \int_{-1}^{1} z^0 \, dz = 2 = A_0 F((z_0) + A_1 F(z_1)$$

$$2 = A_0 + A_1$$

$$k = 1 \Rightarrow \int_{-1}^{1} z^1 \, dz = A_0 F(z_0) + A_1 F(z_1)$$

$$0 = A_0 z_0^1 + A_1 z_1^1$$

$$k = 2 \Rightarrow \int_{-1}^{1} z^2 \, dz = A_0 F(z_0) + A_1 F(z_1)$$

$$2/3 = A_0 z_0^2 + A_1 z_1^2$$

$$k = 3 \Rightarrow \int_{-1}^{1} z^3 \, dz = A_0 F(z_0) + A_1 F(z_1)$$

$$0 = A_0 z_0^3 + A_1 z_1^3$$

Resolvendo o sistema de 4 equações, onde as incógnitas são: A_0, A_1, Z_0, e Z_1m tem-se:

$$A_0 = A_1 = 1$$

$$Z_0 = -Z_1 = \sqrt{3}\big/3 = 1\big/\sqrt{3}$$

Substituindo esses valores na fórmula geral, fica:

$$I_G = F\left(-1/\sqrt{3}\right) + F\left(1/\sqrt{3}\right)$$

que é a fórmula de Gauss para dois pontos.

Ex.2: Calcular, através de quadratura Gaussiana para dois pontos:

$$I = \int_{-2}^{2} e^{-x^2/2}\,dx$$

Solução:

$$I_G = A_0 F(Z_0) + A_1 F(Z_1) = F\left(-1/\sqrt{3}\right) + F\left(1/\sqrt{3}\right)$$

$$F(Z) = \frac{b-a}{2} + \left(\frac{b-a}{2} Z + \frac{b+a}{2}\right)$$

$$b=2\ ,\ a=-2\ ,\ x=2Z$$

$$F(Z) = 2f(2Z) = 2e^{-2Z^2}$$

$$F\left(-1/\sqrt{3}\right) = 2e^{-2/3} \quad ; \quad F\left(1/\sqrt{3}\right) = 2e^{-2/3}$$

$$\boxed{I_G = 4e^{-2/3} = 2{,}0537}$$

DIFERENCIAÇÃO NUMÉRICA

Introdução

Fazendo uso das propriedades de linearidade do operador Δ, é possível expressar as diferenças finitas de uma função $y = f(x)$ em termos de suas derivadas e vice-versa.

Fazendo uso da série de Taylor, podemos escrever:

$$
\begin{aligned}
y(x+h) &= y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \frac{h^3}{3!}y'''(x) + \cdots \\
&= \left(1 + hD + \frac{h^2}{2!}D^2 + \frac{h^3}{3!}D^3 + \cdots\right)y(x) \\
&= \mathrm{e}^{hD}y(x)
\end{aligned}
$$

ou seja:

$$
y_{i+1} = \mathrm{e}^{hD}y_i; \quad y_{i-1} = \mathrm{e}^{-hD}y_i
$$

Logo, o operador Δ pode ser escrito como:

$$
\begin{aligned}
\Delta y_i &= \Delta^0 y_i - \Delta^0 y_{i-1} = y_i - y_{i-1} = y_i - \mathrm{e}^{-hD}y_i = \left(1 - \mathrm{e}^{-hD}\right)y_i \\
&= \left[1 - \left(1 + hD + \frac{h^2}{2!}D^2 + \frac{h^3}{3!}D^3 + \cdots\right)\right]y_i \\
&= \left[1 - \frac{h}{2!}D + \frac{h^2}{3!}D^2 - \frac{h^3}{4!}D^3 \cdots\right]hDy_i
\end{aligned}
$$

Portanto, simbolicamente:

$$
\begin{cases}
\Delta = \left(1 - \mathrm{e}^{-hD}\right) \\
\Delta^2 = \left(1 - \mathrm{e}^{-hD}\right)^2 = 1 - 2\mathrm{e}^{-hD} + \mathrm{e}^{-2hD} = h^2D^2 - h^3D^3 + \dfrac{7}{12}h^4D^4 - \cdots \\
\Delta^3 = \left(1 - \mathrm{e}^{-hD}\right)^3 = h^3D^3 - \dfrac{3}{2}h^4D^4 + \dfrac{5}{4}h^5D^5 - \cdots \\
\vdots
\end{cases}
$$

Diferenciação por Diferenças Finitas Retroativas

O termo "retroativas" deve-se ao fato de que as diferenças finitas para o *i-éssimo* ponto são definidas tomando-se valores para este ponto e seu antecessor, ou seja:

$$\Delta y_i = \Delta^0 y_i - \Delta^0 y_{i-1} = y_i - y_{i-1}$$

Equações que expressam as diferenças finitas em termos das derivadas de uma função $y = f(x)$ foram determinadas.

A partir destas, podem ser obtidas equações que expressam as derivadas de uma função em termos das diferenças finitas.

$$\Delta = \left(1 - \mathrm{e}^{-hD}\right) \Rightarrow \mathrm{e}^{-hD} = 1 - \Delta$$

daí:

$$\ln\left(\mathrm{e}^{-hD}\right) = \ln(1-\Delta) = -\left(\Delta + \frac{\Delta^2}{2} + \frac{\Delta^3}{3} + \frac{\Delta^4}{4} + \cdots\right)$$

logo:

$$hD = \Delta + \frac{\Delta^2}{2} + \frac{\Delta^3}{3} + \frac{\Delta^4}{4} + \cdots$$

Sendo assim, temos:

$$\begin{cases} D = \dfrac{\Delta}{h} + \dfrac{h}{2}D^2 - \dfrac{h^2}{6}D^3 + \dfrac{h^3}{24}D^4 - \cdots \\ D^2 = \dfrac{\Delta^2}{h^2} + hD^3 - \dfrac{7}{12}h^2 D^4 + \cdots \\ D^3 = \dfrac{\Delta^3}{h^3} + \dfrac{3}{2}hD^4 - \dfrac{5}{4}h^2 D^5 + \cdots \\ \vdots \end{cases}$$

Retendo-se apenas o primeiro termo das derivadas:

$$\begin{cases} Dy_i = \dfrac{\Delta y_i}{h} + O(h) = \dfrac{1}{h}\left(y_i - y_{i-1}\right) + O(h) \\ D^2 y_i = \dfrac{\Delta^2 y_i}{h^2} + O(h) = \dfrac{1}{h^2}\left(y_i - 2y_{i-1} + y_{i-2}\right) + O(h) \\ D^3 y_i = \dfrac{\Delta^3 y_i}{h^3} + O(h) = \dfrac{1}{h^3}\left(y_i - 3y_{i-1} + 3y_{i-2} - y_{i-3}\right) + O(h) \\ \vdots \end{cases}$$

obtém-se aproximações para as derivadas de uma função $y = f(x)$, no ponto *i*, com erro da ordem de *h*.

Retendo-se os dois primeiros termos das derivadas, obtém-se aproximações com erro da ordem de h^2.

$$\begin{cases} Dy_i = \dfrac{1}{2h}\left(3y_i - 4y_{i-1} + y_{i-2}\right) + O(h^2) \\ D^2 y_i = \dfrac{1}{h^2}\left(2y_i - 5y_{i-1} + 4y_{i-2} - y_{i-3}\right) + O(h^2) \\ D^3 y_i = \dfrac{1}{h^3}\left(5y_i - 18y_{i-1} + 24y_{i-2} - 14y_{i-3} + 3y_{i-4}\right) + O(h^2) \\ \vdots \end{cases}$$

Pode-se então, pela retenção de *m* termos, obter-se expressões para as derivadas com erros da ordem de h^m.

Diferenciação por Diferenças Finitas Progressivas

Seguindo procedimento análogo ao empregado para a diferenciação por diferenças finitas retroativas:

Retendo-se apenas o primeiro termo das derivadas, obtém-se aproximações para as derivadas de uma função $y = f(x)$, no ponto *i*, com erro da ordem de *h*:

$$\begin{cases} Dy_i = \dfrac{\Delta y_i}{h} + O(h) = \dfrac{1}{h}\left(-y_i + y_{i+1}\right) + O(h) \\ D^2 y_i = \dfrac{\Delta^2 y_i}{h^2} + O(h) = \dfrac{1}{h^2}\left(y_i - 2y_{i+1} + y_{i+2}\right) + O(h) \\ D^3 y_i = \dfrac{\Delta^3 y_i}{h^3} + O(h) = \dfrac{1}{h^3}\left(-y_i + 3y_{i+1} - 3y_{i+2} + y_{i+3}\right) + O(h) \\ \vdots \end{cases}$$

Retendo-se os dois primeiros termos das derivadas, obtém-se aproximações com erro da ordem de h^2.

$$\begin{cases} Dy_i = \dfrac{1}{2h}\left(-3y_i + 4y_{i+1} - y_{i+2}\right) + O(h^2) \\ D^2 y_i = \dfrac{1}{h^2}\left(2y_i - 5y_{i+1} + 4y_{i+2} - y_{i+3}\right) + O(h^2) \\ D^3 y_i = \dfrac{1}{h^3}\left(-5y_i + 18y_{i+1} - 24y_{i+2} + 14y_{i+3} - 3y_{i-4}\right) + O(h^2) \\ \vdots \end{cases}$$

Diferenciação por Diferenças Finitas Centrais

Seguindo, novamente, procedimento análogo ao empregado para a diferenciação por diferenças finitas retroativas, obtém-se:

$$\begin{cases} Dy_i = \dfrac{1}{2h}\left(y_{i+1} - y_{i-1}\right) + O(h^2) \\ D^2 y_i = \dfrac{1}{h^2}\left(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}\right) + O(h^2) \\ D^3 y_i = \dfrac{1}{2h^3}\left(y_{i+2} - 2y_{i+1} + 2y_{i-1} - y_{i-2}\right) + O(h^2) \\ \vdots \end{cases}$$

e

$$\begin{cases} Dy_i = \dfrac{1}{12h}\left(-y_{i+2} + 8y_{i+1} - 8y_{i-1} + y_{i-2}\right) + O(h^4) \\ D^2 y_i = \dfrac{1}{12h^2}\left(-y_{i+2} + 16y_{i+1} - 30y_i + 16y_{i-1} - y_{i-2}\right) + O(h^4) \\ D^3 y_i = \dfrac{1}{8h^3}\left(-y_{i+3} + 8y_{i+2} - 13y_{i+1} + 13y_{i-1} - 8y_{i-2} + y_{i-3}\right) + O(h^4) \\ \vdots \end{cases}$$

OBS.: *Sempre que possível, usam-se, para aproximar derivadas, fórmulas em função das diferenças finitas centrais, tendo em vista que elas são mais* precisas. As mais simples já são de $O(h^2)$.

Ex.2: Dada a tabela abaixo, aproxime::

i	0	1	2	3	4
x_i	1,8	1,9	2,0	2,1	2,2
y_i	10,8894	12,7032	14,7781	17,1490	19,8550

a) f' (2,0), usando diferenças finitas retroativas, com erro da ordem de h^2.

Solução:

$$Dy_i = \frac{1}{2h}\left(3y_i - 4y_{i-1} + y_{i-2}\right) + O(h^2) \Rightarrow$$

$$f'(2{,}0) \approx \frac{1}{2\times 0{,}1}\left(3\times 14{,}7781 - 4\times 12{,}7032 + 10{,}8894\right) \Rightarrow$$

$$f'(2{,}0) \approx 22{,}0545$$

b) f' (2,0), usando diferenças finitas progressivas, com erro da ordem de h^2.

Solução:

$$Dy_i = \frac{1}{2h}\left(-3y_i + 4y_{i+1} - y_{i+2}\right) + O(h^2) \Rightarrow$$

$$f'(2{,}0) \approx \frac{1}{2\times 0{,}1}\left(-3\times 14{,}7781 + 4\times 17{,}1490 - 19{,}8550\right) \Rightarrow$$

$$f'(2{,}0) \approx 22{,}0335$$

c) f' (2,0), usando diferenças finitas centrais, com erro da ordem de h^2.

Solução:

$$Dy_i = \frac{1}{2h}\left(y_{i+1} - y_{i-1}\right) + O(h^2) \Rightarrow$$

$$f'(2{,}0) \approx \frac{1}{2\times 0{,}1}\left(12{,}7032 - 17{,}1490\right) \Rightarrow$$

$$f'(2{,}0) \approx 22{,}2290$$

d) Sabendo que:

$$y = f(x) = xe^{x} \Leftrightarrow Dy = f'(x) = (x+1)e^{x} ;$$

determine o erro ($O(h^2)$) em cada caso:

Solução:

Valor exato: $f'(2{,}0) = (2+1)e^{2} \Rightarrow f'(2{,}0) = 22{,}1672$

Diferenças finitas retroativas:

$$f'(2{,}0) = 22{,}0545 + O(h^2) \Rightarrow$$
$$O(h^2) = 22{,}1672 - 22{,}0545 \Rightarrow$$
$$O(h^2) = 0{,}1127$$

Diferenças finitas progressivas:

$$f'(2{,}0) = 22{,}0335 + O(h^2) \Rightarrow$$
$$O(h^2) = 22{,}1672 - 22{,}0335 \Rightarrow$$
$$O(h^2) = 0{,}1337$$

Diferenças finitas centrais:

$$f'(2{,}0) = 22{,}2290 + O(h^2) \Rightarrow$$
$$O(h^2) = 22{,}1672 - 22{,}2290 \Rightarrow$$
$$O(h^2) = \text{-}0{,}0618$$