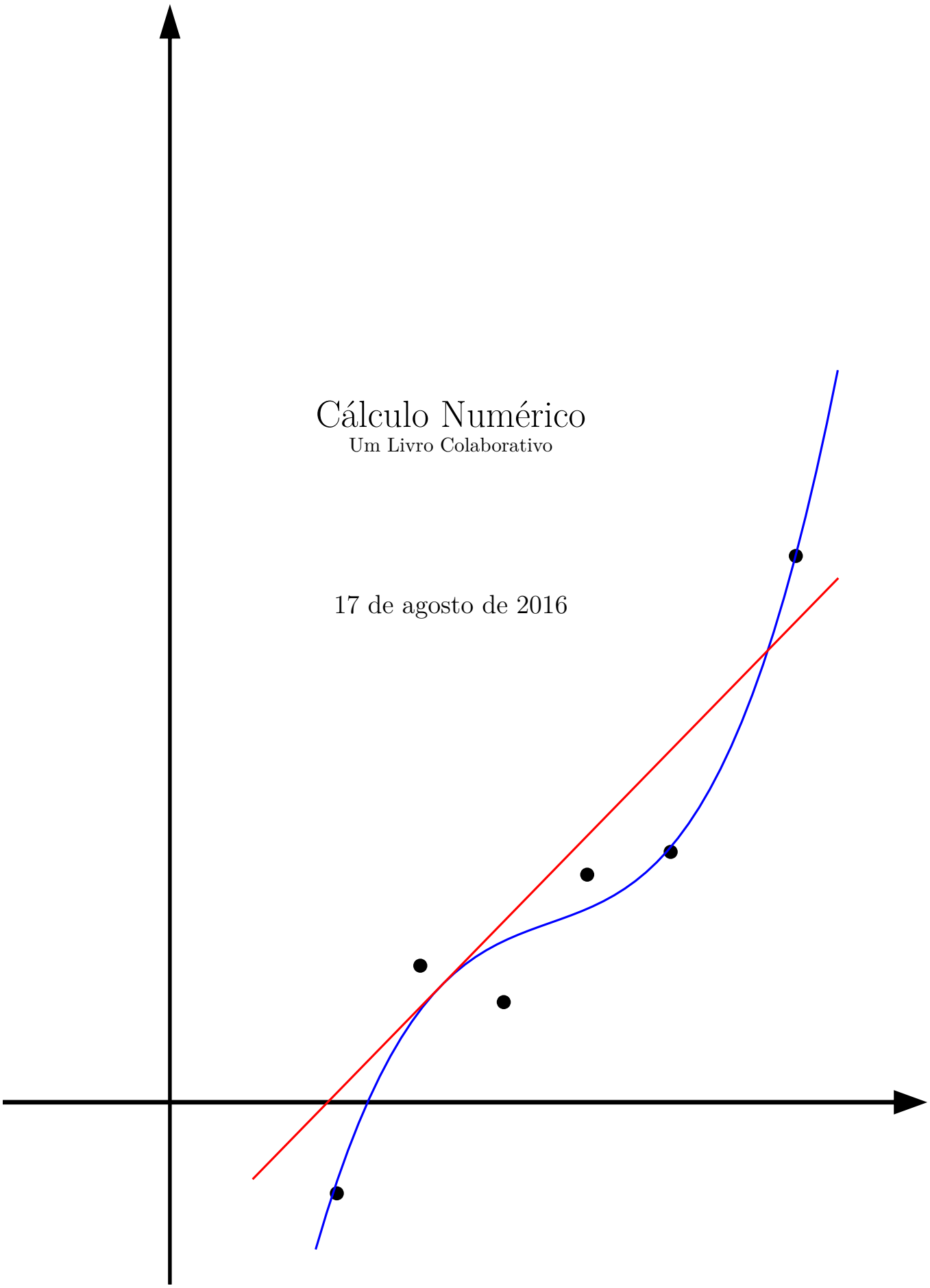
Cálculo Numérico

Um Livro Colaborativo

17 de agosto de 2016



Autores

Lista alfabética de autores:

Dagoberto Adriano Rizzotto Justo - UFRGS

Esequia Sauter - UFRGS

Fabio Souto de Azevedo - UFRGS

Pedro Henrique de Almeida Konzen - UFRGS

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Licença

Este trabalho está licenciado sob a Licença Creative Commons Atribuição-CompartilhaIgual 3.0 Não Adaptada. Para ver uma cópia desta licença, visite http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/ ou envie uma carta para Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

Nota dos autores

Este livro vem sendo construído de forma colaborativa desde 2011. Nosso intuito é melhorá-lo, expandi-lo e adaptá-lo às necessidades de um curso de cálculo numérico em nível de graduação.

Caso queira colaborar, tenha encontrado erros, tenha sugestões ou reclamações, entre em contato conosco pelo endereço de e-mail:

`livro_colaborativo@googlegroups.com`

Alternativamente, abra um chamado no repositório GitHub do projeto:

`https://github.com/livroscolaborativos/CalculoNumerico`

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Prefácio

Este livro busca abordar os tópicos de um curso de introdução ao cálculo numérico moderno oferecido a estudantes de matemática, física, engenharias e outros. A ênfase é colocada na formulação de problemas, implementação em computador da resolução e interpretação de resultados. Pressupõe-se que o estudante domine conhecimentos e habilidades típicas desenvolvidas em cursos de graduação de cálculo, álgebra linear e equações diferenciais. Conhecimentos prévios em linguagem de computadores é fortemente recomendável, embora apenas técnicas elementares de programação sejam realmente necessárias.

Ao longo do livro, fazemos ênfase na utilização do **software** livre `Scilab` para a implementação dos métodos numéricos abordados. Recomendamos que o leitor tenha à sua disposição um computador com o `Scilab` instalado. Não é necessário estar familiarizado com a linguagem `Scilab`, mas recomendamos a leitura do Apêndice A, no qual apresentamos uma rápida introdução a este pacote computacional. Alternativamente, existem algumas soluções em nuvem que fornecem acesso ao Scilab via internet. Por exemplo, a plataforma virtual rollApp (`https://www.rollapp.com/app/scilab`).

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Sumário

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Capítulo 1

Introdução

Cálculo numérico é a disciplina que estuda as técnicas para a solução aproximada de problemas matemáticos. Estas técnicas são de natureza analítica e computacional. As principais preocupações normalmente envolvem exatidão e perfórmance.

Aliado ao aumento contínuo da capacidade de computação disponível, o desenvolvimento de métodos numéricos tornou a simulação computacional de modelos matemáticos uma prática usual nas mais diversas áreas científicas e tecnológicas. As então chamadas simulações numéricas são constituídas de um arranjo de vários esquemas numéricos dedicados a resolver problemas específicos como, por exemplo: resolver equações algébricas, resolver sistemas lineares, interpolar e ajustar pontos, calcular derivadas e integrais, resolver equações diferenciais ordinárias, etc.. Neste livro, abordamos o desenvolvimento, a implementação, utilização e aspectos teóricos de métodos numéricos para a resolução desses problemas.

Os problemas que discutiremos não formam apenas um conjunto de métodos fundamentais, mas são, também, problemas de interesse na engenharia e na matemática aplicada. A necessidade de aplicar aproximações numéricas decorre do fato de que esses problemas podem se mostrar intratáveis se dispomos apenas de meios puramente analíticos, como aqueles estudados nos cursos de cálculo e álgebra linear. Por exemplo, o teorema de Abel-Ruffini nos garante que não existe uma fórmula algébrica, isto é, envolvendo apenas operações aritméticas e radicais, para calcular as raízes de uma equação polinomial de qualquer grau, mas apenas casos particulares:

- Simplesmente isolar a incógnita para encontrar a raiz de uma equação do primeiro grau;
- Fórmula de Bhaskara para encontrar raízes de uma equação do segundo grau;

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

- Fórmula de Cardano para encontrar raízes de uma equação do terceiro grau;
- Existe expressão para equações de quarto grau;
- Casos simplificados de equações de grau maior que 4 onde alguns coeficientes são nulos também podem ser resolvidos.

Equações não polinomiais podem ser ainda mais complicadas de resolver exatamente, por exemplo:

$$\cos(x) = x \qquad \text{e} \qquad xe^x = 10$$

Para resolver o problema de valor inicial

$$y' + xy = x,$$
$$y(0) = 2,$$

podemos usar o método de fator integrante e obtemos $y = 1 + e^{-x^2/2}$. Já o cálculo da solução exata para o problema

$$y' + xy = e^{-y},$$
$$y(0) = 2,$$

não é possível.

Da mesma forma, resolvemos a integral

$$\int_1^2 xe^{-x^2} dx$$

pelo método da substituição e obtemos $\frac{1}{2}(e^{-1} - e^{-2})$. Porém a integral

$$\int_1^2 e^{-x^2} dx$$

não pode ser resolvida analiticamente.

A maioria dos modelos de fenômenos reais chegam em problemas matemáticos onde a solução analítica é difícil (ou impossível) de ser encontrada, mesmo quando provamos que ela existe. Nesse curso propomos calcular aproximações numéricas para esses problemas, que apesar de, em geral, serem diferentes da solução exata, mostraremos que elas podem ser bem próximas.

Para entender a construção de aproximações é necessário estudar um pouco como funciona a aritmética de computador e erros de arredondamento. Como computadores, em geral, usam uma base binária para representar números, começaremos falando em mudança de base.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Capítulo 2

Aritmética de máquina

2.1 Sistema de numeração e mudança de base

Usualmente, utilizamos o sistema de numeração decimal para representar números. Esse é um sistema de numeração posicional onde a posição do dígito indica a potência de 10 que o dígito está representando.

Exemplo 1. O número 293 é decomposto como

$$\begin{aligned} 293 &= 2 \text{ centenas} + 9 \text{ dezenas} + 3 \text{ unidades} \\ &= 2 \cdot 10^2 + 9 \cdot 10^1 + 3 \cdot 10^0. \end{aligned}$$

O sistema de numeração posicional também pode ser usado com outras bases. Vejamos a seguinte definição.

Definição 1 (Sistema de numeração de base b)**.** *Dado um número natural $b > 1$ e o conjunto de símbolos $\{,, -, \mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{2}, \ldots, \boldsymbol{b-1}\}$[1], a sequência de símbolos*

$$(d_n d_{n-1} \cdots d_1 d_0, d_{-1} d_{-2} \cdots)_b$$

representa o número positivo

$$d_n \cdot b^n + d_{n-1} \cdot b^{n-1} + \cdots + d_0 \cdot b^0 + d_{-1} \cdot b^{-1} + d_{-2} \cdot b^{-2} + \cdots$$

Para representar números negativos usamos o símbolo $-$ a esquerda do numeral.

Observação 1 ($b \geq 10$). Para sistemas de numeração com base $b \geq 10$ é usual utilizar as seguintes notações:

[1] Para $b > 10$, veja a Observação 1

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

- No sistema de numeração decimal ($b = 10$), costumamos representar o número sem os parênteses e o subíndice, ou seja,

$$\pm d_n d_{n-1} \ldots d_1 d_0{,}d_{-1} d_{-2} \ldots := \pm (d_n d_{n-1} \ldots d_1 d_0{,}d_{-1} d_{-2} \ldots)_{10}$$

- Se $b > 10$, usamos as letras $A, B, C, \cdots$ para completar os símbolos: $A = 10$, $B = 11$, $C = 12$, $D = 13$, $E = 14$, $F = 15$.

Exemplo 2 (Sistema binário)**.** O sistema de numeração em base dois é chamado de binário e os algarismos binários são conhecidos como *bits*, do inglês **binary digits**. Um *bit* pode assumir dois valores distintos: 0 ou 1. Por exemplo:

$$\begin{aligned} x &= (1001{,}101)_2 \\ &= 1 \cdot 2^3 + 0 \cdot 2^2 + 0 \cdot 2^1 + 1 \cdot 2^0 + 1 \cdot 2^{-1} + 0 \cdot 2^{-2} + 1 \cdot 2^{-3} \\ &= 8 + 0 + 0 + 1 + 0{,}5 + 0 + 0{,}125 = 9{,}625 \end{aligned}$$

Ou seja, $(1001{,}101)_2$ é igual a 9,625 no sistema decimal.

Exemplo 3 (Sistema quaternário)**.** No sistema quaternário a base b é igual a 4. Por exemplo:

$$(301{,}2)_4 = 3 \cdot 4^2 + 0 \cdot 4^1 + 1 \cdot 4^0 + 2 \cdot 4^{-1} = 49{,}5$$

Exemplo 4 (Sistema octal)**.** No sistema octal a base é $b = 8$ e utilizamos os símbolos em $\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}$. Por exemplo:

$$\begin{aligned} (1357{,}24)_8 &= 1 \cdot 8^3 + 3 \cdot 8^2 + 5 \cdot 8^1 + 7 \cdot 8^0 + 2 \cdot 8^{-1} + 4 \cdot 8^{-2} \\ &= 512 + 192 + 40 + 7 + 0{,}25 + 0{,}0625 = 751{,}3125 \end{aligned}$$

Exemplo 5 (Sistema hexadecimal)**.** O sistema de numeração cuja a base é $b = 16$ é chamado de sistema hexadecimal. O conjunto de símbolos necessários é $S = \{“,”, -, 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, A, B, C, D, E, F\}$. Convertendo o número $(E2AC)_{16}$ para a base 10 temos

$$\begin{aligned} (E2AC)_{16} &= 14 \cdot 16^3 + 2 \cdot 16^2 + 10 \cdot 16^1 + 12 \cdot 16^0 \\ &= 57344 + 512 + 160 + 12 = 58028 \end{aligned}$$

Exemplo 6 (Scilab)**.** O `Scilab` oferece algumas funções para a conversão de números inteiros em dada base para a base decimal. Por exemplo, temos:

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
-->bin2dec('1001')
 ans  =
    9.
-->hex2dec('451')
 ans  =
    1105.
-->oct2dec('157')
 ans  =
    111.
-->base2dec('BEBA',16)
 ans  =
    48826.
```

A partir da Definição 1 acabamos de mostrar vários exemplos de conversão de números de uma sistema de numeração de base b para o sistema decimal. Agora, vamos estudar como fazer o processo inverso. Isto é, dado um número decimal $(X)_{10}$ queremos escrevê-lo em uma outra base b, i.e., queremos obter a seguinte representação:

$$\begin{aligned}(X)_{10} &= (d_n d_{n-1}\cdots d_0,d_{-1}\cdots)_b \\ &= d_n\cdot b^n + d_{n-1}\cdot b^{n-1} + \cdots + d_0\cdot b^0 + d_{-1}\cdot b^{-1} + d_{-2}\cdot b^{-2} + \cdots\end{aligned}$$

Separando as partes inteira e fracionária de X, i.e. $X = X^{\mathrm{i}} + X^{\mathrm{f}}$, temos:

$$X^{\mathrm{i}} = d_n\cdot b^n + \cdots + d_{n-1}b^{n-1}\cdot + d_1\cdot b^1 + d_0\cdot b^0 \qquad \text{e} \qquad X^{\mathrm{f}} = \frac{d_{-1}}{b^1} + \frac{d_{-2}}{b^2} + \cdots$$

Nosso objetivo é determinar os algarismos $\{d_n, d_{n-1}, ...\}$.

Primeiramente, vejamos como tratar a parte inteira X^{i}. Calculando sua divisão por b, temos:

$$\frac{X^{\mathrm{i}}}{b} = \frac{d_0}{b} + d_1 + d_2 b^1 \cdots + d_{n-1}\cdot b^{n-2} + d_n\cdot b^{n-1}.$$

Observe que d_0 é o resto da divisão de X^{i} por b, pois $d_1 + d_2 b^1 \cdots + d_{n-1}\cdot b^{n-2} + d_n\cdot b^{n-1}$ é inteiro e $\frac{d_0}{b}$ é uma fração (lembramos que $d_0 < b$). Da mesma forma, o resto da divisão de $d_1 + d_2 b^1 \cdots + d_{n-1}\cdot b^{n-2} + d_n\cdot b^{n-1}$ por b é d_1. Repetimos o processo até encontrar os símbolos $d_0, d_1, d_2, \ldots$.

Exemplo 7 (Conversão da parte inteira)**.** Vamos escrever o número 125 na base 6. Para tanto, fazemos sucessivas divisões por 6 como segue:

$$\begin{aligned}125 &= 20\cdot 6 + 5 \quad (125 \text{ dividido por } 6 \text{ é igual a } 20 \text{ e resta } 5) \\ &= (3\cdot 6 + 2)\cdot 6 + 5 = 3\cdot 6^2 + 2\cdot 6 + 5,\end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

logo $125 = (325)_6$.

Estes cálculos podem ser feitos no `Scilab` com o auxílio das funções `modulo` e `int`. A primeira calcula o resto da divisão entre dois números, enquanto que a segunda retorna a parte inteira de um número dado. No nosso exemplo, temos:

```
-->q = 125, d0 = modulo(q,6)
-->q = int(q/6), d1 = modulo(q,6)
-->q = int(q/6), d2 = modulo(q,6)
```

Verifique!

Exemplo 8 (Scilab)**.** O `Scilab` oferece algumas funções para a conversão de números inteiros em dada base para a base decimal. Assim, temos:

```
-->bin2dec('1001')
 ans  =
    9.
-->hex2dec('451')
 ans  =
    1105.
-->oct2dec('157')
 ans  =
    111.
-->base2dec('BEBA',16)
 ans  =
    48826.
```

Vamos converter a parte fracionária de um número decimal em uma dada base b. Usando a notação $X = X^{\mathrm{i}} + X^{\mathrm{f}}$ para as partes inteira e fracionária, respectivamente, temos:

$$bX^{\mathrm{f}} = d_{-1} + \frac{d_{-2}}{b} + \frac{d_{-3}}{b^2} + \cdots$$

Observe que a parte inteira desse produto é d_{-1} e $\frac{d_{-2}}{b} + \frac{d_{-3}}{b^2} + \cdots$ é a parte fracionária. Quando multiplicamos $\frac{d_{-2}}{b} + \frac{d_{-3}}{b^2} + \cdots$ por b novamente, encontramos d_{-2}. Repetimos o processo até encontrar todos os símbolos.

Exemplo 9 (Conversão da parte fracionária)**.** Escrever o número $125{,}58\overline{3}$ na base 6. Do exemplo anterior temos que $125 = (325)_6$. Assim, nos resta

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

converter a parte fracionária. Para tanto, fazemos sucessivas multiplicações por 6 como segue:]

$$\begin{aligned} 0{,}58\overline{3} &= 3{,}5 \cdot 6^{-1} \quad (0{,}58\overline{3} \text{ multiplicado por 6 é igual a } 3{,}5) \\ &= 3 \cdot 6^{-1} + 0{,}5 \cdot 6^{-1} \\ &= 3 \cdot 6^{-1} + (3 \cdot 6^{-1}) \cdot 6^{-1} \\ &= 3 \cdot 6^{-1} + 3 \cdot 6^{-2}, \end{aligned}$$

logo $0{,}58\overline{3} = (0{,}33)_6$. As contas feitas aqui, também podem ser feitas no `Scilab`. Você sabe como?

Uma maneira de converter um número dado numa base b_1 para uma base b_2 é fazer em duas partes: primeiro converter o número dado na base b_2 para base decimal e depois converter para a base b_1.

Exercícios

E 2.1.1. Converta para base decimal cada um dos seguintes números:

a) $(100)_2$ c) $(100)_b$ e) $(AA)_{16}$ g) $(3{,}12)_5$

b) $(100)_3$ d) $(12)_5$ f) $(7{,}1)_8$

E 2.1.2. Escreva os números abaixo na base decimal.

a) $(25{,}13)_8$

b) $(101{,}1)_2$

c) $(12F{,}4)_{16}$

d) $(11{,}2)_3$

E 2.1.3. Escreva cada número decimal na base b.

a) $7{,}\overline{6}$ na base $b = 5$

b) $29{,}1\overline{6}$ na base $b = 6$

E 2.1.4. Escreva cada número dado para a base b.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

a) $(45{,}1)_8$ para a base $b = 2$

b) $(21{,}2)_8$ para a base $b = 16$

c) $(1001{,}101)_2$ para a base $b = 8$

d) $(1001{,}101)_2$ para a base $b = 16$

E 2.1.5. Escreva o número $x = 5{,}5$ em base binária.

E 2.1.6. Escreva o número $x = 17{,}109375$ em base hexadecimal (16).

E 2.1.7. Quantos algarismos são necessários para representar o número 937163832173947 em base binária? E em base 7? Dica: Qual é o menor e o maior inteiro que pode ser escrito em dada base com N algarismos?

E 2.1.8. Escreva $x = (12.4)_8$ em base decimal e binária.

2.2 Representação de números

Os computadores, em geral, usam a base binária para representar os números, onde as posições, chamadas de bits, assume as condições "verdadeiro" ou "falso", ou seja, 0 ou 1. Cada computador tem um número de bits fixo e, portanto, representa uma quantidade finita de números. Os demais números são tomados por proximidade àqueles conhecidos, gerando erros de arredondamento. Por exemplo, em aritmética de computador, o número 2 tem representação exata, logo $2^2 = 4$, mas $\sqrt{3}$ não tem representação finita, logo $(\sqrt{3})^2 \neq 3$.

Veja isso no `Scilab`:

```
-->2^2 == 4
 ans  =
  T
-->sqrt(3)^2 == 3
 ans  =
  F
```

2.2.1 Números inteiros

Tipicamente um número inteiro é armazenado num computador como uma sequência de dígitos binários de comprimento fixo denominado **registro**.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Representação sem sinal

Um registro com n bits da forma

d_{n-1}	d_{n-2}	$\cdots$	d_1	d_0

representa o número $(d_{n-1}d_{n-2}...d_1d_0)_2$.

Assim é possível representar números inteiros entre

$$\begin{aligned}
(111...111)_2 &= 2^{n-1} + 2^{n-2} + \cdots + 2^1 + 2^0 = 2^n - 1. \\
\vdots \qquad &= \\
(000...011)_2 &= (3)_{10} \\
(000...010)_2 &= (2)_{10} \\
(000...001)_2 &= (1)_{10} \\
(000...000)_2 &= (0)_{10}
\end{aligned}$$

Exemplo 10. No `Scilab`,

```
-->uint8( bin2dec('00000011') )
   ans = 3
-->uint8( bin2dec('11111110') )
   ans = 254
```

Representação com bit de sinal

O bit mais significativo (o primeiro à esquerda) representa o sinal: por convenção, 0 significa positivo e 1 significa negativo. Um registro com n bits da forma

s	d_{n-2}	$\cdots$	d_1	d_0

representa o número $(-1)^s(d_{n-2}...d_1d_0)_2$. Assim é possível representar números inteiros entre -2^{n-1} e 2^{n-1}, com duas representações para o zero: $(1000...000)_2$ e $(00000...000)_2$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 11. Em um registro com 8 bits, teremos os números

$$\begin{aligned}
(11111111)_2 &= -(2^6 + \cdots + 2 + 1) = -127 \\
&\vdots \\
(10000001)_2 &= -1 \\
(10000000)_2 &= -0 \\
(01111111)_2 &= 2^6 + \cdots + 2 + 1 = 127 \\
&\vdots \\
(00000010)_2 &= 2 \\
(00000001)_2 &= 1 \\
(00000000)_2 &= 0
\end{aligned}$$

Representação complemento de dois

O bit mais significativo (o primeiro à esquerda) representa o coeficiente de -2^{n-1}. Um registro com n bits da forma

d_{n-1}	d_{n-2}	$\cdots$	d_1	d_0

representa o número $-d_{n-1}2^{n-1} + (d_{n-2}...d_1d_0)_2$.

Note que todo registro começando com 1 será um número negativo.

Exemplo 12. O registro com 8 bits [01000011] representa o número

$$-0(2^7) + (1000011)_2 = 64 + 2 + 1 = 67.$$

O registro com 8 bits [10111101] representa o número

$$-1(2^7) + (0111101)_2 = -128 + 32 + 16 + 8 + 4 + 1 = -67.$$

Note que podemos obter a representação de -67 invertendo os dígitos de 67 em binário e somando 1.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 13. Em um registro com 8 bits, teremos os números

$$\begin{aligned}
(11111111)_2 &= -2^7 + 2^6 + \cdots + 2 + 1 = -1 \\
&\vdots \\
(10000001)_2 &= -2^7 + 1 = -127 \\
(10000000)_2 &= -2^7 = -128 \\
(01111111)_2 &= 2^6 + \cdots + 2 + 1 = 127 \\
&\vdots \\
(00000010)_2 &= 2 \\
(00000001)_2 &= 1 \\
(00000000)_2 &= 0
\end{aligned}$$

Exemplo 14. No `Scilab`,

```
-->int8( bin2dec('00000011') )
   ans = 3
-->int8( bin2dec('11111110') )
   ans = -2
```

2.2.2 Sistema de ponto fixo

O sistema de ponto fixo representa as partes inteira e fracionária do número com uma quantidade fixas de dígitos.

Exemplo 15. Em um computador de 32 bits que usa o sistema de ponto fixo, o registro

d_{31}	d_{30}	d_{29}	$\cdots$	d_1	d_0

pode representar o número

- $(-1)^{d_{31}}(d_{30}d_{29}\cdots d_{17}d_{16}, d_{15}d_{14}\cdots d_1d_0)_2$ se o sinal for representado por um dígito. Observe que nesse caso o zero possui duas representações possíveis:

  $$10000000000000000000000000000000$$

  e

  $$00000000000000000000000000000000$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

- $(d_{30}d_{29}\cdots d_{17}d_{16})_2 - d_{31}(2^{15} - 2^{-16}) + (0{,}d_{15}d_{14}\cdots d_1d_0)_2$ se o sinal do número estiver representado por uma implementação em complemento de um. Observe que o zero também possui duas representações possíveis:

  $$11111111111111111111111111111111$$

  e

  $$00000000000000000000000000000000$$

- $(d_{30}d_{29}\cdots d_{17}d_{16})_2 - d_{31}2^{15} + (0{,}d_{15}d_{14}\cdots d_1d_0)_2$ se o sinal do número estiver representado por uma implementação em complemento de dois. Nesse caso o zero é unicamente representado por

  $$00000000000000000000000000000000$$

Observe que 16 dígitos são usados para representar a parte fracionária, 15 são para representar a parte inteira e um dígito, o d_{31}, está relacionado ao sinal do número.

2.2.3 Normalização

Os números $h = 6.626 \times 10^{-34}$ e $N_A = 6.0221 \times 10^{23}$ não podem ser armazenados na máquina em ponto fixo do exemplo anterior.

Entretanto, a constante

$$\begin{aligned} h &= 6626 \times 10^{-37} \\ h &= 6.626 \times 10^{-34} \\ h &= 0.6626 \times 10^{-33} \\ h &= 0.006626 \times 10^{-31} \end{aligned}$$

pode ser escrita de várias formas diferentes. Para termos uma **representação única** definimos como notação normalizada a segunda opção ($1 \leq m < 10$) que apresenta apenas um dígito diferente de zero a esquerda do ponto decimal ($m = 6.626$).

Definição 2. *Definimos que*

$$x = (-1)^s (M)_b \times b^E,$$

está na ***notação normalizada***[2] *quando* $1 \leq (M)_b < b$*, onde*

[2]Em algumas referências é usado $(0.1)_b \leq (M)_b < 1$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

- s *é o* ***sinal*** *(*0 *para positivo e* 1 *para negativo),*
- E *é o* ***expoente****,*
- b *é a base (por ex.* 2*,* 8*,* 10 *ou* 16*),*
- $(M)_b$ *é o significando. O* ***significando*** *(também chamado de mantissa ou coeficiente) contém os dígitos significativos do número.*

Exemplo 16. Os números abaixo estão em notação normalizada:

$$x_1 = (-1.011101)_2 \times 2^{(100)_2}$$

$$x_2 = (-2.325)_{10} \times 10^1$$

Exemplo 17. Represente os números $0{,}00\overline{51}$ e $1205{,}41\overline{54}$ em um sistema de ponto fixo de 4 dígitos para a parte inteira e 4 dígitos para a parte fracionária. Depois represente os mesmos números utilizando notação normalizada com 7 dígitos significativos.

Solução. As representações dos números $0{,}00\overline{51}$ e $1205{,}41\overline{54}$ no sistema de ponto fixo são 0,0051 e 1205,4154, respectivamente. Em notação normalizada, as representações são $5{,}151515 \cdot 10^{-3}$ e $1{,}205415 \cdot 10^3$, respectivamente. ◊

Observação 2. No `Scilab`, a representação em ponto flutuante com n dígitos é dada na forma $\pm d_1{,}d_2d_3 \ldots d_n \times 10^E$. Consulte sobre o comando `format`!

2.2.4 Sistema de ponto flutuante

O sistema de ponto flutuante não possui quantidade fixa de dígitos para as partes inteira e fracionária do número.

Podemos definir uma máquina F em ponto flutuante de dois modos:

$$F(\beta,|M|,|E|,BIAS) \text{ ou } F(\beta,|M|,E_{MIN},E_{MAX})$$

onde

- β é a base (em geral 2 ou 10),
- $|M|$ é o número de dígitos da mantissa,
- $|E|$ é o número de dígitos do expoente,
- $BIAS$ é um valor de deslocamento do expoente (veja a seguir),

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

- E_{MIN} é o menor expoente,
- E_{MAX} é o maior expoente.

Considere uma máquina com um registro de 64 bits e base $\beta = 2$. Pelo padrão IEEE754, 1 bit é usado para o sinal, 11 bits para o expoente e 52 bits são usados para o significando tal que

s	c_{10}	c_9	$\cdots$	c_0	m_1	m_2	$\cdots$	m_{51}	m_{52}

represente o número (o $BIAS = 1023$ por definição)

$$x = (-1)^s M \times 2^{c-BIAS},$$

onde a **característica** é representada por

$$c = (c_{10}c_9 \cdots c_1c_0)_2 = c_{10}2^{10} + \cdots + c_1 2^1 + c_0 2^0$$

e o significando por

$$M = (1.m_1m_2 \cdots m_{51}m_{52})_2.$$

Em base 2 não é necessário armazenar o primeiro dígito (por quê?).

Por exemplo, o registro

$$[0|100\ 0000\ 0000|1010\ 0000\ 0000...0000\ 0000]$$

representa o número

$$(-1)^0(1 + 2^{-1} + 2^{-3}) \times 2^{1024-1023} = (1 + 0.5 + 0.125)2 = 3.25.$$

O expoente deslocado

Uma maneira de representar os expoentes inteiros é deslocar todos eles uma mesma quantidade. Desta forma permitimos a representação de números negativos e a ordem deles continua crescente. O expoente é representado por um inteiro sem sinal do qual é deslocado o **BIAS**.

Tendo $|E|$ dígitos para representar o expoente, geralmente o $BIAS$ é predefinido de tal forma a dividir a tabela ao meio de tal forma que o expoente *um* seja representado pelo sequência [100...000].

Exemplo 18. Com 64 bits, pelo padrão $IEEE754$, temos que $|E| := 11$. Assim $(100\ 0000\ 0000)_2 = 2^{10} = 1024$. Como queremos que esta sequência represente o 1, definimos $BIAS := 1023$, pois

$$1024 - BIAS = 1.$$

Com 32 bits, temos $|E| := 8$ e $BIAS := 127$. E com 128 bits, temos $|E| := 15$ e $BIAS := 16383$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Com 11 bits temos

$$\begin{aligned}
[111\ 1111\ 1111] &= reservado \\
[111\ 1111\ 1110] &= 2046 - BIAS = 1023_{10} = E_{MAX} \\
&\vdots = \\
[100\ 0000\ 0001] &= 2^{10} + 1 - BIAS = 2_{10} \\
[100\ 0000\ 0000] &= 2^{10} \quad - BIAS = 1_{10} \\
[011\ 1111\ 1111] &= 1023 \quad - BIAS = 0_{10} \\
[011\ 1111\ 1110] &= 1022 \quad - BIAS = -1_{10} \\
&\vdots = \\
[000\ 0000\ 0001] &= 1 - BIAS = -1022 = E_{MIN} \\
[000\ 0000\ 0000] &= reservado
\end{aligned}$$

O maior expoente é dado por $E_{MAX} = 1023$ e o menor expoente é dado por $E_{MIN} = -1022$.

O menor número representável positivo é dado pelo registro

$$[0|000\ 0000\ 0001|0000\ 0000\ 0000...0000\ 0000]$$

quando $s = 0$, $c = 1$ e $M = (1.000...000)_2$, ou seja,

$$MINR = (1 + 0)_2 \times 2^{1-1023} \approx 0.2225 \times 10^{-307}.$$

O maior número representável é dado por

$$[0|111\ 1111\ 1110|1111\ 1111\ ...1111\ 1111]$$

quando $s = 0$, $c = 2046$ e $M = (1.1111\ 1111....1111)_2 = 2 - 2^{-52}$, ou seja,

$$MAXR = (2 - 2^{-52}) \times 2^{2046-1023} \approx 2^{1024} \approx 0.17977 \times 10^{309}.$$

Casos especiais

O **zero** é um caso especial representado pelo registro

$$[0|000\ 0000\ 0000|0000\ 0000\ 0000...0000\ 0000]$$

Os expoentes **reservados** são usados para casos especiais:

- $c = [0000...0000]$ é usado para representar o zero (se $m = 0$) e os números subnormais (se $m \neq 0$).

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

- $c = [1111...1111]$ é usado para representar o infinito (se $m = 0$) e NaN (se $m \neq 0$).

Os números subnormais[3] tem a forma

$$x = (-1)^s(0.m_1m_2 \cdots m_{51}m_{52})_2 \times 2^{1-BIAS}.$$

Observação 3. O menor número positivo, o maior número e o menor número subnormal representáveis no `Scilab` são:

```
-->MINR=number_properties('tiny')
-->MAXR=number_properties('huge')
-->number_properties('tiniest')
```

Outras informações sobre a representação em ponto flutuante podem ser obtidas com `help number_properties`.

2.2.5 A precisão e o epsilon de máquina

A **precisão** p de uma máquina é o número de dígitos significativos usado para representar um número. Note que $p = |M| + 1$ em binário e $p = |M|$ para outras bases.

O **epsilon de máquina**, $\epsilon_{mach} = \epsilon$, é definido como o menor número representável tal que $1 + \epsilon$ seja diferente de 1.

Exemplo 19. Com 64 bits, temos que o epsilon será dado por

$$\begin{array}{rl} 1 \rightarrow & (1.0000\ 0000....0000)_2 \times 2^0 \\ \epsilon \rightarrow & +(0.0000\ 0000....0001)_2 \times 2^0 = 2^{-52} \\ \hline & (1.0000\ 0000....0001)_2 \times 2^0 \neq 1 \end{array}$$

Assim $\epsilon = 2^{-52}$.

2.2.6 A distribuição dos números

Utilizando uma máquina em ponto flutuante temos um número finito de números que podemos representar.

Um número muito pequeno geralmente é aproximado por zero (underflow) e um número muito grande (overflow) geralmente faz o cálculo parar. Além disso, os números não estão uniformemente espaçados no eixo real. Números pequenos estão bem próximos enquanto que números com expoentes grandes estão bem distantes.

[3]Note que poderíamos definir números um pouco menores que o $MINR$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Se tentarmos armazenar um número que não é representável, devemos utilizar o número mais próximo, gerando os erros de arredondamento.

Por simplicidade, a partir daqui nós adotaremos $b = 10$.

Observação 4. O chamado modo de exceção de ponto flutuante é controlado pela função `ieee`. O padrão do `Scilab` é `ieee(0)`. Estude os seguintes resultados das seguintes operações usando os diferentes modos de exceção:

```
-->2*number_properties('huge'), 1/2^999, 1/0, 1/-0
```

Em geral, os números não são representados de forma exata nos computadores. Isto nos leva ao chamado erro de arredondamento. Quando resolvemos problemas com técnicas numéricas estamos sujeitos a este e outros tipos de erros. Nas próximas seções, veremos quais são estes erros e como controlá-los, quando possível.

Exercícios

E 2.2.1. Explique a diferença entre o sistema de ponto fixo e ponto flutuante.

2.3 Tipos de Erros

Quando fazemos aproximações numéricas, os erros são gerados de várias formas, sendo as principais delas as seguintes:

1. **Precisão dos dados**: equipamentos de medição possuem precisão finita, acarretando erros nas medidas físicas.

2. **Erros de Arredondamento**: são aqueles relacionados com as limitações que existem na forma representar números de máquina.

3. **Erros de Truncamento**: ocorrem quando aproximamos um procedimento formado por uma sequência infinita de passos através de um outro procedimento finito. Por exemplo, a definição de integral é dada por uma soma infinita e, como veremos na terceira área, aproximarmo-la por um soma finita. Esse é um assunto que discutiremos várias vezes no curso, pois o tratamento do erro de truncamento é feito para cada método numérico.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Uma questão fundamental é a quantificação dos erros que estamos sujeitos ao computar a solução de um dado problema. Para tanto, precisamos definir medidas de erros (ou de exatidão). As medidas de erro mais utilizadas são o **erro absoluto** e o **erro relativo**.

Definição 3 (Erro absoluto e relativo)**.** *Seja x um número real e $\overline{x}$ sua aproximação. O* ***erro absoluto*** *da aproximação $\overline{x}$ é definido como*

$$|x - \overline{x}|.$$

O ***erro relativo*** *da aproximação $\overline{x}$ é definido como*

$$\frac{|x - \overline{x}|}{|x|}, \quad x \neq 0.$$

Observação 5. Observe que o erro relativo é adimensional e, muitas vezes, é dado em porcentagem. Mais precisamente, o erro relativo em porcentagem da aproximação $\overline{x}$ é dado por

$$\frac{|x - \bar{x}|}{|x|} \times 100\%.$$

Exemplo 20. Sejam $x = 123456{,}789$ e sua aproximação $\bar{x} = 123000$. O erro absoluto é

$$|x - \bar{x}| = |123456{,}789 - 123000| = 456{,}789$$

e o erro relativo é

$$\frac{|x - \bar{x}|}{|x|} = \frac{456{,}789}{123456{,}789} \approx 0{,}00369999 \text{ ou } 0{,}36\%$$

Exemplo 21. Sejam $y = 1{,}23456789$ e $\bar{y} = 1{,}13$. O erro absoluto é

$$|y - \bar{y}| = |1{,}23456789 - 1{,}13| = 0{,}10456789$$

que parece pequeno se compararmos com o exemplo anterior. Entretanto o erro relativo é

$$\frac{|y - \bar{y}|}{|y|} = \frac{0{,}10456789}{1{,}23456789} \approx 0{,}08469999 \text{ ou } 8{,}4\%$$

Note que o erro relativo leva em consideração a escala do problema.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 22. Observe os erros absolutos e relativos em cada caso

x	$\bar{x}$	erro absoluto	erro relativo
$0{,}\overline{3}\cdot 10^{-2}$	$0{,}3\cdot 10^{-2}$	$0{,}\overline{3}\cdot 10^{-3}$	$\frac{0{,}\overline{3}\cdot 10^{-3}}{0{,}\overline{3}\cdot 10^{-2}} = 10^{-1} = 10\%$
$0{,}\overline{3}$	$0{,}3$	$0{,}\overline{3}\cdot 10^{-1}$	$\frac{0{,}\overline{3}\cdot 10^{-1}}{0{,}\overline{3}} = 10^{-1} = 10\%$
$0{,}\overline{3}\cdot 10^{2}$	$0{,}3\cdot 10^{2}$	$0{,}\overline{3}\cdot 10^{1}$	$\frac{0{,}\overline{3}\cdot 10^{1}}{0{,}\overline{3}\cdot 10^{2}} = 10^{-1} = 10\%$

Outra forma de medir a exatidão de uma aproximação numérica é contar o **número de dígitos significativos corretos** em relação ao valor exato.

Definição 4 (Número de dígitos significativos corretos)**.** *A aproximação $\overline{x}$ de um número x tem s* ***dígitos significativos corretos*** *quando*[4]

$$\frac{|x-\overline{x}|}{|x|} < 5\times 10^{-s}.$$

Exemplo 23. Vejamos os seguintes casos:

a) A aproximação de $x = 0{,}333333$ por $\overline{x} = 0{,}333$ tem 3 dígitos significativos corretos, pois

$$\frac{|x-\overline{x}|}{|x|} = \frac{0{,}000333}{0{,}333333} \approx 0{,}000999 \leq 5\times 10^{-\mathbf{3}}.$$

b) Considere as aproximações $\bar{x}_1 = 0{,}666$ e $\bar{x}_2 = 0{,}667$ de $x = 0{,}666888$. Os erros relativos são

$$\frac{|x-\bar{x}_1|}{|x|} = \frac{|0{,}666888-0{,}666|}{0{,}666888} \approx 0{,}00133... < 5\times 10^{-3}.$$

$$\frac{|x-\bar{x}_2|}{|x|} = \frac{|0{,}666888-0{,}667|}{0{,}666888} \approx 0{,}000167... < 5\times 10^{-4}.$$

Note que $\bar{x}_1$ possui 3 dígitos significativos corretos e $\bar{x}_2$ possui 4 dígitos significativos (o quarto dígito é o dígito 0 que não aparece a direita, i.e, $\bar{x}_2 = 0.6670$. Isto também leva a conclusão que x_2 aproxima melhor o valor de x do que x_1 pois está mais próximo de x.

[4]Esta definição é apresentada em [3]. Não existe uma definição única na literatura para o conceito de dígitos significativos corretos, embora não precisamente equivalentes, elas transmitem o mesmo conceito. Uma maneira de interpretar essa regra é: calcula-se o erro relativo na forma normalizada e a partir da ordem do expoente temos o número de dígitos significativos corretos. Como queremos o expoente, podemos estimar s por

$$DIGSE(x,\bar{x}) = s \approx int\left|\log_{10}\frac{|x-\overline{x}|}{|x|}\right|.$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

c) $\overline{x} = 9{,}999$ aproxima $x = 10$ com 4 dígitos significativos corretos, pois

$$\frac{|x - \overline{x}|}{|x|} = \frac{|10 - 9{,}999|}{10} \approx 0{,}0000999... < 5 \times 10^{-4}.$$

d) Considere as aproximações $\overline{x}_1 = 1{,}49$ e $\overline{x}_2 = 1{,}5$ de $x = 1$. Da definição, temos que 1,49 aproxima 1 com um dígito significativo correto (verifique), equanto 1,5 tem zero dígito significativo correto, pois:

$$\frac{|1 - 1{,}5|}{|1|} = 5 \times 10^{-1} < 5 \times 10^{0}.$$

2.3.1 Erros de arredondamento

Os erros de arredondamento são aqueles gerados quando aproximamos um número real por um número com representação finita.

Existem várias formas de arredondar

$$x = \pm d_0{,}d_1 d_2 \ldots d_{k-1} d_k d_{k+1} \ldots d_n \times 10^e$$

usando k dígitos significativos. As duas principais são as seguintes:

1. **Arredondamento por truncamento** (ou corte): aproximamos x por

   $$\bar{x} = \pm d_0{,}d_1 d_2 \ldots d_k \times 10^e$$

   simplesmente descartando os dígitos d_j com $j > k$.

2. **Arredondamento por proximidade**: se $d_{k+1} < 5$ aproximamos x por

   $$\bar{x} = \pm d_0{,}d_1 d_2 \ldots d_k \times 10^e$$

   senão aproximamos x por[5]

   $$\bar{x} = \pm(d_0{,}d_1 d_2 \ldots d_k + 10^{-k}) \times 10^e$$

Observação 6. Observe que o arredondamento pode mudar todos os dígitos e o expoente da representação em ponto flutuante de um número dado.

[5]Note que essas duas opções são equivalentes a somar 5 no dígito a direita do corte e depois arredondar por corte, ou seja, arredondar por corte

$$\pm(d_0{,}d_1 d_2 \ldots d_k d_{k+1} + 5 \times 10^{-(k+1)}) \times 10^e$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 24. Represente os números $x_1 = 0{,}567$, $x_2 = 0{,}233$, $x_3 = -0{,}675$ e $x_4 = 0{,}314159265\ldots \times 10^1$ com dois dígitos significativos por truncamento e arredondamento.

Solução. Vejamos cada caso:

- Por truncamento:

$$x_1 = 0{,}56, \quad x_2 = 0{,}23, \quad x_3 = -0{,}67 \quad \text{e} \quad x_4 = 3{,}1.$$

  No `Scilab`, podemos obter a representação de $x_3 = -0{,}675$ fazendo (verifique):

```
-->format('e',8)
-->int(-0.675*1e2)/1e2
```

- Por arredondamento:

$$x_1 = 0{,}57; \quad x_2 = 0{,}23; \quad x_3 = -0{,}68 \quad \text{e} \quad x_4 = 3{,}1.$$

  No `Scilab`, a representação de números por arredondamento é o padrão. Assim, para obtermos a representação desejada de $x_3 = 0{,}675$ fazemos: podemos obter a representação de $x_3 = -0{,}675$ fazemos (verifique):

```
-->format('e',8)
-->-0.675
```

$\Diamond$

Exemplo 25. O arredondamento de $0{,}9999 \times 10^{-1}$ com 3 dígitos significativos é $0{,}1 \times 10^0$.

Exercícios

E 2.3.1. Calcule os erros absoluto e relativo das aproximações $\bar{x}$ para x.

a) $x = \pi = 3{,}14159265358979\cdots$ e $\bar{x} = 3{,}141$

b) $x = 1{,}00001$ e $\bar{x} = 1$

c) $x = 100001$ e $\bar{x} = 100000$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 2.3.2. Arredonde os seguintes números para cinco algarismos significativos corretos:

a) 1,7888544 c) 0,0017888544 e) $2{,}1754999 \times 10^{-10}$

b) 1788,8544 d) 0,004596632 f) $2{,}1754999 \times 10^{10}$

E 2.3.3. Verifique quantos são os dígitos significativos corretos em cada aproximação $\bar{x}$ para x.

a) $x = 2{,}5834$ e $\bar{x} = 2{,}6$

b) $x = 100$ e $\bar{x} = 99$

E 2.3.4. Represente os números 3276; 42,55 e 0,00003331 com três dígitos significativos por truncamento e arredondamento.

E 2.3.5. Resolva a equação $0{,}1x - 0{,}01 = 12$ usando arredondamento com três dígitos significativos em cada passo e compare com o resultado analítico

E 2.3.6. Calcule o erro relativo e absoluto envolvido nas seguintes aproximações e expresse as respostas com três algarismos significativos corretos.

a) $x = 3{,}1415926535898$ e $\tilde{x} = 3{,}141593$

b) $x = \frac{1}{7}$ e $\tilde{x} = 1{,}43 \times 10^{-1}$

2.4 Erros nas operações elementares

O erro presente relativo nas operações elementares de adição, subtração, multiplicação e divisão é da ordem do epsilon de máquina. Se estivermos usando uma máquina com 64 bits, temos que $\epsilon = 2^{-52} \approx 2{,}22E16$.

Este erro é bem pequeno! Assumindo que x e y são representados com todos dígitos corretos, temos aproximadamente 15 dígitos significativos corretos quando fizemos uma das operações $x + y$, $x - y$, $x \times y$ ou x/y.

Mesmo que fizéssemos, por exemplo, 1000 operações elementares em ponto flutuante sucessivas, teríamos no pior dos casos acumulado todos esses erros e perdido 3 casas decimais ($1000 \times 10^{-15} \approx 10^{-12}$).

Entretanto, quando subtraímos números muito próximos, os problemas aumentam.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

2.5 Cancelamento catastrófico

Quando fazemos subtrações com números muito próximos entre si ocorre o cancelamento catastrófico, onde podemos perder vários dígitos de precisão em uma única subtração.

Exemplo 26. Efetue a operação

$$0{,}987624687925 - 0{,}987624 = 0{,}687925 \times 10^{-6}$$

usando arredondamento com seis dígitos significativos e observe a diferença se comparado com resultado sem arredondamento.

Solução. Os números arredondados com seis dígitos para a mantissa resultam na seguinte diferença

$$0{,}987625 - 0{,}987624 = 0{,}100000 \times 10^{-5}$$

Observe que os erros relativos entre os números exatos e aproximados no lado esquerdo são bem pequenos,

$$\frac{|0{,}987624687925 - 0{,}987625|}{|0{,}987624687925|} = 0{,}00003159$$

e

$$\frac{|0{,}987624 - 0{,}987624|}{|0{,}987624|} = 0\%,$$

enquanto no lado direito o erro relativo é enorme:

$$\frac{|0{,}100000 \times 10^{-5} - 0{,}687925 \times 10^{-6}|}{0{,}687925 \times 10^{-6}} = 45{,}36\%.$$

$\Diamond$

Exemplo 27. Considere o problema de encontrar as raízes da equação de segundo grau

$$x^2 + 300x - 0{,}014 = 0,$$

usando seis dígitos significativos.

Aplicando a fórmula de Bhaskara com $a = 0{,}100000 \times 10^1$, $b = 0{,}300000 \times 10^3$ e $c = 0{,}140000 \times 10^{-1}$, temos o discriminante:

$$\begin{aligned}
\Delta &= b^2 - 4 \cdot a \cdot c \\
&= 0{,}300000 \times 10^3 \times 0{,}300000 \times 10^3 \\
&+ 0{,}400000 \times 10^1 \times 0{,}100000 \times 10^1 \times 0{,}140000 \times 10^{-1} \\
&= 0{,}900000 \times 10^5 + 0{,}560000 \times 10^{-1} \\
&= 0{,}900001 \times 10^5
\end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

e as raízes:

$$\begin{aligned} x_1,x_2 &= \frac{-0{,}300000 \times 10^3 \pm \sqrt{\Delta}}{0{,}200000 \times 10^1} \\ &= \frac{-0{,}300000 \times 10^3 \pm \sqrt{0{,}900001 \times 10^5}}{0{,}200000 \times 10^1} \\ &= \frac{-0{,}300000 \times 10^3 \pm 0{,}300000 \times 10^3}{0{,}200000 \times 10^1} \end{aligned}$$

Então, as duas raízes são:

$$\begin{aligned} \tilde{x}_1 &= \frac{-0{,}300000 \times 10^3 - 0{,}300000 \times 10^3}{0{,}200000 \times 10^1} \\ &= -\frac{0{,}600000 \times 10^3}{0{,}200000 \times 10^1} = -0{,}300000 \times 10^3 \end{aligned}$$

e

$$\tilde{x}_2 = \frac{-0{,}300000 \times 10^3 + 0{,}300000 \times 10^3}{0{,}200000 \times 10^1} = 0{,}000000 \times 10^0$$

Agora, os valores das raízes com seis dígitos significativos deveriam ser

$$x_1 = -0{,}300000 \times 10^3 \quad \text{e} \quad x_2 = 0{,}466667 \times 10^{-4}.$$

Observe que um raiz saiu com seis dígitos significativos corretos, mas a outra não possui nenhum dígito significativo correto.

Observação 7. No exemplo anterior b^2 é muito maior que $4ac$, ou seja, $b \approx \sqrt{b^2 - 4ac}$, logo a diferença

$$-b + \sqrt{b^2 - 4ac}$$

estará próxima de zero. Uma maneira padrão de evitar o cancelamento catastrófico é usar procedimentos analíticos para eliminar essa diferença. Abaixo veremos alguns exemplos.

Exemplo 28. Para eliminar o cancelamento catastrófico do exemplo anterior, usamos a seguinte expansão em série de Taylor em torno da origem

$$\sqrt{1-x} = 1 - \frac{1}{2}x + O(x^2).$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Substituindo na fórmula de Bhaskara, temos:

$$\begin{aligned} x &= \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \\ &= \frac{-b \pm b\sqrt{1 - \frac{4ac}{b^2}}}{2a} \\ &\approx \frac{-b \pm b\left(1 - \frac{4ac}{2b^2}\right)}{2a} \end{aligned}$$

Observe que $\frac{4ac}{b^2}$ é um número pequeno e por isso a expansão faz sentido. Voltamos no exemplo anterior e calculamos as duas raízes com o nova expressão

$$\begin{aligned} \tilde{x}_1 &= \frac{-b - b + \frac{4ac}{2b}}{2a} = -\frac{b}{a} + \frac{c}{b} \\ &= -\frac{0{,}300000 \times 10^3}{0{,}100000 \times 10^1} - \frac{0{,}140000 \times 10^{-1}}{0{,}300000 \times 10^3} \\ &= -0{,}300000 \times 10^3 - 0{,}466667 \times 10^{-4} \\ &= -0{,}300000 \times 10^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{x}_2 &= \frac{-b + b - \frac{4ac}{2b}}{2a} \\ &= -\frac{4ac}{4ab} \\ &= -\frac{c}{b} = -\frac{-0{,}140000 \times 10^{-1}}{0{,}300000 \times 10^3} = 0{,}466667 \times 10^{-4} \end{aligned}$$

Observe que o efeito catastrófico foi eliminado.

2.6 Propagação de erros

Dado uma função diferenciável f, considere $\bar{x}$ uma aproximação para x e $f(\bar{x})$ uma aproximação para $f(x)$. Sabendo o erro $\delta_x = |x - \bar{x}|$, queremos estimar o erro $\delta_f = |f(x) - f(\bar{x})|$. Pelo teorema do valor médio, existe ϵ contido no intervalo aberto formado por x e $\bar{x}$ tal que

$$f(x) - f(\bar{x}) = f'(\epsilon)(x - \bar{x}).$$

Como não conhecemos o valor de ϵ, supomos que a derivada $f'(\epsilon)$ é limitada por M ($|f'(\epsilon)| \leq M$) no intervalo fechado formado por x e $\bar{x}$ e obtemos

$$|f(x) - f(\bar{x})| \leq M|x - \bar{x}|.$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Se $f'(x)$ não varia muito rápido nesse intervalo e supondo δ_x pequeno, aproximamos $M \approx |f'(x)|$ e temos:

$$|f(x) - f(\bar{x})| \approx |f'(x)||x - \bar{x}|,$$

ou

$$\delta_f \approx |f'(x)|\delta_x.$$

De modo geral, quando f depende de várias variáveis, a seguinte estimativa vale:

$$\delta_f = |f(x_1,x_2,...,x_n) - f(\bar{x}_1,\bar{x}_2,...,\bar{x}_n)| \approx \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1,x_2,...,x_n) \right| \delta_{x_i}$$

Exemplo 29. O número $\frac{1}{3} = 0{,}\overline{3}$ possui um representação infinita tanto na base decimal quanto na base binária. Logo, quando representamos ele no computador geramos um erro de arredondamento que denotaremos por ϵ. Agora considere a seguinte sequência:

$$\begin{cases} x_0 = \frac{1}{3} \\ x_{n+1} = 4x_n - 1, \qquad n \in \mathbb{N} \end{cases}.$$

Observe que $x_0 = \frac{1}{3}$, $x_1 = 4 \cdot \frac{1}{3} - 1 = \frac{1}{3}$, $x_2 = \frac{1}{3}$, ou seja, temos uma sequência constante igual a $\frac{1}{3}$. Se calcularmos no computador essa sequência, temos que incluir os erros de arredondamento, ou seja,

$$\begin{aligned} \tilde{x}_0 &= \frac{1}{3} + \epsilon \\ \tilde{x}_1 &= 4x_0 - 1 = 4\left(\frac{1}{3} + \epsilon\right) - 1 = \frac{1}{3} + 4\epsilon \\ \tilde{x}_2 &= 4x_1 - 1 = 4\left(\frac{1}{3} + 4\epsilon\right) - 1 = \frac{1}{3} + 4^2\epsilon \\ &\vdots \\ \tilde{x}_n &= \frac{1}{3} + 4^n\epsilon \end{aligned}$$

Portanto o limite da sequência diverge,

$$\lim_{x\to\infty} |\tilde{x}_n| = \infty$$

Faça o teste no `Scilab`, colocando:

```
-->x = 1/3
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

e itere algumas vezes a linha de comando:

```
-->x = 4*x-1
```

Exemplo 30. Seja $f(x) = x\exp(x)$. Calcule o erro absoluto em se calcular $f(x)$ sabendo que $x = 2 \pm 0{,}05$.

Solução. Temos que $x \approx 2$ com erro absoluto de $\delta_x = 0{,}05$. Neste caso, calculamos δ_f, i.e. o erro absoluto em se calcular $f(x)$, por:

$$\delta_f = |f'(x)|\delta_x.$$

Como $f'(x) = (1+x)e^x$, temos:

$$\begin{aligned}\delta_f &= |(1+x)e^x| \cdot \delta_x \\ &= |3e^2| \cdot 0{,}05 = 1{,}1084.\end{aligned}$$

Portanto, o erro absoluto em se calcular $f(x)$ quando $x = 2 \pm 0{,}05$ é de 1,084. ◊

Exemplo 31. Calcule o erro relativo ao medir $f(x,y) = \frac{x^2+1}{x^2}e^{2y}$ sabendo que $x \approx 3$ é conhecido com 10% de erro e $y \approx 2$ é conhecido com 3% de erro.

Solução. Calculamos as derivadas parciais de f:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{2x^3 - (2x^3+2x)}{x^4}e^{2y} = -\frac{2e^{2y}}{x^3}$$

e

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 2\frac{x^2+1}{x^2}e^{2y}$$

Calculamos o erro absoluto em termos do erro relativo:

$$\frac{\delta_x}{|x|} = 0{,}1 \Rightarrow \delta_x = 3 \cdot 0{,}1 = 0{,}3$$

$$\frac{\delta_y}{|y|} = 0{,}03 \Rightarrow \delta_y = 2 \cdot 0{,}03 = 0{,}06$$

Aplicando a expressão para estimar o erro em f temos

$$\begin{aligned}\delta_f &= \left|\frac{\partial f}{\partial x}\right|\delta_x + \left|\frac{\partial f}{\partial y}\right|\delta_y \\ &= \frac{2e^4}{27} \cdot 0{,}3 + 2\frac{9+1}{9}e^4 \cdot 0{,}06 = 8{,}493045557\end{aligned}$$

Portanto, o erro relativo ao calcular f é estimado por

$$\frac{\delta f}{|f|} = \frac{8{,}493045557}{\frac{9+1}{9}e^4} = 14\%$$

◊

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 32. No exemplo anterior, reduza o erro relativo em x pela metade e calcule o erro relativo em f. Depois, repita o processo reduzindo o erro relativo em y pela metade.

Solução. Na primeira situação temos $x = 3$ com erro relativo de 5% e $\delta_x = 0{,}05 \cdot 3 = 0{,}15$. Calculamos $\delta_f = 7{,}886399450$ e o erro relativo em f de 13%. Na segunda situação, temos $y = 2$ com erro de 1,5% e $\delta_y = 2 \cdot 0{,}015 = 0{,}03$. Calculamos $\delta_f = 4{,}853168892$ e o erro relativo em f de 8%. Observe que mesma o erro relativo em x sendo maior, o erro em y é mais significante na função. ◊

Exemplo 33. Considere um triângulo retângulo onde a hipotenusa e um dos catetos são conhecidos a menos de um erro: hipotenusa $a = 3 \pm 0{,}01$ metros e cateto $b = 2 \pm 0{,}01$ metros. Calcule o erro absoluto ao calcular a área dessa triângulo.

Solução. Primeiro vamos encontrar a expressão para a área em função da hipotenusa a e um cateto b. A tamanho de segundo cateto c é dado pelo teorema de Pitágoras, $a^2 = b^2 + c^2$, ou seja, $c = \sqrt{a^2 - b^2}$. Portanto a área é

$$A = \frac{bc}{2} = \frac{b\sqrt{a^2 - b^2}}{2}.$$

Agora calculamos as derivadas

$$\frac{\partial A}{\partial a} = \frac{ab}{2\sqrt{a^2 - b^2}},$$

$$\frac{\partial A}{\partial b} = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{2} - \frac{b^2}{2\sqrt{a^2 - b^2}},$$

e substituindo na estimativa para o erro δ_A em termos de $\delta_a = 0{,}01$ e $\delta_b = 0{,}01$:

$$\begin{aligned} \delta_A &\approx \left|\frac{\partial A}{\partial a}\right| \delta_a + \left|\frac{\partial A}{\partial b}\right| \delta_b \\ &\approx \frac{3\sqrt{5}}{5} \cdot 0{,}01 + \frac{\sqrt{5}}{10} \cdot 0{,}01 = 0{,}01565247584 \end{aligned}$$

Em termos do erro relativo temos erro na hipotenusa de $\frac{0{,}01}{3} \approx 0{,}333\%$, erro no cateto de $\frac{0{,}01}{2} = 0{,}5\%$ e erro na área de

$$\frac{0{,}01565247584}{\frac{2\sqrt{3^2-2^2}}{2}} = 0{,}7\%$$

◊

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exercícios

E 2.6.1. Considere que a variável $x \approx 2$ é conhecida com um erro relativo de 1% e a variável $y \approx 10$ com um erro relativo de 10%. Calcule o erro relativo associado a z quando:

$$z = \frac{y^4}{1+y^4}e^x.$$

Suponha que você precise conhecer o valor de z com um erro de 0,5%. Como engenheiro, você propõe uma melhoria na medição da variável x ou y? Explique.

E 2.6.2. A corrente I em ampères e a tensão V em volts em uma lâmpada se relacionam conforme a seguinte expressão:

$$I = \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\alpha},$$

onde α é um número entre 0 e 1 e V_0 é tensão nominal em volts. Sabendo que $V_0 = 220 \pm 3\%$ e $\alpha = -,8 \pm 4\%$, calcule a corrente e o erro relativo associado quando a tensão vale $220 \pm 1\%$.
Obs:. Este problema pode ser resolvido de duas formas distintas: usando a expressão aproximada para a propagação de erro e inspecionando os valores máximos e mínimos que a expressão pode assumir. Pratique os dois métodos.

E 2.6.3. A corrente I em ampères e a tensão V em volts em uma lâmpada se relacionam conforme a seguinte expressão:

$$I = \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\alpha}$$

Onde α é um número entre 0 e 1 e V_0 é a tensão nominal em volts. Sabendo que $V_0 = 220 \pm 3\%$ e $\alpha = 0{,}8 \pm 4\%$ Calcule a corrente e o erro relativo associado quando a tensão vale $220 \pm 1\%$. **Dica:** lembre que $x^\alpha = e^{\alpha \ln(x)}$

E 2.6.4. Obtenha os valores de I_d no problema 3.2.8. Lembre que existem duas expressões disponíveis:

$$I_d = I_R\left(\exp\left(\frac{v_d}{v_t}\right) - 1\right)$$

e

$$I_d = \frac{v - v_d}{R}$$

Faça o estudo da propagação do erro e decida qual a melhor expressão em cada caso.

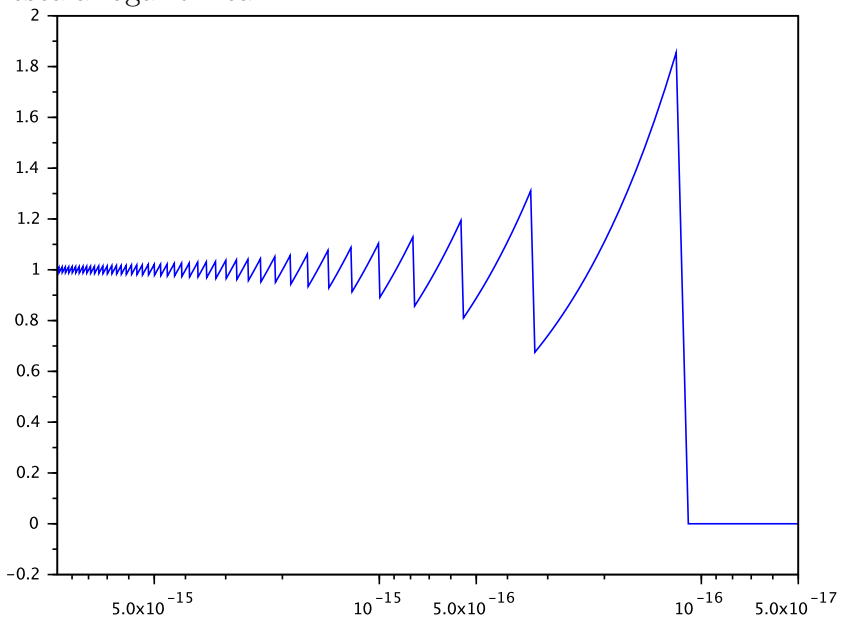
Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

2.7 Mais exemplos

Exemplo 34. Observe a seguinte identidade

$$f(x) = \frac{(1+x)-1}{x} = 1$$

Calcule o valor da expressão à esquerda para $x = 10^{-12}$, $x = 10^{-13}$, $x = 10^{-14}$, $x = 10^{-15}$, $x = 10^{-16}$ e $x = 10^{-17}$. Observe que quando x se aproxima do ϵ de máquina a expressão perde o significado. Veja abaixo o gráfico de $f(x)$ em escala logarítmica.



Exemplo 35. Neste exemplo, estamos interessados em compreender mais detalhadamente o comportamento da expressão

$$\left(1+\frac{1}{n}\right)^n \tag{2.1}$$

quando n é um número grande ao computá-la em sistemas de numeral de ponto flutuante com acurácia finita. Um resultado bem conhecido do cálculo nos diz que o limite de (2.1) quando n tende a infinito é o número de Euler:

$$\lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{1}{n}\right)^n = e = 2{,}718281828459... \tag{2.2}$$

Sabemos também que a sequência produzida por (2.1) é crescente, isto é:

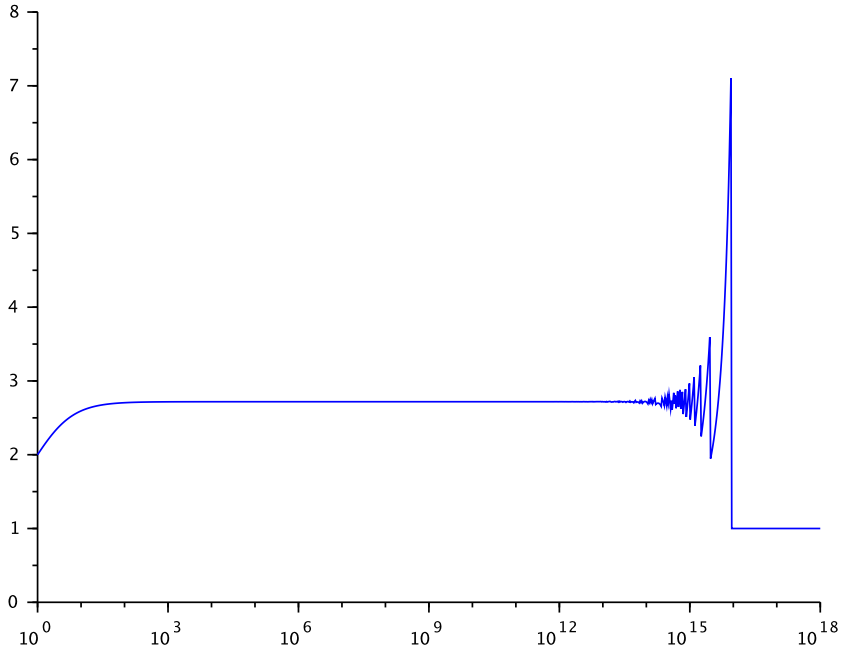
$$\left(1+\frac{1}{1}\right)^1 < \left(1+\frac{1}{2}\right)^2 < \left(1+\frac{1}{3}\right)^3 < \cdots$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

No entanto, quando calculamos essa expressão no `Scilab`, nos defrontamos com o seguinte resultado:

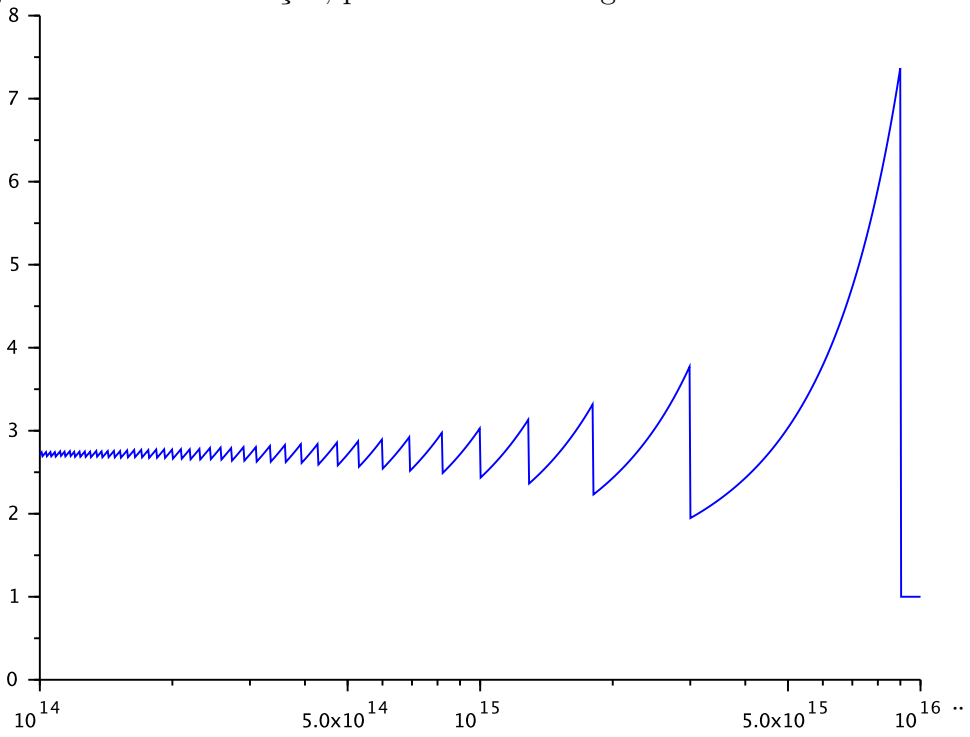
n	$\left(1+\frac{1}{n}\right)^n$		n	$\left(1+\frac{1}{n}\right)^n$
1	2,0000000000000		10^2	2,7048138294215
2	2,2500000000000		10^4	2,7181459268249
3	2,3703703703704		10^6	2,7182804690957
4	2,4414062500000		10^8	2,7182817983391
5	2,4883200000000		10^{10}	2,7182820532348
6	2,5216263717421		10^{12}	2,7185234960372
7	2,5464996970407		10^{14}	2,7161100340870
8	2,5657845139503		10^{16}	1,0000000000000
9	2,5811747917132		10^{18}	1,0000000000000
10	2,5937424601000		10^{20}	1,0000000000000

Podemos resumir esses dados no seguinte gráfico de $\left(1+\frac{1}{n}\right)^n$ em função de n:



Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Observe que quando x se torna grande, da ordem de 10^{15}, o gráfico da função deixa de se crescente e apresenta oscilações. Observe também que a expressão se torna identicamente igual a 1 depois de um certo limiar. Tais fenômenos não são intrínsecos da função $f(x) = (1 + 1/x)^x$, mas **oriundas de erros de arredondamento**, isto é, são resultados numéricos espúrios. A fim de pôr o comportamento numérico de tal expressão, apresentamos abaixo o gráfico da mesma função, porém restrito à região entre 10^{14} e 10^{16}.



Para compreendermos melhor por que existe um limiar N que, quando atingido torna a expressão do exemplo acima identicamente igual a 1, observamos a sequência de operações realizadas pelo computador:

$$x \;\rightarrow\; 1/x \;\rightarrow\; 1+1/x \;\rightarrow\; (1+1/x)^x \tag{2.3}$$

Devido ao limite de precisão da representação de números em ponto flutuante, existe um menor número representável que é maior do que 1. Este número é 1+`eps`, onde `eps` é chamado de **épsilon de máquina** e é o menor número que somado a 1 produz um resultado superior a 1 no sistema de numeração usado. O épsilon de máquina no sistema de numeração **double** vale aproximadamente $2{,}22 \times 10^{-16}$. No `Scilab`, o epsilon de máquina é a constante `eps`. Observe que:

```
-->1+%eps
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
 ans  =
    1.00000000000000002220446
```

Quando somamos a 1 um número positivo inferior ao épsilon de máquina, obtemos o número 1. Dessa forma, o resultado obtido pela operação de ponto flutuante $1 + x$ para $0 < x < 2{,}22 \times 10^{-16}$ é 1.

Portanto, quando realizamos a sequência de operações dada em (2.3), toda informação contida no número x é perdida na soma com 1 quando $1/x$ é menor que o épsilon de máquina, o que ocorre quando $x > 5 \times 10^{15}$. Assim $(1 + 1/x)$ é aproximado para 1 e a última operação se resume a 1^x, o que é igual a 1 mesmo quando x é grande.

Um erro comum é acreditar que o perda de significância se deve ao fato de $1/x$ ser muito pequeno para ser representado e é aproximando para 0. Isto é falso, o sistema de ponto de flutuante permite representar números de magnitude muito inferior ao épsilon de máquina. O problema surge da limitação no tamanho da mantissa. Observe como a seguinte sequência de operações não perde significância para números positivos x muito menores que o épsilon de máquina:

$$x \ \rightarrow \ 1/x \ \rightarrow \ 1/(1/x) \tag{2.4}$$

compare o desempenho numérico desta sequência de operações para valores pequenos de x com o da seguinte sequência:

$$x \ \rightarrow \ 1 + x \ \rightarrow \ (1 + x) - 1. \tag{2.5}$$

Finalmente, notamos que quando tentamos calcular $\left(1 + \frac{1}{n}\right)^n$ para n grande, existe perda de significância no cálculo de $1 + 1/n$. Para entendermos isso melhor, vejamos o que acontece no `Scilab` quando $n = 7 \times 10^{13}$:

```
-->n=7e13
 n  =
     7.000000000000000000D+13

-->1/n
 ans  =
     1.428571428571428435D-14

-->y=1+1/n
 y  =

    1.000000000000014211D+00
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Observe a perda de informação ao deslocar a mantissa de $1/n$. Para evidenciar o fenômenos, observamos o que acontece quando tentamos recalcular n subtraindo 1 de $1 + 1/n$ e invertendo o resultado:

```
-->y-1
 ans  =
     1.421085471520200372D-14

-->1/(y-1)
 ans  =
     7.036874417766400000D+13
```

Exemplo 36 (Analogia da balança)**.** Observe a seguinte comparação interessante que pode ser feita para ilustrar os sistemas de numeração com ponto fixo e flutuante: o sistema de ponto fixo é como uma balança cujas marcas estão igualmente espaçadas; o sistema de ponto flutuante é como uma balança cuja distância entre as marcas é proporcional à massa medida. Assim, podemos ter uma balança de ponto fixo cujas marcas estão sempre distanciadas de 100g (100g, 200g, 300g, ..., 1Kg, 1,1Kg,...) e outra balança de ponto flutuante cujas marcas estão distanciadas sempre de aproximadamente um décimo do valor lido (100g, 110g, 121g, 133g, ..., 1Kg, 1,1Kg, 1,21Kg, ...) A balança de ponto fixo apresenta uma resolução baixa para pequenas medidas, porém uma resolução alta para grandes medidas. A balança de ponto flutuante distribui a resolução de forma proporcional ao longo da escala.

Seguindo nesta analogia, o fenômeno de perda de significância pode ser interpretado como a seguir: imagine que você deseje obter o peso de um gato (aproximadamente 4Kg). Dois processos estão disponíveis: colocar o gato diretamente na balança ou medir seu peso com o gato e, depois, sem o gato. Na balança de ponto flutuante, a incerteza associada na medida do peso do gato (sozinho) é aproximadamente 10% de 4Kg, isto é, 400g. Já a incerteza associada à medida da uma pessoa (aproximadamente 70Kg) com o gato é de 10% do peso total, isto é, aproximadamente 7Kg. Esta incerteza é da mesma ordem de grandeza da medida a ser realizada, tornado o processo impossível de ser realizado, já que teríamos uma incerteza da ordem de 14Kg (devido à dupla medição) sobre uma grandeza de 4Kg.

Exercícios

E 2.7.1. Considere as expressões:

$$\frac{\exp(1/\mu)}{1+\exp(1/\mu)}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

e

$$\frac{1}{\exp(-1/\mu)+1}$$

com $\mu > 0$. Verifique que elas são idênticas como funções reais. Teste no computador cada uma delas para $\mu = 0{,}1$, $\mu = 0{,}01$ e $\mu = 0{,}001$. Qual dessas expressões é mais adequada quando μ é um número pequeno? Por quê?

E 2.7.2. Encontre expressões alternativas para calcular o valor das seguintes funções quando x é próximo de zero.

a) $f(x) = \frac{1-\cos(x)}{x^2}$

b) $g(x) = \sqrt{1+x} - 1$

c) $h(x) = \sqrt{x+10^6} - 10^3$

d) $i(x) = \sqrt{1+e^x} - \sqrt{2}$ Dica: Faça $y = e^x - 1$

E 2.7.3. Use uma identidade trigonométrica adequada para mostrar que:

$$\frac{1-\cos(x)}{x^2} = \frac{1}{2}\left(\frac{\sin(x/2)}{x/2}\right)^2.$$

Analise o desempenho destas duas expressões no computador quando x vale 10^{-5}, 10^{-6}, 10^{-7}, 10^{-8}, 10^{-9}, 10^{-200} e 0. Discuta o resultado. **Dica:** Para $|x| < 10^{-5}$, $f(x)$ pode ser aproximada por $1/2 - x^2/24$ com erro de truncamento inferior a 10^{-22}.

E 2.7.4. Reescreva as expressões:

$$\sqrt{e^{2x}+1} - e^x \qquad \text{e} \qquad \sqrt{e^{2x}+x^2} - e^x$$

de modo que seja possível calcular seus valores para $x = 100$ utilizando a aritmética de ponto flutuante ("Double") no computador.

E 2.7.5. Na teoria da relatividade restrita, a energia cinética de uma partícula e sua velocidade se relacionam pela seguinte fórmula:

$$E = mc^2\left(\frac{1}{\sqrt{1-(v/c)^2}} - 1\right),$$

onde E é a energia cinética da partícula, m é a massa de repouso, v o módulo da velocidade e c a velocidade da luz no vácuo dada por $c = 299792458m/s$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Considere que a massa de repouso $m = 9{,}10938291 \times 10^{-31} Kg$ do elétron seja conhecida com erro relativo de 10^{-9}. Qual é o valor da energia e o erro relativo associado a essa grandeza quando $v = 0{,}1c$, $v = 0{,}5c$, $v = 0{,}99c$ e $v = 0{,}999c$ sendo que a incerteza relativa na medida da velocidade é 10^{-5}?

E 2.7.6. Deseja-se medir a concentração de dois diferentes oxidantes no ar. Três sensores eletroquímicos estão disponíveis para a medida e apresentam a seguintes respostas:

$$v_1 = 270[A] + 30[B], \quad v_2 = 140[A] + 20[B] \text{ e } v_3 = 15[A] + 200[B]$$

as tensões v_1, v_2 e v_3 são dadas em mV e as concentrações em $milimol/l$.

a) Encontre uma expressão para os valores de $[A]$ e $[B]$ em termos de v_1 e v_2 e, depois, em termos de v_1 e v_3. Dica: Se $ad \neq bc$, então a matriz A dada por

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

é inversível e sua inversa é dada por

$$A^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}.$$

b) Sabendo que incerteza relativa associada às sensibilidades dos sensores 1 e 2 é de 2% e que a incerteza relativa associada às sensibilidades do sensor 3 é 10%, verifique a incerteza associada à medida feita com o par $1-2$ e o par $1-3$. Use $[A] = [B] = 10 milimol/l$. Dica: Você deve diferenciar as grandezas $[A]$ e $[B]$ em relação aos valores das tensões.

]

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Capítulo 3

Solução de equações de uma variável

Neste capítulo buscaremos aproximações numéricas para raízes de funções de uma variável que são continuamente diferenciáveis.

3.1 Condição de existência de raízes reais

Podemos utilizar o teorema do valor intermediário para determinar a existência de raiz real em um intervalo.

Teorema 1 (Teorema do Valor Intermediário)**.** *Se $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ é um função contínua e K for um número entre $f(a)$ e $f(b)$, então existe $c \in (a,b)$ para o qual $f(c) = K$.*

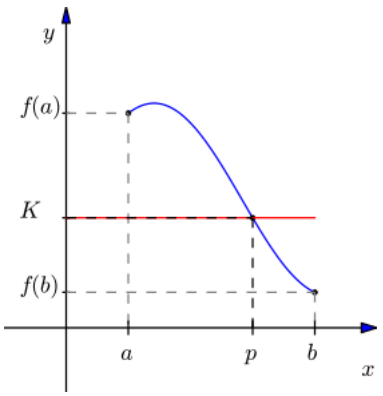


Figura 3.1: Teorema do valor intermediário

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Em particular, se $f(a) > 0$ e $f(b) < 0$, então $0 \in [f(b),f(a)]$ e podemos garantir a existência de $c \in (a,b)$ tal que $f(c) = 0$, i.e. existe uma raiz no intervalo (a,b). A mesma afirmação é válida se $f(a) < 0$ e $f(b) > 0$. Em outras palavras, o Teorema do Valor Intermediário afirma que uma função contínua não pode mudar de sinal sem passar por zero.

Exemplo 37. Mostre que existe pelo menos uma solução da equação $e^x = x + 2$ no intervalo $(-2,0)$.

De fato, se tomarmos $f(x) = e^x - x - 2$, então $f(0) = 1 - 2 < 0$ e $f(-2) = e^{-2} + 2 - 2 > 0$. Pelo teorema do valor intermediário, existe $c \in (-2,0)$ tal que $f(c) = 0$, ou seja, existe pelo menos uma solução nesse intervalo.

Quando procuramos aproximações para raízes de funções,precisamos inicialmente isolar cada raiz em um intervalo onde a raiz é unica. Ou seja, precisamos garantir a existência e a unicidade da raiz dentro daquele intervalo.

Uma situação quando a exitência e a unicidade é garantida em um intervalo é quando a função troca de sina no intervalo e é monótona nele

Teorema 2. *Se $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ é um função diferenciável, $f(a) \cdot f(b) < 0$ e $f'(x) > 0$ (ou $f'(x) < 0$) para $x \in (a,b)$, então existe uma única raiz c em (a,b).*

Em outras palavras, se a função corta o eixo x e é sempre crescente (ou sempre decrescente), então a raiz é única.

Exemplo 38. Observamos que existe uma única solução da equação $e^x = x + 2$ no intervalo $(-2,0)$. A existência foi estabelecida no exemplo anterior. Para garantir a unicidade, observe que $f'(x) = e^x - 1$ e, portanto, $f'(x) < 0$ para $x \in (-2,0)$. Logo a raiz é única.

Podemos inspecionar o comportamento da função $f(x)e^x - x - 2$ e de sua derivada fazendo seus gráficos no Scilab. Para tanto, podemos implementar o seguinte código:

```
-->x = linspace(-2,0,50);
-->//grafico de f(x)
-->deff('y = f(x)','y=exp(x)-x-2')
-->plot(x,f(x))
-->//graficando a f'(x)
-->deff('y = fl(x)','y=exp(x)-1')
-->plot(x,fl(x))
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exercícios

E 3.1.1. Mostre que a equação

$$\ln(x) + x^3 - \frac{1}{x} = 10$$

possui uma única solução positiva. Faça o gráfico e observe.

E 3.1.2. Use o teorema do valor intermediário para mostrar que o erro absoluto ao aproximar a raiz da função $f(x) = e^x - x - 2$ por $\overline{x} = -1{,}841$ é menor que 10^{-3}.

E 3.1.3. Aplique o teorema do valor intermediário a um intervalo adequado e mostre que o erro absoluto associado à aproximação 1,962 para a solução exata x^* de:

$$e^x + \sin(x) + x = 10$$

é inferior a 10^{-4}.

E 3.1.4. Mostre que a equação

$$\ln(x) + x - \frac{1}{x} = v$$

possui uma solução para cada v real e que esta solução é única.

3.2 Método da bisseção

Suponha que a função contínua $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ tal que $f(a) \cdot f(b) < 0$, ou seja, f possui uma raiz no intervalo. Suponha também que a raiz é única. Uma primeira aproximação para a raiz pode ser o ponto médio $p = \frac{a+b}{2}$. Se $f(p) \cdot f(a) < 0$, então a raiz está a esquerda de p, se não, a raiz está a direita de p (veja Fig. 3.2). Depois de escolher o intervalo correto, fazemos uma nova aproximação para a raiz tomando o ponto médio do novo intervalo.

Em outras palavras, seja $(a^{(0)},b^{(0)}) = (a,b)$ o intervalo inicial e $p^{(0)} = \frac{a^{(0)}+b^{(0)}}{2}$ a aproximação inicial. Se $f(p^{(0)}) \cdot f(a^{(0)}) < 0$, então $(a^{(1)},b^{(1)}) = (a^{(0)},p^{(0)})$, caso contrário, $(a^{(1)},b^{(1)}) = (p^{(0)},b^{(0)})$. A nova aproximação para a raiz é $p^{(1)} = \frac{a^{(1)}+b^{(1)}}{2}$. Esse procedimento produz uma sequência $p^{(n)}$ que converge para a raiz.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

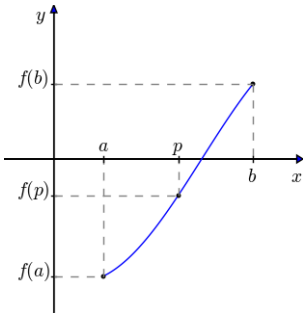


Figura 3.2: Método da bisseção.

Exemplo 39. Faça 5 iterações do método da bisseção para encontrar a raiz de $f(x) = x^3 + 5x^2 - 12$ utilizando $a^{(0)} = 1$ e $b^{(0)} = 2$.

n	$a^{(n)}$	$b^{(n)}$	$p^{(n)}$	$f(a^{(n)})$	$f(b^{(n)})$	$f(p^{(n)})$
0	$a^{(0)} = 1$	$b^{(0)} = 2$	$p^{(0)} = 1{,}5$	-6	16	2,625
1	$a^{(1)} = 1$	$b^{(1)} = p^1 = 1{,}5$	$p^{(1)} = 1{,}25$	-6	2,625	$-2{,}234375$
2	$a^{(2)} = 1{,}25$	$b^{(2)} = 1{,}5$	$p^{(2)} = 1{,}375$			
3						
4						
5						

No console do Scilab, temos:

```
-->deff('y=f(x)','y = x^3 + 5*x^2 - 12')
-->//iteracao 0
-->a=1; b=2; p=(a+b)/2;
-->[a,b,p,f(a),f(b),f(p)]
 ans  =
    1.    2.    1.5  - 6.    16.    2.625
-->//iteracao 1
-->b = p; p = (a+b)/2;
-->[a,b,p,f(a),f(b),f(p)]
 ans  =
    1.    1.5    1.25  - 6.    2.625  - 2.234375
```

Observe que a distância entre $p^{(0)}$ e a raiz p^* não pode exceder metade do intervalo, ou seja $|p^{(0)} - p^*| \leq \frac{b-a}{2}$. Da mesma forma, o erro absoluto entre

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

$p^{(1)}$ e p^* é menor que $\frac{1}{4}$ do intervalo, isto é, $|p^{(1)} - p^*| \leq \frac{b-a}{2^2}$. De modo geral, o erro absoluto na iteração n é estimado por

$$|p^{(n)} - p^*| \leq \frac{b-a}{2^{n+1}}, \qquad n \geq 1.$$

Também, se $\epsilon_n := |p^{(n)} - p^*|$, então vale:

$$\epsilon_{n+1} \leq \frac{1}{2}(\epsilon_n)^1$$

e, por isso, dizemos que o método da bisseção possui taxa de convergência linear. Um método com taxa de convergência super-linear satisfaz

$$\epsilon_{n+1} \leq C(\epsilon_n)^m,$$

onde $m > 1$ e C é uma constante.

Exemplo 40. Determine quantas iterações são necessárias para encontrar a raiz de $f(x) = x^3 + 5x^2 - 12$ com uma precisão de 10^{-3}, utilizando $a^{(0)} = 1$ e $b^{(0)} = 2$.

Observe que precisamos da seguinte desigualdade

$$|p^{(n)} - p^*| \leq \frac{b-a}{2^{n+1}} = \frac{1}{2^{n+1}} \leq 10^{-3}.$$

Assim,

$$\log_2 2^{-(n+1)} \leq \log_2 10^{-3}$$

ou seja,

$$-(n+1)\log_2 2 \leq -3\log_2(10) \Rightarrow n+1 \geq 3\log_2(10) \approx 9{,}97 \Rightarrow n \approx 8{,}97$$

Portanto, $n \geq 9$.

3.2.1 Código Scilab: método da bisseção

O seguinte código é uma implementação no Scilab do algoritmo da bisseção. As variáveis de entrada são:

- `f` - função objetivo
- `a` - extremo esquerdo do intervalo de inspeção $[a, b]$
- `b` - extremo direito do intervalo de inspeção $[a, b]$
- `TOL` - tolerância (critério de parada)

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

- `N` - número máximo de iterações

A variável de saída é:

- `p` - aproximação da raiz de `f`, i.e. $f(p) \approx 0$.

```
function [p] = bissecao(f, a, b, TOL, N)
  i = 1
  fa = f(a)
  while (i <= N)
    //iteracao da bissecao
    p = a + (b-a)/2
    fp = f(p)
    //condicao de parada
    if ((fp == 0) | ((b-a)/2 < TOL)) then
      return p
    end
    //bissecta o intervalo
    i = i+1
    if (fa * fp > 0) then
      a = p
      fa = fp
    else
      b = p
    end
  end
  error ('Num. max. de iter. excedido!')
endfunction
```

Exercícios

E 3.2.1. Mostre que a equação do problema 3.1.4 possui uma solução no intervalo $[1, v+1]$ para todo v positivo. Dica: defina $f(x) = \ln(x) + x - \frac{1}{x} - v$ e considere a seguinte estimativa:

$$f(v+1) = f(1) + \int_1^{v+1} f'(x)dx \geq -v + \int_1^{v+1} dx = 0.$$

Use esta estimativa para iniciar o método de bisseção e obtenha o valor da raiz com pelo menos 6 algarismos significativos para $v = 1, 2, 3, 4$ e 5.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 3.2.2. Trace o gráfico e isole as três primeiras raízes positivas da função:

$$f(x) = 5\sin(x^2) - \exp\left(\frac{x}{10}\right)$$

em intervalos de comprimento 0,1.

E 3.2.3. Utilize o método da bisseção na equação $\sqrt{x} = \cos(x)$ para encontrar $p^{(4)}$ em $[a,b] = [0, 1]$.

E 3.2.4. Considere o seguinte problema físico: uma plataforma está fixa a uma parede através de uma dobradiça cujo momento é dado por:

$$\tau = k\theta,$$

onde θ é angulo da plataforma com a horizontal e k é uma constante positiva. A plataforma é feita de material homogêneo, seu peso é P e sua largura é l. Modele a relação entre o ângulo θ e o peso P próprio da plataforma. Encontre o valor de θ quando $l = 1$ m, $P = 200$ N, $k = 50$ Nm/rad, sabendo que o sistema está em equilíbrio. Use o método da bisseção e expresse o resultado com 4 algarismos significativos.

E 3.2.5. Interprete a equação $\cos(x) = kx$ como o problema de encontrar a intersecção da curva $y = \cos(x)$ com $y = kx$. Encontre o valor positivo k para o qual essa equação admite exatamente duas raízes positivas distintas.

E 3.2.6. Considere a equação de Lambert dada por:

$$xe^x = t,$$

onde t é um número real positivo. Mostre que esta equação possui uma única solução x^* que pertence ao intervalo $[0, t]$. Usando esta estimativa como intervalo inicial, quantos passos são necessário para obter o valor numérico de x^* com erro absoluto inferior a 10^{-6} quando $t = 1$, $t = 10$ e $t = 100$ através do método da bisseção? Obtenha esses valores.

E 3.2.7. O polinômio $f(x) = x^4 - 4x^2 + 4$ possui raízes duplas em $\sqrt{2}$ e $-\sqrt{2}$. O método da bisseção pode ser aplicados a f? Explique.

E 3.2.8. O desenho abaixo mostra um circuito não linear envolvendo uma fonte de tensão constante, um diodo retificador e um resistor. Sabendo que a relação entre a corrente (I_d) e a tensão (v_d) no diodo é dada pela seguinte expressão:

$$I_d = I_R\left(\exp\left(\frac{v_d}{v_t}\right) - 1\right),$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

onde I_R é a corrente de condução reversa e v_t, a tensão térmica dada por $v_t = \frac{kT}{q}$ com k, a constante de Boltzmann, T a temperatura de operação e q, a carga do elétron. Aqui $I_R = 1pA = 10^{-12}$ A, $T = 300$ K. Escreva o problema como uma equação na incógnita v_d e, usando o método da bisseção, resolva este problema com 3 algarismos significativos para os seguintes casos:

a) $V = 30$ V e $R = 1$ kΩ.

b) $V = 3$ V e $R = 1$ kΩ.

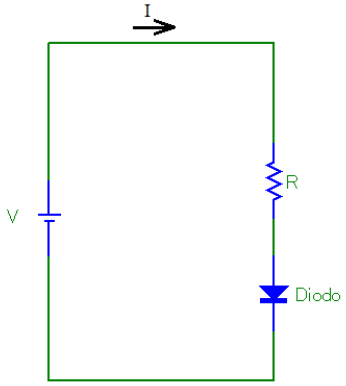
c) $V = 3$ V e $R = 10$ kΩ.

d) $V = 300$ mV e $R = 1$ kΩ.

e) $V = -300$ mV e $R = 1$ kΩ.

f) $V = -30$ V e $R = 1$ kΩ.

g) $V = -30$ V e $R = 10$ kΩ.



Dica: $V = RI_d + v_d$.

3.3 Iteração de Ponto Fixo

3.3.1 Exemplo Histórico

Vamos analisar o método babilônico para extração da raiz quadrada de um número positivo A usando operações de soma, subtração, divisão e multiplicação.

Seja $x > 0$ uma aproximação para $\sqrt{A}$, temos três caso:

- $x > \sqrt{A} \Longrightarrow \frac{A}{x} < \sqrt{A} \Longrightarrow \sqrt{A} \in \left(\frac{A}{x}, x\right)$
- $x = \sqrt{A} \Longrightarrow \frac{A}{x} = \sqrt{A}$
- $x < \sqrt{A} \Longrightarrow \frac{A}{x} > \sqrt{A} \Longrightarrow \sqrt{A} \in \left(x, \frac{A}{x}\right)$

É natural imaginar que uma melhor aproximação para $\sqrt{A}$ é dada por

$$y = \frac{x + \frac{A}{x}}{2}$$

Aplicando esse método repetidas vezes, construímos a seguinte iteração:

$$\begin{aligned} x^{(n+1)} &= \frac{x^{(n)}}{2} + \frac{A}{2x^{(n)}} \\ x^{(0)} &= x \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 41. A=5, x=2

$$\begin{aligned} x^{(n+1)} &= \frac{x^{(n)}}{2} + \frac{2{,}5}{x^{(n)}} \\ x^{(0)} &= 2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x^{(0)} &= 2 \\ x^{(1)} &= \frac{2}{2} + \frac{2{,}5}{2} = 1 + 1{,}25 = 2{,}25 \\ x^{(2)} &= \frac{2{,}25}{2} + \frac{2{,}5}{2{,}25} = 2{,}2361111 \\ x^{(3)} &= \frac{2{,}2361111}{2} + \frac{2{,}5}{2{,}2361111} = 2{,}236068 \\ x^{(4)} &= \frac{2{,}236068}{2} + \frac{2{,}5}{2{,}236068} = 2{,}236068 \end{aligned}$$

Exemplo 42. A=10, x=1

$$\begin{aligned} x^{(n+1)} &= \frac{x^{(n)}}{2} + \frac{5}{x^{(n)}} \\ x^{(0)} &= 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x^{(0)} &= 1 \\ x^{(1)} &= \frac{1}{2} + \frac{5}{1} = 0{,}5 + 5 = 5{,}5 \\ x^{(2)} &= \frac{5{,}5}{2} + \frac{5}{5{,}5} = 3{,}6590909 \\ x^{(3)} &= \frac{3{,}6590909}{2} + \frac{5}{3{,}6590909} = 3{,}1960051 \\ x^{(4)} &= \frac{3{,}1960051}{2} + \frac{5}{3{,}1960051} = 3{,}1624556 \\ x^{(5)} &= \frac{3{,}1624556}{2} + \frac{5}{3{,}1624556} = 3{,}1622777 \\ x^{(6)} &= \frac{3{,}1622777}{2} + \frac{5}{3{,}1622777} = 3{,}1622777 \end{aligned}$$

A experimentação numérica sugere que o método funciona, mas três perguntas devem ser respondidas:

1. Será que a sequência é convergente?

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

2. Caso seja convergente, será que o limite $x^* = \lim_{n\to\infty} x_n$ é igual a $\sqrt{A}$?

3. Caso seja convergente, quão rápida é a convergência?

A segunda pergunta é a mais fácil de ser respondida:
Supondo que o limite de x_n exista, basta substituir na iteração:

$$\begin{aligned}
\lim_{n\to\infty} x^{(n+1)} &= \lim_{n\to\infty} \frac{x^{(n)}}{2} + \lim_{n\to\infty} \frac{A}{2x^{(n)}} \\
x^* &= \frac{x^*}{2} + \frac{A}{2x^*} \\
\frac{x^*}{2} &= \frac{A}{2x^*} \\
x^* &= \frac{A}{x^*} \\
(x^*)^2 &= A \\
x^* &= \sqrt{A}
\end{aligned}$$

Portanto, sempre que esse método converge, temos a garantia de que o limite é $\sqrt{A}$. (Independente do valor inicial!)

De fato, podemos provar que o método é convergente para qualquer valor inicial positivo x. E, ainda, que a convergência é rápida (ainda precisamos definir isso).

Para responder essas perguntas, devemos formalizar o conceito de ponto fixo. Antes disso, analisemos mais um exemplo:

3.3.2 Outro Exemplo

Suponha que queiramos resolver a equação:

$$xe^x = 10.$$

Observamos que o este problema é equivalente a resolver:

$$x = \ln\left(\frac{10}{x}\right)$$

ou:

$$x = 10e^{-x}$$

Para tanto, vamos propor os seguintes processos iterativos:

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

$$a) \begin{cases} x^{(n+1)} = \ln\left(\frac{10}{x^{(n)}}\right), \ n \geq 0 \\ x^{(0)} = 1 \end{cases}$$

e

$$b) \begin{cases} x^{(n+1)} = 10e^{-x^{(n)}}, \ n \geq 0 \\ x^{(0)} = 1 \end{cases}$$

O processo a) produz a seguinte sequência:

$$\begin{aligned} x^{(0)} &= 1 \\ x^{(1)} &= \ln(10) = 2{,}3025851 \\ x^{(2)} &= \ln\left(\frac{10}{2{,}3025851}\right) = 1{,}4685526 \\ x^{(3)} &= \ln\left(\frac{10}{1{,}4685526}\right) = 1{,}9183078 \\ x^{(4)} &= \ln\left(\frac{10}{1{,}9183078}\right) = 1{,}6511417 \\ &\vdots \\ x^{(10)} &= 1{,}7421335 \\ x^{(20)} &= 1{,}7455151 \\ x^{(30)} &= 1{,}745528 \\ x^{(31)} &= 1{,}745528 \end{aligned}$$

O processo b) produz a seguinte sequência:

$$\begin{aligned} x^{(0)} &= 1 \\ x^{(1)} &= 10e^{-1} = 3{,}6787944 \\ x^{(2)} &= 10e^{-3{,}6787944} = 0{,}2525340 \\ x^{(3)} &= 10e^{-0{,}2525340} = 7{,}7682979 \\ x^{(4)} &= 10e^{-7{,}7682979} = 0{,}0042293 \\ x^{(5)} &= 10e^{-0{,}0042293} = 9{,}9577961 \end{aligned}$$

O experimento numérico sugere que o processo a não é convergente e que o processo b converge para 1,745528.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

3.3.3 Ponto fixo

Seja $\phi(x)$ uma função, dizemos que $x^* \in D(f)$ é um ponto fixo de ϕ se

$$\phi(x^*) = x^*$$

Seja $\phi : [a,b] \to [a,b]$ um função real tal que

$$|\phi(x) - \phi(y)| \leq \beta|x - y|, \quad \beta < 1.$$

Então ϕ é dita uma contração e existe um único ponto $x^* \in [a,b]$ tal que $\phi(x^*) = x^*$. Além disso, a sequência

$$x^{(n+1)} = \phi(x^{(n)})$$

é convergente sempre que $x_0 \in [a,b]$ e vale o limite

$$\lim_{n\to\infty} x^{(n)} = x^*.$$

Observação 8. A desigualdade $|\phi(x) - \phi(y)| \leq \beta|x - y|$ implica que $\phi(x)$ é contínua.

Começamos demonstrando que existe pelo menos um ponto fixo. Para tal definimos a função $f(x) = x - \phi(x)$ e observamos que

$$f(a) = a - \phi(a) \leq a - a = 0$$

e

$$f(b) = b - \phi(b) \geq b - b = 0$$

Se $f(a) = a$ ou $f(b) = b$, então o ponto fixo existe. Caso contrário, as desigualdade são estritas e a função muda de sinal no intervalo. Como a função é contínua, pelo teorema do valor intermediário, existe um ponto x^* no intervalo (a,b) tal que $f(x^*) = 0$, ou seja, $x^* - \phi(x^*) = 0$. Observe que x^* é um ponto fixo de ϕ, pois $\phi(x^*) = x^*$.

Para provar que o ponto fixo é único, observamos que se x^* e x^{**} são pontos fixos, eles devem ser iguais, pois:

$$|x^* - x^{**}| = |\phi(x^*) - \phi(x^{**})| \leq \beta|x^* - x^{**}|$$

A desigualdade $|x^* - x^{**}| \leq \beta|x^* - x^{**}|$ com $\beta < 1$ implica $|x^* - x^{**}| = 0$.

Para demonstrar a convergência da sequência, observamos a seguinte relação

$$|x^{(n+1)} - x^*| = |\phi(x^{(n)}) - x^*| = |\phi(x^{(n)}) - \phi(x^*)| \leq \beta|x^{(n)} - x^*|.$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Agora observamos que

$$|x^{(n)} - x^*| \leq \beta|x^{(n-1)} - x^*| \leq \beta^2|x^{(n-2)} - x^*| \leq \cdots \leq \beta^n|x^{(0)} - x^*|.$$

Portanto

$$\lim_{n\to\infty} |x^{(n)} - x^*| = 0$$

e

$$\lim_{n\to\infty} x^{(n)} = x^*$$

Observações:

- A condição $|\phi(x) - \phi(y)| \leq \beta|x - y|$ é satisfeita sempre que $|\phi'(x)| \leq \beta < 1$ em todo o intervalo pois

$$|\phi(x)-\phi(y)| = \left|\int_x^y \phi'(s)ds\right| \leq \int_x^y |\phi'(s)|ds \leq \int_x^y \beta ds = \beta|x-y|,\ x < y.$$

- A desigualdade estrita $\beta < 1$ é necessária.
- A condição $f([a,b]) \subseteq [a,b]$ é necessária.

3.3.4 Teste de convergência

Seja $\phi : [a,b]$ uma função $C^0[a,b]$ e $x^* \in (a,b)$ um ponto fixo de ϕ. Então x^* é dito estável se existe uma região $(x^*-\delta,x^*+\delta)$ chamada bacia de atração tal que $x^{(n+1)} = \phi(x^{(n)})$ é convergente sempre que $x^{(0)} \in (x^* - \delta,x^* + \delta)$.

Teorema: Se $\phi \in C^1[a,b]$ e $|\phi'(x^*)| < 1$, então x^* é estável. Se $|\phi'(x^*)| > 1$ é instável e o teste é inconclusivo se $|\phi'(x^*)| = 1$.

Exemplo 43. Considere o problema de encontrar a solução da equação algébrica

$$\cos(x) = x$$

vendo-a como o ponto fixo da função

$$f(x) = \cos(x).$$

Mostraremos que o teorema do ponto fixo se aplica a esta função com $[a,b] = [1/2,1]$.

Precisamos provar:

1. $f([1/2,1]) \subseteq [1/2,1]$;
2. $|f'(x)| < \beta, \quad \beta < 1, \quad \forall x \in [1/2,1]$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Para provar o item 1, observamos que $f(x)$ é decrescente no intervalo, pelo que temos:

$$0{,}54 < \cos(1) \leq \cos(x) \leq \cos(1/2) < 0{,}88$$

Como [0,54, 0,88] $\subseteq$ [0,5, 1], temos o item a.

Para provar o item 2, observamos que

$$f'(x) = -\sin(x)$$

Da mesma forma, temos a estimativa:

$$-0{,}85 < -\sin(1) \leq -\sin(x) \leq -\sin(1/2) < -0{,}47$$

Assim, $|f'(x)| < 0{,}85$ temos a desigualdade com $\beta = 0{,}85 < 1$.

Agora, observamos o comportamento numérico da sequência:

$$\begin{cases} x^{(n+1)} = \cos(x^{(n)}), \ \ n \geq 0 \\ x^{(0)} = 1 \end{cases}$$

Os primeiros termos podem ser calculados numericamente e são dados por:

$$\begin{aligned}
x^{(1)} &= \cos(x_0) = \cos(1) = 0{,}5403023 \\
x^{(2)} &= \cos(x_1) = \cos(0{,}5403023) = 0{,}8575532 \\
x^{(3)} &= \cos(x_2) = \cos(0{,}8575532) = 0{,}6542898 \\
x^{(4)} &= \cos(x_3) = \cos(0{,}6542898) = 0{,}7934804 \\
x^{(5)} &= \cos(x_4) = \cos(0{,}7934804) = 0{,}7013688 \\
x^{(6)} &= \cos(x_5) = \cos(0{,}7013688) = 0{,}7639597 \\
x^{(7)} &= \cos(x_6) = \cos(0{,}7639597) = 0{,}7221024 \\
x^{(8)} &= \cos(x_7) = \cos(0{,}7221024) = 0{,}7504178 \\
x^{(9)} &= \cos(x_8) = \cos(0{,}7504178) = 0{,}7314040 \\
x^{(10)} &= \cos(x_9) = \cos(0{,}7314040) = 0{,}7442374 \\
x^{(11)} &= \cos(x_{10}) = \cos(0{,}7442374) = 0{,}7356047 \\
x^{(12)} &= \cos(x_{11}) = \cos(0{,}7356047) = 0{,}7414251 \\
x^{(13)} &= \cos(x_{12}) = \cos(0{,}7414251) = 0{,}7375069 \\
&\vdots \\
x^{(41)} &= \cos(x_{40}) = \cos(0{,}7390852) = 0{,}7390851 \\
x^{(42)} &= \cos(x_{41}) = \cos(0{,}7390851) = 0{,}7390851 \\
x^{(43)} &= \cos(x_{42}) = \cos(0{,}7390851) = 0{,}7390851
\end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

3.3.5 Estabilidade e convergência

A fim de compreendermos melhor os conceitos de estabilidade e convergência, considere uma função $\Phi(x)$ com um ponto fixo $x^* = \phi(x^*)$ e analisemos o seguinte processo iterativo:

$$\begin{aligned} x^{(n+1)} &= \phi\left(x^{(n)}\right) \\ x^{(0)} &= x \end{aligned}$$

Vamos supor que a função $\phi(x)$ pode ser aproximada por seu polinômio de Taylor em torno do ponto fixo:

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \phi(x^*) + (x - x^*)\phi'(x^*) + O\left((x - x^*)^2\right), n \geq 0 \\ &= x^* + (x - x^*)\phi'(x^*) + O\left((x - x^*)^2\right) \\ &\approx x^* + (x - x^*)\phi'(x^*) \end{aligned}$$

Substituindo na relação de recorrência, temos

$$x^{(n+1)} = \phi\left(x^{(n)}\right) \approx x^* + (x^{(n)} - x^*)\phi'(x^*)$$

Ou seja:

$$\left(x^{(n+1)} - x^*\right) \approx (x^{(n)} - x^*)\phi'(x^*)$$

Tomando módulos, temos:

$$\underbrace{\left|x^{(n+1)} - x^*\right|}_{\epsilon_{n+1}} \approx \underbrace{\left|x^{(n)} - x^*\right|}_{\epsilon_n} \left|\phi'(x^*)\right|,$$

onde $\epsilon_n = \left|x^{(n)} - x^*\right|$.

Conclusões:

- Se $|\phi'(x^*)| < 1$, então, a distância de $x^{(n)}$ até o ponto fixo x^* está diminuindo a cada passo.
- Se $|\phi'(x^*)| > 1$, então, a distância de $x^{(n)}$ até o ponto fixo x^* está aumentando a cada passo.
- Se $|\phi'(x^*)| = 1$, então, nossa aproximação de primeiro ordem não é suficiente para compreender o comportamento da sequência.

Fixaremos, portanto, nos casos quando $|\phi'(x^*)| < 1$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

3.3.6 Erro absoluto e tolerância

Na prática, quando se aplica uma iteração como esta, não se conhece de antemão o valor do ponto fixo x^*. Assim, o erro $\epsilon_n = \left|x^{(n)} - x^*\right|$ precisa ser estimado com base nos valores calculados $x^{(n)}$. Uma abordagem frequente é analisar a evolução da diferença entre dois elementos da sequência:

$$\Delta_n = \left|x^{(n+1)} - x^{(n)}\right|$$

A pergunta natural é: Será que o erro $\epsilon_n = \left|x^{(n)} - x^*\right|$ é pequeno quando $\Delta_n = \left|x^{(n+1)} - x^{(n)}\right|$ for pequeno?

Para responder a esta pergunta, observamos que

$$x^* = \lim_{n\to\infty} x^{(n)}$$

portanto:

$$\begin{aligned} x^* - x^{(N)} &= \left(x^{(N+1)} - x^{(N)}\right) + \left(x^{(N+2)} - x^{(N+1)}\right) + \left(x^{(N+3)} - x^{(N+2)}\right) + \dots \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \left(x^{(N+k+1)} - x^{(N+k)}\right) \end{aligned}$$

Usamos também as expressões:

$$\begin{aligned} x^{(n+1)} &\approx x^* + (x^{(n)} - x^*)\phi'(x^*) \\ x^{(n)} &\approx x^* + (x^{(n-1)} - x^*)\phi'(x^*) \end{aligned}$$

Subtraindo uma da outra, temos:

$$x^{(n+1)} - x^{(n)} \approx (x^{(n)} - x^{(n-1)})\phi'(x^*)$$

Portanto:

$$x^{(N+k+1)} - x^{(N+k)} \approx \left(x^{(N+1)} - x^{(N)}\right)\left(\phi'(x^*)\right)^k$$

E temos:

$$\begin{aligned} x^* - x^{(N)} &= \sum_{k=0}^{\infty} \left(x^{(N+k+1)} - x^{(N+k)}\right) \\ &\approx \sum_{k=0}^{\infty} \left(x^{(N+1)} - x^{(N)}\right)\left(\phi'(x^*)\right)^k \\ &= (x^{(N+1)} - x^{(N)})\frac{1}{1-\phi'(x^*)}, |\phi'(x^*)| < 1 \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Tomando módulo, temos:

$$\begin{aligned} \left|x^* - x^{(N)}\right| &\approx \left|x^{(N+1)} - x^{(N)}\right| \frac{1}{1-\phi'(x^*)} \\ \epsilon_N &\approx \frac{\Delta_N}{1-\phi'(x^*)} \end{aligned}$$

Conclusões: Tendo em mente a relação $x^{(n+1)} - x^{(n)} \approx (x^{(n)} - x^{(n-1)})\phi'(x^*)$, concluímos:

- Quando $\phi'(x^*) < 0$, o esquema é alternante e o erro ϵ_N pode ser estimado diretamente da diferença Δ_N.
- Quando $\phi'(x^*) > 0$, o esquema é monótono e $\frac{1}{1-\phi'(x^*)} > 1$, pelo que o erro ϵ_N é maior que a diferença Δ_N. A relação será tão mais importante quando mais próximo da unidade for $\phi'(x^*)$, ou seja, quando mais lenta for a convergência.
- Como $\phi'(x^*) \approx \frac{x^{(n+1)} - x^{(n)}}{x^{(n)} - x^{(n-1)}}$, temos

  $$|\phi'(x^*)| \approx \frac{\Delta_n}{\Delta_{n-1}}$$

  e portanto

  $$\epsilon_N \approx \frac{\Delta_N}{1 - \frac{\Delta_n}{\Delta_{n-1}}}.$$

Observação 9. Deve-se exigir que $\Delta_n < \Delta_{n-1}$

Exercícios

E 3.3.1. Mostre que a equação:

$$\cos(x) = x$$

possui uma única solução no intervalo $[0, 1]$. Encontre uma aproximação para esta solução com 4 dígitos significativos.

E 3.3.2. Verifique (analiticamente) que a única solução real da equação:

$$xe^x = 10$$

é ponto fixo das seguintes funções:

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

a) $\phi(x) = \ln\left(\frac{10}{x}\right)$

b) $\phi(x) = x - \frac{xe^x - 10}{15}$

c) $\phi(x) = x - \frac{xe^x - 10}{10 + e^x}$

Implemente o processo iterativo $x^{(n+1)} = \phi(x^{(n)})$ para $n \geq 0$ e compare o comportamento. Discuta os resultados com base na teoria estudada.

E 3.3.3. Verifique (analiticamente) que a única solução real da equação:

$$\cos(x) = x$$

é ponto fixo das seguintes funções:

a) $\phi(x) = \cos(x)$

b) $\phi(x) = 0{,}4x + 0{,}6\cos(x)$

c) $\phi(x) = x + \frac{\cos(x) - x}{1 + \sin(x)}$

Implemente o processo iterativo $x^{(n+1)} = \phi(x^{(n)})$ para $n \geq 0$ e compare o comportamento.Discuta os resultados com base na teoria estudada.

E 3.3.4. Encontre a solução de cada equação com erro absoluto inferior a 10^{-6}.

a) $e^x = x + 2$ no intervalo $(-2{,}0)$.

b) $x^3 + 5x^2 - 12 = 0$ no intervalo $(1{,}2)$.

c) $\sqrt{x} = \cos(x)$ no intervalo $(0{,}1)$.

E 3.3.5. Encontre numericamente as três primeiras raízes positivas da equação dada por:

$$\cos(x) = \frac{x}{10 + x^2}$$

com erro absoluto inferior a 10^{-6}.

E 3.3.6. Calcule uma equação da reta tangente a curva $y = e^{-(x-1)^2}$ que passa pelo ponto $(3, 1/2)$.

E 3.3.7. Resolva numericamente a inequação:

$$e^{-x^2} < 2x$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 3.3.8. Considere os seguintes processos iterativos:

$$a\begin{cases} x^{(n+1)} &= \cos(x^{(n)}) \\ x^{(1)} &= .5 \end{cases} \qquad \text{e} \qquad b\begin{cases} x^{(n+1)} &= .4x^{(n)} + .6\cos(x^{(n)}) \\ x^{(1)} &= .5 \end{cases} \tag{3.1}$$

Use o teorema do ponto fixo para verificar que cada um desses processos converge para a solução da equação x^* de $\cos(x) = x$. Observe o comportamento numérico dessas sequências. Qual estabiliza mais rápido com cinco casas decimais? Discuta.

Dica: Verifique que $\cos([0.5,1]) \subseteq [0.5,1]$ e depois a mesma identidade para a função $f(x) = .4x + .6\cos(x)$.

E 3.3.9. Use o teorema do ponto fixo aplicado a um intervalo adequado para mostrar que a função $\phi(x) = \ln(100 - x)$ possui um ponto fixo estável.

E 3.3.10. Na hidráulica, o fator de atrito de Darcy é dado pela implicitamente pela equação de Colebrook-White:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2\log_{10}\left(\frac{\varepsilon}{14.8R_{\text{h}}} + \frac{2.51}{\text{Re}\sqrt{f}}\right)$$

onde f é o fator de atrito, ε é a rugosidade do tubo em metros, R_{h} é o raio hidráulico em metros e Re é o número de Reynolds. Considere $\varepsilon = 2mm$, $R_{\text{h}} = 5cm$ e $\text{Re} = 10000$ e obtenha o valor de f pela iteração:

$$x^{(n+1)} = -2\log_{10}\left(\frac{\varepsilon}{14.8R_{\text{h}}} + \frac{2.51x^{(n)}}{\text{Re}}\right)$$

E 3.3.11. Encontre uma solução aproximada para equação algébrica

$$180 - 100x = 0.052\sinh^{-1}(10^{13}x)$$

com erro absoluto inferior a 10^{-3} usando um método iterativo. Estime o erro associado ao valor de $v = 180 - 100x = 0.052\sinh^{-1}(10^{13}x)$, usando cada uma dessas expressões. Discuta sucintamente o resultado obtido. Dica: Este caso é semelhante ao problema 3.2.8.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 3.3.12. Considere que x_n satisfaz a seguinte relação de recorrência:

$$x_{n+1} = x_n - \beta\,(x_n - x^*)$$

onde β e x^* são constantes. Prove que

$$x_n - x^* = (1-\beta)^{n-1}(x_1 - x^*).$$

Conclua que $x_n \to x^*$ quando $|1-\beta| < 1$.

E 3.3.13. Considere o seguinte esquema iterativo:

$$\begin{cases} x^{(n+1)} = x_n + q^n \\ x^{(0)} = 0 \end{cases}$$

onde $q = 1 - 10^{-6}$.

a) Calcule o limite

$$x_\infty = \lim_{n\to\infty} x^{(n)}$$

analiticamente.

b) Considere que o problema de obter o limite da sequência numericamente usando como critério de parada que $|x^{(n+1)} - x^{(n)}| < 10^{-5}$. Qual o valor é produzido pelo esquema numérico? Qual o desvio entre o valor obtido pelo esquema numérico e o valor do limite obtido no item a? Discuta. (Dica: Você não deve implementar o esquema iterativo, obtendo o valor de $x^{(n)}$ analiticamente)

c) Qual deve ser a tolerência especificada para obter o resultado com erro relativo inferior a 10^{-2}?

E 3.3.14. Considere o seguinte esquema iterativo:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - [x^{(n)}]^3,\ x^{(n)} \geq 0$$

com $x^{(0)} = 10^{-2}$. Prove que $\{x^{(n)}\}$ é sequência de número reais positivos convergindo para zero. Verifique que são necessários mais de mil passos para que $x^{(n)}$ se torne menor que $0.9x^{(0)}$.

E 3.3.15.

a) Use o teorema do ponto fixo para mostrar que a função $\phi(x) = 1 - \sin(x)$ possui um único ponto fixo estável o intervalo $[\frac{1}{10},1]$. Construa um método iterativo $x^{(n+1)} = \phi(x^{(n)})$ para encontrar esse ponto fixo. Use o Scilab para encontrar o valor numérico do ponto fixo.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

b) Verifique que função $\psi(x) = \frac{1}{2}\left[x + 1 - \sin(x)\right]$ possui um ponto fixo x^* que também é o ponto fixo da função ϕ do item a. Use o Scilab para encontrar o valor numérico do ponto fixo através da iteração $x^{(n+1)} = \psi(x^{(n)})$. Qual método é mais rápido?

E 3.3.16. *(Esquemas oscilantes)*

a) Considere a função $\phi(x)$ e função composta $\psi(x) = \phi \circ \phi = \phi\left(\phi(x)\right)$. Verifique todo ponto fixo de ϕ também é ponto fixo de ψ.

b) Considere a função

$$\phi(x) = 10\exp(-x)$$

e função composta $\psi(x) = \phi \circ \phi = \phi\left(\phi(x)\right)$. Mostre que ψ possui dois pontos fixos que não são pontos fixos de ϕ.

c) No problema anterior, o que acontece quando o processo iterativo $x^{(n+1)} = \phi(x^{(n)})$ é inicializado com um ponto fixo de ψ que não é ponto fixo de ϕ?

E 3.3.17. Mostre que se $f(x)$ possui uma raiz x^* então a x^* é um ponto fixo de $\phi(x) = x + \gamma(x)f(x)$. Encontre uma condição em $\gamma(x)$ para que o ponto fixo x^* de ϕ seja estável. Encontre uma condição em $\gamma(x)$ para que $\phi'(x^*) = 0$.

E 3.3.18. Considere que $x^{(n)}$ satisfaz a seguinte relação de recorrência:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \gamma f(x^{(n)})$$

onde γ é uma constante. Suponha que $f(x)$ possui um zero em x^*. Aproxime a função $f(x)$ em torno de x^* por

$$f(x) = f(x^*) + f'(x^*)(x - x^*) + O\left((x - x^*)^2\right).$$

Em vista do problema anterior, qual valor de γ você escolheria para que a sequência $x^{(n)}$ convirja rapidamente para x^*. Que relação você encontra com o método de Newton?

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 3.3.19. Considere o problema da questão 3.2.8 e dois seguintes esquemas iterativos.

$$A\begin{cases} I^{(n+1)} = \frac{1}{R}\left[V - v_t \ln\left(1 + \frac{I^{(n)}}{I_R}\right)\right], n > 0 \\ I^{(0)} = 0 \end{cases}$$

e

$$B\begin{cases} I^{(n+1)} = I_R\left[\exp\left(\frac{V - RI^{(n)}}{v_t}\right) - 1\right], n > 0 \\ I^{(0)} = 0 \end{cases}$$

Verifique numericamente que apenas o processo A é convergente para a, b e c; enquanto apenas o processo B é convergente para os outros itens.

3.4 Método de Newton-Raphson

Consideramos o problema de encontrar as raízes da equação

$$f(x) = 0$$

onde $f(x) \in C^1$ através do método do ponto fixo. Para tal, observamos que um número real x^* é raiz de $f(x)$ se e somente se x^* é um ponto fixo da função

$$\phi(x) = x + \gamma(x)f(x), \quad \gamma(x) \neq 0$$

Aqui $\gamma(x)$ é uma função que será escolhida com base nos critérios de convergência do processo iterativo.

A derivada de $\phi(x)$ vale

$$\phi'(x) = 1 + \gamma(x)f'(x) + \gamma'(x)f(x)$$

no ponto x^*, temos

$$\phi'(x^*) = 1 + \gamma(x^*)f'(x^*) + \gamma'(x^*)f(x^*)$$

como $f(x^*) = 0$, temos

$$\phi'(x^*) = 1 + \gamma(x^*)f'(x^*)$$

Sabemos que o processo iterativo converge tão mais rápido quanto menor for $\phi'(x)$ nas vizinhanças de x^*, portanto, supomos que $f'(x^*) \neq 0$ e escolhemos $\gamma(x^*)$ de forma que

$$\phi'(x^*) = 0,$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

ou seja

$$\gamma(x^*) = -\frac{1}{f'(x^*)}.$$

Observe que x^* é raiz de $f(x)$ se, e somente se x^* é ponto fixo de

$$\phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

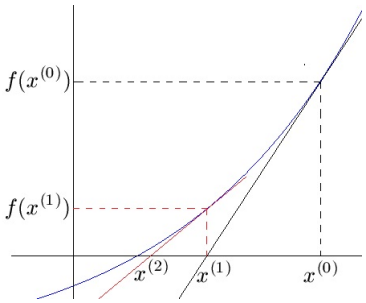
e $\phi'(x^*) = 0 < 1$. Portanto, o teorema do ponto fixo garante que se $x^{(0)}$ for suficientemente próximo a x^*, então o processo iterativo dado por

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{f(x^{(n)})}{f'(x^{(n)})}$$

converge para x^*, desde que $f'(x^{(n)}) \neq 0$ para todo $n \in \mathbb{N}$.

3.4.1 Interpretação Geométrica

Considere o problema de calcular a raiz uma função f, conforme esboço na figura abaixo



Queremos calcular $x^{(1)}$ em função de $x^{(0)}$ sabendo que é o corte da reta tangente em $x^{(0)}$ com o eixo x. A equação da reta que passa por $(x^{(0)}, f(x^{(0)})$ e é tangente a curva em $x^{(0)}$ tem inclinação $m = f'(x^{(0)})$ e sua equação é

$$y - f(x^{(0)}) = f'(x^{(0)})(x - x^{(0)}).$$

Sabendo que essa reta passa por ($x^{(1)}$,0), temos:

$$0 - f(x^{(0)}) = f'(x^{(0)})(x^{(1)} - x^{(0)}).$$

Portanto,

$$x^{(1)} = x^{(0)} - \frac{f(x^{(0)})}{f'(x^{(0)})}$$

que é uma iteração do método de Newton. Repetimos o processo para calcular $x^{(2)}$, $x^{(3)}$,.... De modo geral, temos:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{f(x^{(n)})}{f'(x^{(n)})}.$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

3.4.2 Análise de convergência

Seja $f(x)$ um função com derivada e derivada segunda contínuas tal que $f(x^*) = 0$ e $f'(x^*) \neq 0$. Seja também a função $\phi(x)$ definida como

$$\phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

Expandimos em série de Taylor em torno de x^* e obtermos:

$$\phi(x) = \phi(x^*) + (x - x^*)\phi'(x^*) + (x - x^*)^2 \frac{\phi''(x^*)}{2} + O\left((x - x^*)^3\right)$$

Sabemos que

$$\begin{aligned} \phi(x^*) &= x^* - \frac{f(x^*)}{f'(x^*)} = x^* \\ \phi'(x^*) &= 1 - \frac{f'(x^*)f'(x^*) - f(x^*)f''(x^*)}{\left(f'(x^*)\right)^2} = 1 - 1 = 0 \end{aligned}$$

Portanto:

$$\begin{aligned} \phi(x) &= x^* + (x - x^*)^2 \frac{\phi''(x^*)}{2} + O\left((x - x^*)^3\right) \\ &\approx x^* + (x - x^*)^2 \frac{\phi''(x^*)}{2}. \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned} x^{(n+1)} &= \phi(x^{(n)}) \\ &\approx x^* + (x^{(n)} - x^*)^2 \frac{\phi''(x^*)}{2} \end{aligned}$$

$$\left(x^{(n+1)} - x^*\right) \approx (x^{(n)} - x^*)^2 \frac{\phi''(x^*)}{2}$$

Observação 10. Pode-se mostrar facilmente que

$$\phi''(x^*) = \frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exercícios

E 3.4.1. Considere o problema de calcular as soluções positivas da equação:

$$\text{tg}\,(x) = 2x^2.$$

a) Use o método gráfico para isolar as duas primeiras raízes positivas em pequenos intervalos. Use a teoria estudada em aula para argumentar quanto à existência e unicidade das raízes dentro intervalos escolhidos.

b) Calcule o número de iterações necessárias para que o método da bisseção aproxime cada uma das raízes com erro absoluto inferior a 10^{-8}. Calcule as raízes por este método usando este número de passos.

c) Calcule cada uma das raízes pelo método de Newton com oito dígitos significativos e discuta a convergência comparando com o item b).

Obs: Alguns alunos encontraram como solução $x_1 \approx 1{,}5707963$ e $x_2 \approx 4{,}7123890$. O que eles fizeram de errado?

Exercícios

E 3.4.2. Considere a equação

$$e^{-x^2} = x$$

trace o gráfico com auxílio do `Scilab` e verifique que ela possui uma raiz positiva. Encontre uma aproximação para esta razão pelo gráfico e use este valor para inicializar o método de Newton e obtenha uma aproximação para a raiz com 8 dígitos significativos. (Use o comando `format('v',16)` para alterar a visualização no `Scilab`.)

E 3.4.3. Isole e encontre as cinco primeiras raízes positivas da equação com 6 dígitos corretos através de traçado de gráfico e do método de Newton.

$$\cos(10x) = e^{-x}.$$

Dica: a primeira raiz positiva está no intervalo (0,0.02). Fique atento.

E 3.4.4. Encontre as raízes do polinômio $f(x) = x^4 - 4x^2 + 4$ através do método de Newton. O que você observa em relação ao erro obtido? Compare com a situação do problema 3.2.7.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 3.4.5. Encontre as raízes reais do polinômio $f(x) = \frac{x^5}{100} + x^4 + 3x + 1$ isolando-as pelo método do gráfico e depois usando o método de Newton. Expresse a solução com 7 dígitos significativos.

E 3.4.6. Considere o método de Newton aplicado para encontrar a raiz de $f(x) = x^3 - 2x + 2$. O que acontece quando $x^{(0)} = 0$? Escolha um valor adequado para inicializar o método e obter a única raiz real desta equação.

E 3.4.7. Justifique a construção do processo iterativo do Método de Newton através do conceito de estabilidade de ponto fixo e convergência do método da iteração. Dica: Considere os problemas 3.3.17 e 3.3.18.

E 3.4.8. Entenda a interpretação geométrica ao método de Newton. Encontre uma valor para iniciar o método de Newton aplicado ao problema $f(x) = xe^{-x} = 0$ tal que o esquema iterativo divirja.

E 3.4.9. Aplique o método de Newton à função $f(x) = \frac{1}{x} - u$ e construa um esquema computacional para calcular a inversa de u com base em operações de multiplicação e soma/subtração.

E 3.4.10. Aplique o método de Newton à função $f(x) = x^n - A$ e construa um esquema computacional para calcular $\sqrt[n]{A}$ para $A > 0$ com base em operações de multiplicação e soma/subtração.

E 3.4.11. Considere a função dada por

$$\psi(x) \quad = \quad \ln\left(15 - \ln(x)\right)$$

definida para $x > 0$

a) (1.5) Use o teorema do ponto fixo para provar que se x_0 pertence ao intervalo [1,3], então a sequência dada iterativamente por

$$x^{(n+1)} = \psi(x^{(n)}), n \geq 0$$

converge para o único ponto fixo, x^*, de ψ. Construa a iteração $x^{(n+1)} = \psi(x^{(n)})$ e obtenha numericamente o valor do ponto fixo x^*. Expresse a resposta com 5 algarismos significativos corretos.

b) (1.0) Construa a iteração do método de Newton para encontrar x^*, explicitando a relação de recorrência e iniciando com $x_0 = 2$. Use o Scilab para obter a raiz e expresse a resposta com oito dígitos significativos corretos.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

3.5 Método das Secantes

O Método das Secantes é semelhante ao Método de Newton. Neste método a derivada $f'(x)$ é aproximada pela declividade de um reta secante à curva:

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

Assim, em cada passo do método, calcula-se uma nova aproximação com base em duas aproximações anteriores:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{f(x^{(n)})}{m}, \qquad m = \frac{f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})}{x^{(n)} - x^{(n-1)}}$$

Exemplo 44. Encontre as raízes de $f(x) = \cos(x) - x$.

Da inspeção do gráfico das funções $y = \cos(x)$ e $y = x$, sabemos que esta equação possui uma raiz em torno de $x = 0{,}8$. Iniciamos o método com $x_0 = 0{,}7$ e $x_1 = 0{,}8$.

$x^{(n-1)}$	$x^{(n)}$	m	$x^{(n+1)}$
0,7	0,8	$\frac{f(0,8)-f(0,7)}{0,8-0,7} = -1{,}6813548$	$0{,}8 - \frac{f(0,8)}{-1,6813548} = 0{,}7385654$
0,8	0,7385654	−1,6955107	0,7390784
0,7385654	0,7390784	−1,6734174	0,7390851
0,7390784	0,7390851	−1,6736095	0,7390851

3.5.1 Análise de convergência

Seja $f(x) \in C^2$ um função tal que $f(x^*) = 0$ e $f'(x^*) \neq 0$. Considere o processo iterativo do método das secantes:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{f(x^{(n)})}{f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})}(x^{(n)} - x^{(n-1)})$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Esta expressão pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} x^{(n+1)} &= x^{(n)} - \frac{f(x^{(n)})(x^{(n)} - x^{(n-1)})}{f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})} \\ &= \frac{x^{(n)}\left(f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})\right) - f(x^{(n)})(x^{(n)} - x^{(n-1)})}{f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})} \\ &= \frac{x^{(n)}f(x^{(n-1)}) - x^{(n-1)}f(x^{(n)})}{f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})} \end{aligned}$$

Subtraindo x^* de ambos os lados temos:

$$\begin{aligned} x^{(n+1)} - x^* &= \frac{x^{(n)}f(x^{(n-1)}) - x^{(n-1)}f(x^{(n)})}{f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})} - x^* \\ &= \frac{x^{(n)}f(x^{(n-1)}) - x^{(n-1)}f(x^{(n)}) - x^*\left(f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})\right)}{f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})} \\ &= \frac{(x^{(n)} - x^*)f(x^{(n-1)}) - (x^{(n-1)} - x^*)f(x^{(n)})}{f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})} \end{aligned}$$

Definimos $\epsilon_n = x_n - x^*$, equivalente a $x_n = x^* + \epsilon_n$

$$\epsilon_{n+1} = \frac{\epsilon_n f(x^* + \epsilon_{n-1}) - \epsilon_{n-1}f(x^* + \epsilon_n)}{f(x^* + \epsilon_n) - f(x^* + \epsilon_{n-1})}$$

Aproximamos a função $f(x)$ no numerador por

$$\begin{aligned} f(x^* + \epsilon) &\approx f(x^*) + \epsilon f'(x^*) + \epsilon^2\frac{f''(x^*)}{2} \\ f(x^* + \epsilon) &\approx \epsilon f'(x^*) + \epsilon^2\frac{f''(x^*)}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \epsilon_{n+1} &\approx \frac{\epsilon_n\left[\epsilon_{n-1}f'(x^*) + \epsilon_{n-1}^2\frac{f''(x^*)}{2}\right] - \epsilon_{n-1}\left[\epsilon_n f'(x^*) + \epsilon_n^2\frac{f''(x^*)}{2}\right]}{f(x^* + \epsilon_n) - f(x^* + \epsilon_{n-1})} \\ &= \frac{\frac{f''(x^*)}{2}\left(\epsilon_n\epsilon_{n-1}^2 - \epsilon_{n-1}\epsilon_n^2\right)}{f(x^* + \epsilon_n) - f(x^* + \epsilon_{n-1})} \\ &= \frac{1}{2}\frac{f''(x^*)\epsilon_n\epsilon_{n-1}\left(\epsilon_{n-1} - \epsilon_n\right)}{f(x^* + \epsilon_n) - f(x^* + \epsilon_{n-1})} \end{aligned}$$

Observamos, agora, que

$$\begin{aligned} f(x^* + \epsilon_n) - f(x^* + \epsilon_{n-1}) &\approx [f(x^*) + f'(x^*)\epsilon_n] - [f(x^*) + f'(x^*)\epsilon_{n-1}] \\ &= f'(x^*)(\epsilon_n - \epsilon_{n-1}) \end{aligned} \tag{3.2}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Portanto:

$$\epsilon_{n+1} \approx \frac{1}{2}\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\epsilon_n\epsilon_{n-1} \tag{3.3}$$

ou, equivalentemente:

$$x^{(n+1)} - x^* \approx \frac{1}{2}\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\left(x^{(n)} - x^*\right)\left(x^{(n-1)} - x^*\right) \tag{3.4}$$

Pode-se mostrar que

$$|x^{(n+1)} - x^*| \approx M|x^{(n)} - x^*|^{\phi}, \;\; n \text{ grande} \tag{3.5}$$

com $\phi = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \approx 1{,}618$ e M é uma constante.

Tabela 3.1: Quadro comparativo.

Método	Convergência	Erro	Critério de parada
Bisseção	Linear $(p = 1)$	$\epsilon_{n+1} = \frac{1}{2}\epsilon$	$\frac{b_n - a_n}{2} <$ erro
Iteração linear	Linear $(p = 1)$	$\epsilon_{n+1} \approx \lvert\phi'(x^*)\rvert\varepsilon_n$	$\frac{\lvert\Delta_n\rvert}{1-\frac{\Delta_n}{\Delta_{n-1}}} <$ erro $\Delta_n < \Delta_{n-1}$
Newton	Quadrática $(p = 2)$	$\epsilon_{n+1} \approx \frac{1}{2}\left\lvert\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\right\rvert\varepsilon_n^2$	$\lvert\Delta_n\rvert <$ erro
Secante	$p = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \approx 1{,}618$	$\varepsilon_{n+1} \approx \left\lvert\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\right\rvert\varepsilon_n\varepsilon_{n-1} \approx M\varepsilon_n^{\phi}$	$\lvert\Delta_n\rvert <$ erro

Observação 11. O erro na tabela sempre se refere ao erro absoluto esperado. Nos três últimos métodos, é comum que se exija como critério de parada que a condição seja satisfeita por alguns poucos passos consecutivos. Outros critérios podem ser usados. No métodos das secantes, deve-se ter o cuidado de evitar divisões por zero quando $x_{n+1} - x_n$ muito pequeno em relação à resolução do sistema de numeração.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exercícios

E 3.5.1. Refaça as questões 3.4.2, 3.4.3, 3.4.4 e 3.4.5, usando o método das secantes.

E 3.5.2. Dê uma interpretação geométrica ao método das secantes. Qual a vantagem do método das secantes sobre o método de Newton?

E 3.5.3. Aplique o método das secantes para resolver a equação

$$e^{-x^2} = 2x$$

E 3.5.4. Refaça o problema 3.2.8 usando o método de Newton e das secantes.

Exercícios finais

E 3.5.5. A equação

$$\cos(\pi x) = e^{-2x}$$

tem infinitas raízes. Usando métodos numéricos encontre as primeiras raízes dessa equação. Verifique a j-ésima raiz (z_j) pode ser aproximada por $j - 1/2$ para j grande. Use o método de Newton para encontrar uma aproximação melhor para z_j.

E 3.5.6. A corrente elétrica, I, em Ampères em uma lâmpada em função da tensão elétrica, V, é dada por

$$I = \left(\frac{V}{150}\right)^{0.8}$$

Qual a potência da lâmpada quando ligada em série com uma resistência de valor R a uma fonte de 150V quando. (procure erro inferior a 1%)

a) $R = 0\Omega$

b) $R = 10\Omega$

c) $R = 50\Omega$

d) $R = 100\Omega$

E) $R = 500\Omega$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 3.5.7. (Bioquímica) A concentração sanguínea de um medicamente é modelado pela seguinte expressão

$$c(t) = Ate^{-\lambda t}$$

onde $t > 0$ é o tempo em minutos decorrido desde a administração da droga. A é a quantidade administrada em mg/ml e λ é a constante de tempo em min^{-1}. Responda:

a) Sendo $\lambda = 1/3$, em que instantes de tempo a concentração é metade do valor máximo. Calcule com precisão de segundos.

b) Sendo $\lambda = 1/3$ e $A = 100mg/ml$, durante quanto tempo a concentração permanece maior que $10mg/ml$.

E 3.5.8. Considere o seguinte modelo para crescimento populacional em um país:

$$P(t) = A + Be^{\lambda t}.$$

onde t é dado em anos. Use t em anos e $t = 0$ para 1960. Encontre os parâmetros A, B e λ com base nos anos de 1960, 1970 e 1991 conforme tabela:

Ano	população
1960	70992343
1970	94508583
1980	121150573
1991	146917459

Use esses parâmetros para calcular a população em 1980 e compare com o valor do censo.

E 3.5.9. Uma boia esférica flutua na água. Sabendo que a boia tem 10ℓ de volume e 2Kg de massa. Calcule a altura da porção molhada da boia.

E 3.5.10. Uma boia cilíndrica tem secção transversal circular de raio 10cm e comprimento 2m e pesa 10Kg. Sabendo que a boia flutua sobre água com o eixo do cilindro na posição horizontal, calcule a altura da parte molhada da boia.

E 3.5.11. Encontre com 6 casas decimais o ponto da curva $y = \ln x$ mais próximo da origem.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 3.5.12. Um computador é vendido pelo valor a vista de R$2.000,00 ou em 1+15 prestações de R$200,00. Calcule a taxa de juros associada à venda a prazo.

E 3.5.13. O valor de R$110.000,00 é financiado conforme a seguinte programa de pagamentos:

Mês	pagamento
1	20.000,00
2	20.000,00
3	20.000,00
4	19.000,00
5	18.000,00
6	17.000,00
7	16.000,00

Calcule a taxa de juros envolvida. A data do empréstimo é o mês zero.

E 3.5.14. Depois de acionado um sistema de aquecedores, a temperatura em um forno evolui conforme a seguinte equação

$$T(t) = 500 - 800e^{-t} + 600e^{-t/3}.$$

onde T é a temperatura em Kelvin e t é tempo em horas.

a) Obtenha analiticamente o valor de $\lim_{t\to\infty} T(t)$.

b) Obtenha analiticamente o valor máximo de $T(t)$ e o instante de tempo quando o máximo acontece

c) Obtenha numericamente com precisão de minutos o tempo decorrido até que a temperatura passe pela primeira vez pelo valor de equilíbrio obtido no item a.

c) Obtenha numericamente com precisão de minutos a duração do período durante o qual a temperatura permanece pelo menos 20% superior ao valor de equilíbrio.

E 3.5.15. Encontre os pontos onde a elipse que satisfaz $\frac{x^2}{3} + y^2 = 1$ intersepta a parábola $y = x^2 - 2$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 3.5.16. Encontre a área do maior retângulo que é possível inscrever entre a curva $e^{-x^2}\left(1+\cos(x)\right)$ e o eixo $y=0$.

E 3.5.17. Uma indústria consome energia elétrica de duas usinas fornecedoras. O custo de fornecimento em reais por hora como função da potência consumida em kW é dada pelas seguintes funções

$$\begin{aligned} C_1(x) &= 500 + .27x + 4.1\cdot 10^{-5}x^2 + 2.1\cdot 10^{-7}x^3 + 4.2\cdot 10^{-10}x^4 \\ C_2(x) &= 1000 + .22x + 6.3\cdot 10^{-5}x^2 + 8.5\cdot 10^{-7}x^3 \end{aligned}$$

Onde $C_1(x)$ e $C_2(x)$ são os custos de fornecimento das usinas 1 e 2, respectivamente. Calcule o custo mínimo da energia elétrica quando a potência total consumida é $1500kW$.

E 3.5.18. A pressão de saturação (em bar) de um dado hidrocarboneto pelo ser modelada pela equação de Antoine:

$$\ln\left(P^{sat}\right) = A - \frac{B}{T+C}$$

onde T é a temperatura e A, B e C são constantes dadas conforme a seguir:

Hidrocarboneto	A	B	C
N-pentano	9.2131	2477.07	-39.94
N-heptano	9.2535	2911.32	-56.51

a) Calcule a temperatura de bolha de uma mistura de N-pentano e N-heptano à pressão de 1.2bar quando as frações molares dos gases são $z_1 = z_2 = 0.5$. Para tal utilize a seguinte equação:

$$P = \sum_i z_i P_i^{sat}$$

b) Calcule a temperatura de orvalho de uma mistura de N-pentano e N-heptano à pressão de 1.2bar quando as frações molares dos gases são $z_1 = z_2 = 0.5$. Para tal utilize a seguinte equação:

$$\frac{1}{P} = \sum_i \frac{z_i}{P_i^{sat}}$$

E 3.5.19. Encontre os três primeiros pontos de mínimo da função

$$f(x) = e^{-x/11} + x\cos(2x)$$

para $x > 0$ com erro inferior a 10^{-7}.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Capítulo 4

Solução de sistemas lineares

Neste parte de nosso curso, estamos interessados em técnicas para resolução de sistemas de equações algébricas lineares.

Trataremos de sistemas de equações algébricas lineares da seguinte forma:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= y_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= y_2 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n &= y_m \end{aligned}$$

Observe que m é o número de equações e n é o número de incógnitas. Podemos escrever este problema na forma matricial

$$Ax = y$$

onde

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

Daremos mais atenção ao caso $m = n$, isto é, quando a matriz A que envolvia no sistema linear é quadrada.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

4.1 Eliminação gaussiana com pivoteamento parcial

Lembramos que algumas operações feitas nas linhas de um sistema não alteram a solução:

1. Multiplicação de um linha por um número
2. Troca de uma linha por ela mesma somada a um múltiplo de outra.
3. Troca de duas linhas.

O processo que transforma um sistema em outro com mesma solução, mas que apresenta uma forma triangular é chamado eliminação Gaussiana. A solução do sistema pode ser obtida fazendo substituição regressiva.

Exemplo 45 (Eliminação Gaussiana sem pivotamento parcial)**.** Resolva o sistema:

$$\begin{cases} x+y+z=1 \\ 2x+y-z=0 \\ 2x+2y+z=1 \end{cases}$$

Solução. Escrevemos a matriz completa do sistema:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & -1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 & 1 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -3 & -2 \\ 0 & 0 & -1 & -1 \end{array}\right]$$

Encontramos $-z=-1$, ou seja, $z=1$. Substituímos na segunda equação e temos $-y-3z=-2$, ou seja, $y=-1$ e, finalmente $x+y+z=1$, resultando em $x=1$. ♢

A Eliminação Gaussiana com pivotamento parcial consiste em fazer uma permutação de linhas de forma a escolher o maior pivô (em módulo) a cada passo.

Exemplo 46 (Eliminação Gaussiana com pivotamento parcial)**.** Resolva o sistema:

$$\begin{cases} x+y+z=1 \\ 2x+y-z=0 \\ 2x+2z+z=1 \end{cases}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Solução. Escrevemos a matriz completa do sistema:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & -1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 & 1 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 & 1 \end{array}\right]$$
$$\sim \left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1/2 & 3/2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \end{array}\right]$$
$$\sim \left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1/2 & 3/2 & 1 \end{array}\right]$$
$$\sim \left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1/2 \end{array}\right]$$

Encontramos $1/2z = 1/2$, ou seja, $z = 1$. Substituímos na segunda equação e temos $y + 2z = 1$, ou seja, $y = -1$ e, finalmente $2x + y - z = 0$, resultando em $x = 1$. ◊

Exemplo 47. Resolva o seguinte sistema por eliminação gaussiana com pivotamento parcial.

$$\left[\begin{array}{ccc} 0 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} x \\ y \\ z \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} 8 \\ 9 \\ 6 \end{array}\right]$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Solução. Construímos a matriz completa:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 0 & 2 & 2 & 8 \\ 1 & 2 & 1 & 9 \\ 1 & 1 & 1 & 6 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 9 \\ 0 & 2 & 2 & 8 \\ 1 & 1 & 1 & 6 \end{array}\right]$$

$$\sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 9 \\ 0 & 2 & 2 & 8 \\ 0 & -1 & 0 & -3 \end{array}\right]$$

$$\sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 9 \\ 0 & 2 & 2 & 8 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{array}\right]$$

$$\sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 0 & 8 \\ 0 & 2 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{array}\right]$$

$$\sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{array}\right]$$

Portanto $x = 2$, $y = 3$ e $z = 1$. ◊

Exemplo 48 (Problema com elementos com grande diferença de escala)**.**

$$\left[\begin{array}{cc} \varepsilon & 2 \\ 1 & \varepsilon \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} x \\ y \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} 4 \\ 3 \end{array}\right]$$

Executamos a eliminação gaussiana sem pivotamento parcial para $\varepsilon \neq 0$ e $|\varepsilon| << 1$:

$$\left[\begin{array}{cc|c} \varepsilon & 2 & 4 \\ 1 & \varepsilon & 3 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{cc|c} \varepsilon & 2 & 4 \\ 0 & \varepsilon - \frac{2}{\varepsilon} & 3 - \frac{4}{\varepsilon} \end{array}\right]$$

Temos

$$y = \frac{3 - 4/\varepsilon}{\varepsilon - 2/\varepsilon}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

e

$$x = \frac{4 - 2y}{\varepsilon}$$

Observe que a expressão obtida para y se aproximada de 2 quando ε é pequeno:

$$y = \frac{3 - 4/\varepsilon}{\varepsilon - 2/\varepsilon} = \frac{3\varepsilon - 4}{\varepsilon^2 - 2} \longrightarrow \frac{-4}{-2} = 2, \quad \text{quando } \varepsilon \to 0.$$

Já expressão obtida para x depende justamente da diferença $2 - y$:

$$x = \frac{4 - 2y}{\varepsilon} = \frac{2}{\varepsilon}(2 - y)$$

Assim, quando ε é pequeno, a primeira expressão, implementado em um sistema de ponto flutuante de acurácia finita, produz $y = 2$ e, consequentemente, a expressão para x produz $x = 0$. Isto é, estamos diante um problema de cancelamento catastrófico.

Agora, quando usamos a Eliminação Gaussiana com pivotamento parcial, fazemos uma permutação de linhas de forma a escolher o maior pivô a cada passo:

$$\left[\begin{array}{cc|c} \varepsilon & 2 & 4 \\ 1 & \varepsilon & 3 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{cc|c} 1 & \varepsilon & 3 \\ \varepsilon & 2 & 4 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{cc|c} 1 & \varepsilon & 3 \\ 0 & 2 - \varepsilon^2 & 4 - 3\varepsilon \end{array}\right]$$

Continuando o procedimento, temos:

$$y = \frac{4 - 4\varepsilon}{2 - \varepsilon^2}$$

e

$$x = 3 - \varepsilon y$$

Observe que tais expressões são analiticamente idênticas às anteriores, no entanto, são mais estáveis numericamente. Quando ε converge a zero, y converge a 2, como no caso anterior. No entanto, mesmo que $y = 2$, a segunda expressão produz $x = 3 - \varepsilon y$, isto é, a aproximação $x \approx 3$ não depende mais de obter $2 - y$ com precisão.

Exercícios

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 4.1.1. Resolva o seguinte sistema de equações lineares

$$\begin{aligned} x + y + z &= 0 \\ x + 10z &= -48 \\ 10y + z &= 25 \end{aligned}$$

Usando eliminação gaussiana com pivoteamento parcial (não use o computador para resolver essa questão).

E 4.1.2. Resolva o seguinte sistema de equações lineares

$$\begin{aligned} x + y + z &= 0 \\ x + 10z &= -48 \\ 10y + z &= 25 \end{aligned}$$

Usando eliminação gaussiana com pivotamento parcial (não use o computador para resolver essa questão).

E 4.1.3. Calcule a inversa da matriz

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

usando eliminação Gaussiana com pivotamento parcial.

E 4.1.4. Demonstre que se $ad \neq bc$, então a matriz A dada por:

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

é inversível e sua inversa é dada por:

$$A^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}.$$

E 4.1.5. Considere as matrizes

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

e

$$E = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

e o vetor

$$v = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}$$

a) Resolva o sistema $Ax = v$ sem usar o computador.

b) Sem usar o computador e através da técnica algébrica de sua preferência, resolva o sistema $(A + \varepsilon E)x_\varepsilon = v$ considerando $|\varepsilon| << 1$ e obtenha a solução exata em função do parâmetro ε.

c) Usando a expressão analítica obtida acima, calcule o limite $\lim_{\varepsilon \to 0} x_\varepsilon$.

d) Resolva o sistema $(A+\varepsilon E)x = v$ no `Scilab` usando pivotamento parcial e depois sem usar pivotamento parcial para valores muito pequenos de ε como $10^{-10}, 10^{-15}, \ldots$. O que você observa?

E 4.1.6. Resolva o seguinte sistema de 5 equações lineares

$$\begin{aligned} x_1 - x_2 &= 0 \\ -x_{i-1} + 2.5x_i - x_{i+1} &= e^{-\frac{(i-3)^2}{20}}, \qquad 2 \leq i \leq 4 \\ 2x_5 - x_4 &= 0 \end{aligned}$$

representando-o como um problema do tipo $Ax = b$ no `Scilab` e usando o comando de contra-barra para resolvê-lo. Repita usando a rotina que implementa eliminação gaussiana.

E 4.1.7. Encontre a inversa da matriz

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & 4 \end{bmatrix}$$

a) Usando Eliminação Gaussiana com pivotamento parcial à mão.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

b) Usando a rotina 'gausspp()'.

c) Usando a rotina 'inv()' do `Scilab`.

4.2 Condicionamento de sistemas lineares

Quando lidamos com matrizes no corpo do números reais (ou complexos), existem apenas duas alternativas: i) a matriz é inversível; ii) a matriz não é inversível e, neste caso, é chamada de matriz singular. Ao lidarmos em aritmética de precisão finita, encontramos uma situação mais sutil: alguns problema lineares são mais difíceis de serem resolvidos, pois os erros de arredondamento se propagam de forma mais significativa que em outros problemas. Neste caso falamos de problemas bem-condicionados e mal-condicionados. Intuitivamente falando, um problema bem-condicionado é um problema em que os erros de arredondamento se propagam de forma menos importante; enquanto problemas mal-condicionados são problemas em que os erros se propagam de forma mais relevante.

Um caso típico de sistema mal-condicionado é aquele cujos coeficiente estão muito próximos ao de um problema singular. Considere o seguinte exemplo:

Exemplo 49. Observe que o problema

$$\begin{cases} 71x + 41y = 100 \\ \lambda x + 30y = 70 \end{cases}$$

é impossível quando $\lambda = \frac{71\times 30}{41} \approx 51{,}95122$.

Agora, verifique o que acontece quando resolvemos os seguintes sistemas lineares:

$$\begin{cases} 71x + 41y = 100 \\ 52x + 30y = 70 \end{cases} \quad \text{e} \quad \begin{cases} 71x + 41y = 100 \\ 51x + 30y = 70 \end{cases}$$

A solução do primeiro problema é $x = -65$ e $y = 115$. Já para o segundo problema é $x = \frac{10}{3}$ e $y = -\frac{10}{3}$.

Igualmente, observe os seguintes dois problemas:

$$\begin{cases} 71x + 41y = 100 \\ 52x + 30y = 70 \end{cases} \quad \text{e} \quad \begin{cases} 71x + 41y = 100{,}4 \\ 52x + 30y = 69{,}3 \end{cases}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

A solução do primeiro problema é $x = -65$ e $y = 115$ e do segundo problema é $x = -85{,}35$ e $y = 150{,}25$.

Observe que pequenas variações nos coeficientes das matrizes fazem as soluções ficarem bem distintas, isto é, pequenas variações nos dados de entrada acarretaram em grandes variações na solução do sistema. Quando isso acontece, dizemos que o problema é mal-condicionados.

Para introduzir essa ideia formalmente, precisamos definir o número de condicionamento. Informalmente falando, o número de condicionamento mede o quanto a solução de um problema em função de alterações nos dados de entrada. Para construir matematicamente este conceito, precisamos de uma medida destas variações. Como tanto os dados de entrada como os dados de saída são expressos na forma vetorial, precisaremos do conceito de norma vetorial. Por isso, faremos uma breve interrupção de nossa discussão para introduzir as definições de norma de vetores e matrizes na próxima seção.

4.2.1 Norma L_p de vetores

Definimos a norma L_p ou L^p de um vetor em $\mathbb{R}^n$ para $p \geq 1$ como

$$\|v\|_p = (|v_1|^p + |v_2|^p + \cdots |v_n|^p)^{1/p}$$

E a norma L_∞ ou L^∞ como

$$\|v\|_\infty = \max_{j=1}^{n} |v_j|$$

Propriedades: Se λ é um real (ou complexo) e u e v são vetores, temos:

$$\begin{aligned} \|v\| &= 0 \Longleftrightarrow v = 0 \\ \|\lambda v\| &= |\lambda| \|v\| \\ \|u + v\| &\leq \|u\| + \|v\| \quad \text{(desigualdade do triângulo)} \\ \lim_{p \to \infty} \|u\|_p &= \|u\|_\infty \end{aligned}$$

Exemplo: Calcule a norma L^1, L^2 e L^∞ de

$$v = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -3 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

$$\begin{aligned}\|v\|_1 &= 1+2+3+0=6\\ \|v\|_2 &= \sqrt{1+2^2+3^2+0^2}=\sqrt{14}\\ \|v\|_\infty &= \max\{1,2,3,0\}=3\end{aligned}$$

4.2.2 Norma matricial

Definimos a norma operacional em L^p de uma matriz $A:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ da seguinte forma:

$$\|A\|_p = \sup_{\|v\|_p=1}\|Av\|_p$$

ou seja, a norma p de uma matriz é o máximo valor assumido pela norma de Av entre todos os vetores de norma unitária.

Temos as seguintes propriedades, se A e B são matrizes, I é a matriz identidade, v é um vetor e λ é um real (ou complexo):

$$\begin{aligned}\|A\|_p &= 0 \iff A=0\\ \|\lambda A\|_p &= |\lambda|\|A\|_p\\ \|A+B\|_p &\le \|A\|_p+\|B\|_p \quad \text{(desigualdade do triângulo)}\\ \|Av\|_p &\le \|A\|_p\|v\|_p\\ \|AB\|_p &\le \|A\|_p\|B\|_p\\ \|I\|_p &= 1\\ 1 &= \|I\|_p=\|AA^{-1}\|_p\le\|A\|_p\|A^{-1}\|_p \quad \text{(se A é inversível)}\end{aligned}$$

Casos especiais:

$$\begin{aligned}\|A\|_1 &= \max_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}|A_{ij}|\\ \|A\|_2 &= \sqrt{\max\{|\lambda|:\lambda\in\sigma(AA^*)\}}\\ \|A\|_\infty &= \max_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|A_{ij}|\end{aligned}$$

onde $\sigma(M)$ é o conjunto de autovalores da matriz M.

Exemplo: Calcule as normas 1, 2 e ∞ da seguinte matriz:

$$A=\begin{bmatrix}3 & -5 & 7\\ 1 & -2 & 4\\ -8 & 1 & -7\end{bmatrix}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Solução

$$\begin{aligned} \|A\|_1 &= \max\{12{,}8{,}18\} = 18 \\ \|A\|_\infty &= \max\{15{,}7{,}16\} = 16 \\ \|A\|_2 &= \sqrt{\max\{0{,}5865124; 21{,}789128; 195{,}62436\}} = 13{,}986578 \end{aligned}$$

4.2.3 Número de condicionamento

O condicionamento de um sistema linear é um conceito relacionado à forma como os erros se propagam dos dados de entrada para os dados de saída, ou seja, se o sistema

$$Ax = y$$

possui uma solução x para o vetor y, quando varia a solução x quando o dado de entrado y varia. Consideramos, então, o problema

$$A(x + \delta_x) = y + \delta_y$$

Aqui δ_x representa a variação em x e δ_y representa a respectiva variação em y. Temos:

$$Ax + A\delta_x = y + \delta_y$$

e, portanto,

$$A\delta_x = \delta_y.$$

Queremos avaliar a magnitude do erro relativo em y, representado por $\|\delta_y\|/\|y\|$ em função da magnitude do erro relativo $\|\delta_x\|/\|x\|$.

$$\begin{aligned} \frac{\|\delta_x\|/\|x\|}{\|\delta_y\|/\|y\|} &= \frac{\|\delta_x\|}{\|x\|}\frac{\|y\|}{\|\delta_y\|} \\ &= \frac{\|A^{-1}\delta_y\|}{\|x\|}\frac{\|Ax\|}{\|\delta_y\|} \\ &\leq \frac{\|A^{-1}\|\|\delta_y\|}{\|x\|}\frac{\|A\|\|x\|}{\|\delta_y\|} \\ &= \|A\|\|A^{-1}\| \end{aligned}$$

Assim, definimos o número de condicionamento de uma matriz inversível A como

$$k_p(A) = \|A\|_p\|A^{-1}\|_p$$

O número de condicionamento, então, mede o quão instável é resolver o problema $Ax = y$ frente a erros no vetor de entrada x.

Obs: O número de condicionamento depende da norma escolhida.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Obs: O número de condicionamento da matriz identidade é 1.

Obs: O número de condicionamento de qualquer matriz inversível é igual ou maior que 1.

Exercícios

E 4.2.1. Calcule o valor de λ para o qual o problema

$$\begin{cases} 71x + 41y = 10 \\ \lambda x + 30y = 4 \end{cases}$$

é impossível, depois calcule os números de condicionamento com norma 1,2 e ∞ quando $\lambda = 51$ e $\lambda = 52$.

E 4.2.2. Calcule o número de condicionamento da matriz

$$A = \begin{bmatrix} 3 & -5 & 7 \\ 1 & -2 & 4 \\ -8 & 1 & -7 \end{bmatrix}$$

nas normas 1, 2 e ∞.

E 4.2.3. Calcule o número de condicionamento das matrizes

$$\begin{bmatrix} 71 & 41 \\ 52 & 30 \end{bmatrix}$$

e

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 4 & 5 & 5 \end{bmatrix}$$

usando as normas 1,2 e ∞.

E 4.2.4. Usando a norma 1, calcule o número de condicionameto da matriz

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2+\varepsilon & 4 \end{bmatrix}$$

em função de ε quando $0 < \varepsilon < 1$. Interprete o limite $\varepsilon \to 0$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 4.2.5. Considere os sistemas:

$$\begin{cases} 100000x - 9999.99y = -10 \\ -9999.99x + 1000.1y = 1 \end{cases} \quad \text{e} \quad \begin{cases} 100000x - 9999.99y = -9.999 \\ -9999.99x + 1000.1y = 1.01 \end{cases}$$

Encontre a solução de cada um e discuta.

E 4.2.6. Considere os vetores de 10 entradas dados por

$$x_j = \sin(j/10), \quad y_j = j/10 \quad z_j = j/10 - \frac{(j/10)^3}{6}, \ j = 1, \ldots, 10$$

Use o `Scilab` para construir os seguintes vetores de erro:

$$e_j = \frac{|x_j - y_j|}{|x_j|} \quad f_j = \frac{|x_j - z_j|}{x_j}$$

Calcule as normas 1, 2 e ∞ de e e f

4.3 Métodos iterativos para sistemas lineares

4.3.1 Método de Jacobi

Considere o problema $Ax = y$, ou seja,

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= y_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= y_2 \\ \vdots \qquad\qquad\qquad\quad \vdots &= \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= y_n \end{aligned}$$

Os elementos x_j são calculados iterativamente conforme:

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= \frac{y_1 - \left(a_{12}x_2^{(k)} + \cdots + a_{1n}x_n^{(k)}\right)}{a_{11}} \\ x_2^{(k+1)} &= \frac{y_2 - \left(a_{21}x_1^{(k)} + \cdots + a_{2n}x_n^{(k)}\right)}{a_{22}} \\ &\vdots \\ x_n^{(k+1)} &= \frac{y_2 - \left(a_{n1}x_1^{(k)} + \cdots + a_{n(n-1)}x_{n-1}^{(k)}\right)}{a_{nn}} \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Em notação mais compacta, o método de Jacobi consiste na iteração:

$$x^{(0)} = \text{aprox. inicial}$$
$$x_i^{(k)} = \frac{y_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}}$$

Exemplo: Resolva o sistema

$$\begin{cases} 10x + y = 23 \\ x + 8y = 26 \end{cases}$$

usando o método de Jacobi iniciando com $x^{(0)} = y^{(0)} = 0$.

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= \frac{23 - y^{(k)}}{10} \\ y^{(k+1)} &= \frac{26 - x^{(k)}}{8} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= \frac{23 - y^{(0)}}{10} = 2{,}3 \\ y^{(1)} &= \frac{26 - x^{(0)}}{8} = 3{,}25 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x^{(2)} &= \frac{23 - y^{(1)}}{10} = 1{,}975 \\ y^{(2)} &= \frac{26 - x^{(1)}}{8} = 2{,}9625 \end{aligned}$$

Código Scilab: Jacobi

4.3.2 Método de Gauss-Seidel

Considere o problema $Ax = y$, ou seja,

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= y_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= y_2 \\ \vdots \qquad\qquad\qquad\quad \vdots &= \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= y_n \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Os elementos x_j são calculados iterativamente conforme:

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= \frac{y_1 - \left(a_{12}x_2^{(k)} + \cdots + a_{1n}x_n^{(k)}\right)}{a_{11}} \\ x_2^{(k+1)} &= \frac{y_2 - \left(a_{11}x_1^{(k+1)} + \cdots + a_{1n}x_n^{(k)}\right)}{a_{22}} \\ &\vdots \\ x_n^{(k+1)} &= \frac{y_2 - \left(a_{n1}x_1^{(k+1)} + \cdots + a_{n(n-1)}x_{n-1}^{(k+1)}\right)}{A_{nn}} \end{aligned}$$

Em notação mais compacta, o método de Gauss-Seidel consiste na iteração:

$$\begin{aligned} x^{(0)} &= \text{aprox. inicial} \\ x_i^{(k)} &= \frac{y_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}}{a_{ii}} \end{aligned}$$

Exemplo: Resolva o sistema

$$\begin{cases} 10x + y = 23 \\ x + 8y = 26 \end{cases}$$

usando o método de Guass-Seidel iniciando com $x^{(0)} = y^{(0)} = 0$.

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= \frac{23 - y^{(k)}}{10} \\ y^{(k+1)} &= \frac{26 - x^{(k+1)}}{8} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= \frac{23 - y^{(0)}}{10} = 2{,}3 \\ y^{(1)} &= \frac{26 - x^{(1)}}{8} = 2{,}9625 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x^{(2)} &= \frac{23 - y^{(1)}}{10} = 2{,}00375 \\ y^{(2)} &= \frac{26 - x^{(2)}}{8} = 2{,}9995312 \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Código Scilab: Gauss-Seidel

4.4 Análise de convergência

Uma condição suficiente porém não necessária para que os métodos de Gauss-Seidel e Jacobi convirjam é a que a matriz seja diagonal dominante estrita. Veja [3].

Exercícios

E 4.4.1. Considere o problema de 5 incógnitas e cinco equações dado por

$$\begin{aligned} x_1 - x_2 &= 1 \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 &= 1 \\ -x_2 + (2+\varepsilon)x_3 - x_4 &= 1 \\ -x_3 + 2x_4 - x_5 &= 1 \\ x_4 - x_5 &= 1 \end{aligned}$$

a) Escreva na forma $Ax = b$ e resolva usando Eliminação Gaussiana para $\varepsilon = 10^{-3}$ no `Scilab`.

b) Obtenha o vetor incógnita x com $\varepsilon = 10^{-3}$ usando o comando $A\backslash b$.

c) Obtenha o vetor incógnita x com $\varepsilon = 10^{-3}$ usando Jacobi com tolerância 10^{-2}. Compare o resultado com o resultado obtido no item d.

d) Obtenha o vetor incógnita x com $\varepsilon = 10^{-3}$ usando Gauss-Seidel com tolerância 10^{-2}. Compare o resultado com o resultado obtido no item d.

e) Discuta com base na relação esperada entre tolerância e exatidão conforme estudado na primeira área para problemas de uma variável.

E 4.4.2. Resolva o seguinte sistema pelo método de Jacobi e Gauss-Seidel:

$$\begin{cases} 5x_1 + x_2 + x_3 &= 50 \\ -x_1 + 3x_2 - x_3 &= 10 \\ x_1 + 2x_2 + 10x_3 &= -30 \end{cases}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Use como critério de paragem tolerância inferior a 10^{-3} e inicialize com $x^0 = y^0 = z^0 = 0$.

E 4.4.3. Refaça a questão 4.1.6 construindo um algoritmo que implemente os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel.

E 4.4.4. Considere o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{aligned} x_1 - x_2 &= 0 \\ -x_{j-1} + 5x_j - x_{j+1} &= \cos(j/10), \ \ 2 \leq j \leq 10 \\ x_{11} &= x_{10}/2 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Construa a iteração para encontrar a solução deste problema pelos métodos de Gauss-Seidel e Jacobi. Usando esses métodos, encontre uma solução aproximada com erro absoluto inferior a 10^{-5}.

E 4.4.5. Resolva o problema 4.5.5 pelos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel.

E 4.4.6. Faça uma permutação de linhas no sistema abaixo e resolva pelos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel:

$$\begin{aligned} x_1 + 10x_2 + 3x_3 &= 27 \\ 4x_1 + x_3 &= 6 \\ 2x_1 + x_2 + 4x_3 &= 12 \end{aligned}$$

4.5 Método da potência para cálculo de autovalores

Consideremos uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ diagonalizável, isto é, existe um conjunto $\{v_j\}_{j=1}^n$ de autovetores de A tais que qualquer elemento $x \in \mathbb{R}^n$ pode ser escrito como uma combinação linear dos v_j. Sejam $\{\lambda_j\}_{j=1}^n$ o conjunto de autovalores associados aos autovetores tal que um deles seja dominante, ou seja,

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots |\lambda_n| > 0$$

Como os autovetores são LI, todo vetor $x \in \mathbb{R}^n$, $x = (x_1,x_2,...,x_n)$, pode ser escrito com combinação linear dos autovetores da seguinte forma:

$$x = \sum_{j=1}^{n} \beta_j v_j. \tag{4.2}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

O método da potência permite o cálculo do autovetor dominante com base no comportamento assintótico (i.e. "no infinito") da sequência

$$x, Ax, A^2x, A^3x, \ldots$$

.

Por questões de convergência, consideramos a seguinte sequência semelhante à anterior, porém normalizada:

$$\frac{x}{\|x\|}, \frac{Ax}{\|Ax\|}, \frac{A^2x}{\|A^2x\|}, \frac{A^3x}{\|A^3x\|}, \ldots,$$

que pode ser obtida pelo seguinte processo iterativo:

$$x^{(k+1)} = \frac{A^k x}{\|A^k x\|}$$

Observamos que se x está na forma (4.2), então $A^k x$ pode ser escrito como

$$A^k x = \sum_{j=1}^{n} \beta_j A^k v_j = \sum_{j=1}^{n} \beta_j \lambda_j^k v_j = \beta_1 \lambda_1^k \left(v_1 + \sum_{j=2}^{n} \frac{\beta_j}{\beta_1} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k v_j \right)$$

Como $\left|\frac{\lambda_j}{\lambda_1}\right| < 1$ para todo $j \geq 2$, temos

$$\sum_{j=2}^{n} \frac{\beta_j}{\beta_1} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k v_j \to 0.$$

Assim

$$\frac{A^k x}{\|A^k x\|} = \frac{\beta_1 \lambda_1^k}{\|A^k x\|} \left(v_1 + O\left(\left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^k \right) \right) \tag{4.3}$$

Como a norma de $\frac{A^k x}{\|A^k x\|}$ é igual a um, temos

$$\left\| \frac{\beta_1 \lambda_1^k}{\|A^k x\|} v_1 \right\| \to 1$$

e, portanto,

$$\left| \frac{\beta_1 \lambda_1^k}{\|A^k x\|} \right| \to \frac{1}{\|v_1\|}$$

Ou seja, se definimos $\alpha^{(k)} = \frac{\beta_1 \lambda_1^k}{\|A^k x\|}$, então

$$|\alpha^{(k)}| \to 1$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Retornando a (4.3), temos:

$$\frac{A^k x}{\|A^k x\|} - \alpha^{(k)} v_1 \to 0$$

Observe que um múltiplo de autovetor também é um autovetor e, portanto,

$$\frac{A^k x}{\|A^k x\|}$$

é um esquema que oscila entre os autovetores ou converge para o autovetor v_1.

Uma vez que temos o autovetor v_1 de A, podemos calcular λ_1 da seguinte forma:

$$Av_1 = \lambda_1 v_1 \implies v_1^T A v_1 = v_1^T \lambda_1 v_1 \implies \lambda_1 = \frac{v_1^T A v_1}{v_1^T v_1}$$

Observe que a última identidade é válida, pois $\|v_1\| = 1$ por construção.

Exercícios

E 4.5.1. Calcule o autovalor dominante e o autovetor associado da matriz

$$\begin{bmatrix} 4 & 41 & 78 \\ 48 & 28 & 21 \\ 26 & 13 & 11 \end{bmatrix}$$

Expresse sua resposta com seis dígitos significativos

E 4.5.2. Calcule o autovalor dominante e o autovetor associado da matriz

$$\begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 2 & -1 \end{bmatrix}$$

usando o método da potência inciando com o vetor $x = [1 \quad 1]^T$

E 4.5.3. A norma L_2 de um matriz A é dada pela raiz quadrada do autovalor dominante da matriz A^*A, isto é:

$$\|A\|_2 = \sqrt{\max\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(A^*A)\}} :$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Use o método da potência para obter a norma L_2 da seguinte matriz:

$$A = \begin{bmatrix} 69 & 84 & 88 \\ 15 & -40 & 11 \\ 70 & 41 & 20 \end{bmatrix}$$

Expresse sua resposta com seis dígitos significativos

E 4.5.4. Os autovalores de uma matriz triangular são os elementos da diagonal principal. Verifique o método da potência aplicada à seguinte matriz:

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 0 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

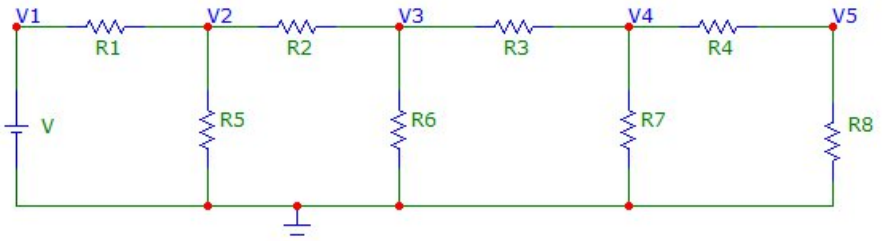
Exercícios finais

E 4.5.5.

1. O circuito linear da figura 1 pode ser modelado pelo sistema (4.4). Escreva esse sistema na forma matricial sendo as tensões V_1, V_2, V_3, V_4 e V_5 as cinco incógnitas. Resolva esse problema quando $V = 127$ e
   a) $R_1 = R_2 = R_3 = R_4 = 2$ e $R_5 = R_6 = R_7 = 100$ e $R_8 = 50$
   b) $R_1 = R_2 = R_3 = R_4 = 2$ e $R_5 = 50$ e $R_6 = R_7 = R_8 = 100$

$$\begin{aligned} V_1 &= V && \text{(4.4a)} \\ \frac{V_1 - V_2}{R_1} + \frac{V_3 - V_2}{R_2} - \frac{V_2}{R_5} &= 0 && \text{(4.4b)} \\ \frac{V_2 - V_3}{R_2} + \frac{V_4 - V_3}{R_3} - \frac{V_3}{R_6} &= 0 && \text{(4.4c)} \\ \frac{V_3 - V_4}{R_3} + \frac{V_5 - V_4}{R_4} - \frac{V_4}{R_7} &= 0 && \text{(4.4d)} \\ \frac{V_4 - V_5}{R_4} - \frac{V_5}{R_8} &= 0 && \text{(4.4e)} \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com



Complete a tabela abaixo representado a solução com 4 algarismos significativos:

Caso	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5
a					
b					

Então, refaça este problema reduzindo o sistema para apenas 4 incógnitas (V_2, V_3, V_4 e V_5).

E 4.5.6. Resolva os seguintes problemas:

a) Encontre o polinômio $P(x) = ax^2 + bx + c$ que passa pelos pontos $(-1, -3)$, $(1, -1)$ e (2,9).

b) Encontre os coeficientes A e B da função $f(x) = A\sin(x) + B\cos(x)$ tais que $f(1) = 1.4$ e $f(2) = 2.8$.

c) Encontre a função $g(x) = A_1\sin(x)+B_1\cos(x)+A_2\sin(2x)+B_2\cos(2x)$ tais que $f(1) = 1$, $f(2) = 2$, $f(3) = 3$ e $f(4) = 4$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Capítulo 5

Solução de sistemas de equações não lineares

O método de Newton aplicado a encontrar a raiz x^* da função $y = f(x)$ estudado na primeira área de nossa disciplina consiste em um processo iterativo. Em cada passo deste processo, dispomos de uma aproximação $x^{(k)}$ para x^* e construímos uma aproximação $x^{(k+1)}$. Cada passo do método de Newton envolve os seguintes procedimentos:

- Linearização da função $f(x)$ no ponto $x^{(k)}$:

$$f(x) = f(x^{(k)}) + (x - x^{(k)})f'(x^{(k)}) + O\left(|x - x^{(k)}|^2\right)$$

- A aproximação $x^{(k+1)}$ é definida como o valor de x em que a linearização $f(x^{(k)}) + (x - x^{(k)})f'(x^{(k)})$ passa por zero.

Observação: $y = f(x^{(k)}) + (x - x^{(k)})f'(x^{(k)})$ é a equação da reta que tangencia a curva $y = f(x)$ no ponto $(x^{(k)},f(x^{(k)}))$.

Queremos, agora, generalizar o método de Newton a fim de resolver problemas de várias equações e várias incógnitas, ou seja, encontrar $x_1,x_2,\ldots x_n$ que satisfazem as seguinte equações:

$$\begin{aligned} f_1(x_1,x_2,\ldots,x_n) &= 0 \\ f_2(x_1,x_2,\ldots,x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1,x_2,\ldots,x_n) &= 0 \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Podemos escrever este problema na forma vetorial definindo o vetor $x = [x_1,x_2,\ldots,x_n]^T$ e a função vetorial

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x_1,x_2,\ldots,x_n) \\ f_2(x_1,x_2,\ldots,x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1,x_2,\ldots,x_n) \end{bmatrix}$$

Exemplo 50. Suponha que queiramos resolver numericamente os seguinte sistema de duas equações e duas incógnitas:

$$\begin{aligned} \frac{x_1^2}{3} + x_2^2 &= 1 \\ x_1^2 + \frac{x_2^2}{4} &= 1 \end{aligned}$$

Então definimos

$$F(x) = \begin{bmatrix} \frac{x_1^2}{3} + x_2^2 - 1 \\ \\ x_1^2 + \frac{x_2^2}{4} - 1 \end{bmatrix}$$

Neste momento, dispomos de um problema na forma $F(x) = 0$ e precisamos desenvolver uma técnica para linearizar a função $F(x)$. Para tal, precisamos de alguns conceitos do Cálculo II.

Observe que $F(x) - F(x^{(0)})$ pode ser escrito como

$$F(x) - F(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} f_1(x_1,x_2,\ldots,x_n) - f_1(x_1^{(0)},x_2^{(0)},\ldots,x_n^{(0)}) \\ f_2(x_1,x_2,\ldots,x_n) - f_2(x_1^{(0)},x_2^{(0)},\ldots,x_n^{(0)}) \\ \vdots \\ f_n(x_1,x_2,\ldots,x_n) - f_n(x_1^{(0)},x_2^{(0)},\ldots,x_n^{(0)}) \end{bmatrix}$$

Usamos a regra da cadeia

$$df_i = \frac{\partial f_i}{\partial x_1}dx_1 + \frac{\partial f_i}{\partial x_2}dx_2 + \cdots + \frac{\partial f_i}{\partial x_n}dx_n = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_j}dx_j$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

e aproximamos as diferenças por derivadas parciais:

$$f_i(x_1,x_2,\ldots,x_n) - f_i(x_1^{(0)},x_2^{(0)},\ldots,x_n^{(0)}) \approx \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_j}\left(x_j - x_j^{(0)}\right)$$

Portanto,

$$F(x) - F(x^{(0)}) \approx \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - x_1^{(0)} \\ x_2 - x_2^{(0)} \\ \vdots \\ x_n - x_n^{(0)} \end{bmatrix} \tag{5.1}$$

Definimos então a matriz jacobiana por

$$J_F = \frac{\partial(f_1,f_2,\ldots,f_n)}{\partial(x_1,x_2,\ldots,x_n)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

A matriz jacobiana de uma função ou simplesmente, o Jacobiano de uma função $F(x)$ é a matriz formada pelas suas derivadas parciais:

$$(J_F)_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}$$

Nestes termos podemos reescrever (5.1) como

$$F(x) \approx F(x^{(0)}) + J_F(x^{(0)})(x - x^{(0)})$$

Esta expressão é chama de linearização de $F(x)$ no ponto $x^{(0)}$ e generaliza a linearização em uma dimensão dada por $f(x) \approx f(x^{(0)}) + f'(x^{(0)})(x - x^{(0)})$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

5.1 O método de Newton para sistemas

Vamos agora construir o método de Newton-Raphson, ou seja, o método de Newton generalizado para sistemas. Assumimos, portanto, que a função $F(x)$ é diferenciável e que existe um ponto x^* tal que $F(x^*) = 0$. Seja $x^{(k)}$ uma aproximação para x^*, queremos construir uma nova aproximação $x^{(k+1)}$ através da linearização de $F(x)$ no ponto $x^{(k)}$.

- Linearização da função $F(x)$ no ponto $x^{(k)}$:

$$F(x) = F(x^{(k)}) + J_F\left(x^{(k)}\right)\left(x - x^{(k)}\right) + O\left(\|x - x^{(k)}\|^2\right)$$

- A aproximação $x^{(k)}$ é definida como o ponto x em que a linearização $F(x^{(k)}) + J_F\left(x^{(k)}\right)\left(x - x^{(k)}\right)$ é nula, ou seja:

$$F(x^{(k)}) + J_F\left(x^{(k)}\right)\left(x^{(k+1)} - x^{(k)}\right) = 0$$

Supondo que a matriz jacobina seja inversível no ponto $x^{(k)}$, temos:

$$\begin{aligned} J_F\left(x^{(k)}\right)\left(x^{(k+1)} - x^{(k)}\right) &= -F(x^{(k)}) \\ x^{(k+1)} - x^{(k)} &= -J_F^{-1}\left(x^{(k)}\right)F(x^{(k)}) \\ x^{(k+1)} &= x^{(k)} - J_F^{-1}\left(x^{(k)}\right)F(x^{(k)}) \end{aligned}$$

Desta forma, o método iterativo de Newton-Raphson para encontrar as raízes de $F(x) = 0$ é dado por:

$$\begin{cases} x^{(k+1)} = x^{(k)} - J_F^{-1}\left(x^{(k)}\right)F(x^{(k)}), \ n \geq 0 \\ x^{(0)} = \text{dado inicial} \end{cases}$$

Observação 12. Usamos subíndices para indicar o elemento de um vetor e super-índices para indicar o passo da iteração. Assim $x^{(k)}$ se refere à iteração k e $x_i^{(k)}$ se refere à componente i no vetor $x^{(k)}$.

Observação 13. A notação $J_F^{-1}\left(x^{(k)}\right)$ enfatiza que a jacobiana deve ser calculada a cada passo.

Observação 14. Podemos definir o passo $\Delta^{(k)}$ como

$$\Delta^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$$

Assim, $\Delta^{(k)} = -J_F^{-1}\left(x^{(k)}\right)F(x^{(k)})$, ou seja, $\Delta^{(k)}$ resolve o problema linear:

$$J_F\left(x^{(k)}\right)\Delta^{(k)} = -F(x^{(k)})$$

Em geral, é menos custoso resolver o sistema acima do que calcular o inverso da jacobiana e multiplicar pelo vetor $F(x^{(k)})$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 51. Retornamos ao nosso exemplo inicial, isto é, resolver numericamente os seguinte sistema não-linear:

$$\begin{aligned} \frac{x_1^2}{3} + x_2^2 &= 1 \\ x_1^2 + \frac{x_2^2}{4} &= 1 \end{aligned}$$

Para tal, definimos a função $F(x)$:

$$F(x) = \begin{bmatrix} \frac{x_1^2}{3} + x_2^2 - 1 \\ x_1^2 + \frac{x_2^2}{4} - 1 \end{bmatrix}$$

cuja jacobiana é:

$$J_F = \begin{bmatrix} \frac{2x_1}{3} & 2x_2 \\ 2x_1 & \frac{x_2}{2} \end{bmatrix}$$

Faremos a implementação numérica no `Scilab`. Para tal definimos as funções que implementarão $F(x)$ e a $J_F(x)$

```
function y=F(x)
    y(1)=x(1)^2/3+x(2)^2-1
    y(2)=x(1)^2+x(2)^2/4-1
endfunction

function y=JF(x)
    y(1,1)=2*x(1)/3
    y(1,2)=2*x(2)
    y(2,1)=2*x(1)
    y(2,2)=x(2)/2
endfunction
```

Alternativamente, estas funções poderiam ser escritas como

```
function y=F(x)
    y=[x(1)^2/3+x(2)^2-1; x(1)^2+x(2)^2/4-1]
endfunction

function y=JF(x)
    y=[2*x(1)/3  2*x(2); 2*x(1) x(2)/2]
endfunction
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Desta forma, se x é uma aproximação para a raiz, pode-se calcular a próxima aproximação através dos comandos:

```
delta=-JF(x)\F(x)
x=x+delta
```

Ou simplesmente

```
x=x-JF(x)\F(x)
```

Observe que as soluções exatas desse sistema são $\left(\pm\sqrt{\frac{9}{11}}, \pm\sqrt{\frac{8}{11}}\right)$.

Exemplo 52. Encontre uma aproximação para a solução do sistema

$$\begin{aligned} x_1^2 &= \cos(x_1 x_2) + 1 \\ \sin(x_2) &= 2\cos(x_1) \end{aligned}$$

que fica próxima ao ponto $x_1 = 1.5$ e $x_2 = .5$.
Resp: (1,3468109, 0,4603195).

Solução. Vamos, aqui, dar as principais ideias para se obter a solução. Começamos definindo a função $F(x)$ por:

$$F(x) = \begin{bmatrix} x_1^2 - \cos(x_1 x_2) - 1 \\ \sin(x_2) - 2\cos(x_1) \end{bmatrix}$$

cuja jacobiana é:

$$J_F(x) = \begin{bmatrix} 2x_1 + x_2\sin(x_1 x_2) & x_1\sin(x_1 x_2) \\ 2\sin(x_1) & \cos(x_2) \end{bmatrix}$$

No `Scilab`, podemos implementá-las com o seguinte código:

```
function y=F(x)
    y(1) = x(1)^2-cos(x(1)*x(2))-1
    y(2) = sin(x(2))-2*cos(x(1))
endfunction

function y=JF(x)
    y(1,1) = 2*x(1)+x(2)*sin(x(1)*x(2))
    y(1,2) = x(1)*sin(x(1)*x(2))

    y(2,1) = 2*sin(x(1))
    y(2,2) = cos(x(2))
endfunction
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E agora, basta iterar:

```
x=[1.5; .5]
x=x-JF(x)\F(x) (5 vezes)
```

$\Diamond$

5.1.1 Código Scilab: Newton para Sistemas

```
function [x] = newton(F,JF,x0,TOL,N)
  x = x0
  k = 1
  //iteracoes
  while (k <= N)
    //iteracao de Newton
    delta = -inv(JF(x))*F(x)
    x = x + delta
    //criterio de parada
    if (norm(delta,'inf')<TOL) then
      return x
    end
    k = k+1
  end
  error('Num. de iter. max. atingido!')
endfunction
```

Exercícios

E 5.1.1. Encontre uma aproximação numérica para o seguinte problema não-linear de três equações e três incógnitas:

$$\begin{aligned} 2x_1 - x_2 &= \cos(x_1) \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 &= \cos(x_2) \\ -x_2 + x_3 &= \cos(x_3) \end{aligned}$$

Partindo das seguintes aproximações iniciais:

a) $x^{(0)} = [1,\ 1,\ 1]^T$

b) $x^{(0)} = [-0{,}5,\ -2,\ -3]^T$

c) $x^{(0)} = [-2,\ -3,\ -4]^T$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

d) $x^{(0)} = [0, 0, 0]^T$

5.2 Linearização de uma função de várias variáveis

5.2.1 O gradiente

Considere primeiramente uma função $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, ou seja, uma função que mapeia n variáveis reais em um único real, por exemplo:

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2/4$$

Para construirmos a linearização, fixemos uma direção no espaço $\mathbb{R}^n$, ou seja um vetor v:

$$v = [v_1, v_2, \cdots, v_n]^T$$

Queremos estudar como a função $f(x)$ varia quando "andamos" na direção v a partir do ponto $x^{(0)}$. Para tal, inserimos um parâmetro real pequeno h, dizemos que

$$x = x^{(0)} + hv$$

e definimos a função auxiliar

$$g(h) = f(x^0 + hv).$$

Observamos que a função $g(h)$ é uma função de $\mathbb{R}$ em $\mathbb{R}$.

A linearização de $g(h)$ em torno de $h = 0$ é dada por

$$g(h) = g(0) + hg'(0) + O(h^2)$$

Observamos que $g(h) = f(x^{(0)} + hv)$ e $g(0) = f(x^{(0)})$. Precisamos calcular $g'(0)$:

$$g'(h) = \frac{d}{dh}g(h) = \frac{d}{dh}f(x^{(0)} + hv)$$

Pela regra da cadeia temos:

$$\frac{d}{dh}f(x^{(0)} + hv) = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_j}\frac{dx_j}{dh}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Observamos que $x_j = x_j^{(0)} + hv_j$, portanto

$$\frac{dx_j}{dh} = v_j$$

Assim:

$$\frac{d}{dh} f(x^{(0)} + hv) = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_j} v_j$$

Observamos que esta expressão pode ser vista como o produto interno entre o gradiente de f e o vetor v:

$$\nabla f = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{bmatrix} \qquad v = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}$$

Na notação cálculo vetorial escrevemos este produto interno como $\nabla f \cdot v = v \cdot \nabla f$ na notação de produto matricial, escrevemos $(\nabla f)^T v = v^T \nabla f$. Esta quantidade é conhecida como **derivada direcional** de f no ponto $x^{(0)}$ na direção v, sobretudo quando $\|v\| = 1$.

Podemos escrever a linearização $g(h) = g(0) + hg'(0) + O(h^2)$ como

$$f(x^{(0)} + hv) = f(x^{(0)}) + h\nabla^T f(x^{(0)})\, v + O(h^2)$$

Finalmente, escrevemos $x = x^{(0)} + hv$, ou seja, $hv = x - x^{(0)}$

$$f(x) = f(x^{(0)}) + \nabla^T f(x^{(0)})\, (x - x^{(0)}) + O(\|x - x^{(0)}\|^2)$$

Observação 15. Observe a semelhança com a linearização no caso em uma dimensão. A notação $\nabla^T f(x^{(0)})$ é o transposto do vetor gradiente associado à função $f(x)$ no ponto $x^{(0)}$:

$$\nabla^T f(x^{(0)}) = \left[\frac{\partial f\left(x^{(0)}\right)}{\partial x_1}, \ \frac{\partial f\left(x^{(0)}\right)}{\partial x_2}, \ \cdots, \ \frac{\partial f\left(x^{(0)}\right)}{\partial x_n} \right]$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

5.2.2 A matriz jacobiana

Interessamo-nos, agora, pela linearização da função $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Lembramos que $F(x)$ pode ser escrita como um vetor de funções $f_j : \mathbb{R}^\times \to \mathbb{R}$:

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{bmatrix}$$

Linearizando cada uma das funções f_j, temos:

$$F(x) = \underbrace{\begin{bmatrix} f_1\left(x^{(0)}\right) + \nabla^T f_1(x^{(0)})\ \left(x - x^{(0)}\right) + O(\|x - x^{(0)}\|^2) \\ f_2\left(x^{(0)}\right) + \nabla^T f_2(x^{(0)})\ \left(x - x^{(0)}\right) + O(\|x - x^{(0)}\|^2) \\ \vdots \\ f_n\left(x^{(0)}\right) + \nabla^T f_n(x^{(0)})\ \left(x - x^{(0)}\right) + O(\|x - x^{(0)}\|^2) \end{bmatrix}}_{\text{Vetor coluna}}$$

ou, equivalentemente:

$$F(x) = \underbrace{\begin{bmatrix} f_1\left(x^{(0)}\right) \\ f_2\left(x^{(0)}\right) \\ \vdots \\ f_n\left(x^{(0)}\right) \end{bmatrix}}_{\text{Vetor coluna}} + \underbrace{\begin{bmatrix} \nabla^T f_1(x^{(0)}) \\ \nabla^T f_2(x^{(0)}) \\ \vdots \\ \nabla^T f_n(x^{(0)}) \end{bmatrix}}_{\text{Matriz jacobiana}} \underbrace{\left(x - x^{(0)}\right)}_{\text{Vetor coluna}} + O(\|x - x^{(0)}\|^2)$$

Podemos escrever a linearização de $F(x)$ na seguinte forma mais enxuta:

$$F(x) = F\left(x^{(0)}\right) + J_F(x^{(0)})\left(x - x^{(0)}\right) + O\left(\left\|x - x^{(0)}\right\|^2\right)$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

A matriz jacobiana J_F é matriz cujas linhas são os gradientes transpostos de f_j, ou seja:

$$J_F = \frac{\partial(f_1,f_2,\ldots,f_n)}{\partial(x_1,x_2,\ldots,x_n)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

A matriz jacobiana de uma função ou simplesmente, o Jacobiano de uma função $F(x)$ é a matriz formada pelas suas derivadas parciais:

$$(J_F)_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}$$

Exemplo 53. Calcule a matriz jacobiana da função

$$F(x) = \begin{bmatrix} \frac{x_1^2}{3} + x_2^2 - 1 \\ \\ x_1^2 + \frac{x_2^2}{4} - 1 \end{bmatrix}$$

$$J_F = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \\ \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2x_1}{3} & 2x_2 \\ \\ 2x_1 & \frac{x_2}{2} \end{bmatrix}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Capítulo 6

Aproximação de funções

O problema geral da interpolação pode ser definido da seguinte forma:

Seja $\mathcal{F}$ uma família de funções $f : D \to E$ e $\{(x_i,y_i)\}_{i=1}^{N}$ um conjunto de pares ordenados tais que $x_i \in D$ e $y_i \in E$, encontrar uma função f da família dada tal que $f(x_i) = y_i$ para cada $1 \leq i \leq N$.

Exemplo 54. Encontrar uma função $f(x)$ da forma $f(x) = ae^{bx}$ onde a e b são constantes tal que $f(1) = 1$ e $f(2) = 5$. Este problema equivale a resolver o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} ae^{b} &= 1 \\ ae^{2b} &= 5 \end{aligned}$$

Dividindo a segunda equação pela primeira, temos $e^b = 5$, logo, $b = \ln(5)$. Substituindo este valor em qualquer das equações, temos $a = \frac{1}{5}$. Assim

$$f(x) = \frac{1}{5}e^{\ln(5)x} = \frac{1}{5}5^x = 5^{x-1}.$$

Exemplo 55. Encontrar a função polinomial do tipo $f(x) = a+bx+cx^2$ que passe pelos pontos $(-1,2)$, $(0,1)$, $(1,6)$. Observamos que podemos encontrar os coeficientes a, b e c através do seguinte sistema linear:

$$\begin{aligned} a - b + c &= 2 \\ a &= 1 \\ a + b + c &= 6 \end{aligned}$$

cuja solução é dada por $a = 1$, $b = 2$ e $c = 3$. Portanto

$$f(x) = 1 + 2x + 3x^2.$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

6.1 Interpolação polinomial

Interpolação polinomial é o caso particular do problema geral de interpolação quando a família de funções é constituída de polinômios.

Teorema 3. *Seja* $\{(x_i,y_i)\}_{i=0}^{n}$ *um conjunto de* $n+1$ *pares ordenados de números reais tais que*

$$i \neq j \Longrightarrow x_i \neq x_j \qquad \textit{(i.e. as abscissas são distintas)}$$

então existe um único polinômio $P(x)$ *de grau igual ou inferior a* n *que passa por todos os pontos dados.*

Demonstração. Observamos que o problema de encontrar os coeficientes a_0, $a_1,\ldots,$ a_n do polinômio

$$P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots a_nx^n = \sum_{k=0}^{n} a_kx^k$$

tal que $P(x_i) = y_i$ é equivalente ao seguinte sistema linear de $n+1$ equações e $n+1$ incógnitas:

$$\begin{aligned} a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \cdots + a_nx_0^n &= y_0 \\ a_0 + a_1x_2 + a_2x_1^2 + \cdots + a_nx_1^n &= y_1 \\ &\vdots \\ a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \cdots + a_nx_n^n &= y_n \end{aligned}$$

que pode ser escrito na forma matricial como

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

A matriz envolvida é uma matriz de Vandermonde de ordem $n+1$ cujo determinante é dado por

$$\prod_{0\leq i<j\leq n} (x_j - x_i)$$

É fácil ver que se as abscissas são diferentes dois a dois, então o determinante é não-nulo. Disto decorre que o sistema possui um a solução e que esta solução é única. □

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 56. Encontre o polinômio da forma $P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$ que passa pelos pontos

$$(0,1),(1,2),(2,4),(3,8)$$

Este problema é equivalente ao seguinte sistema linear:

$$\begin{aligned} a_0 &= 1 \\ a_0 + a_1 + a_2 + a_3 &= 2 \\ a_0 + 2a_1 + 4a_2 + 8a_3 &= 4 \\ a_0 + 3a_1 + 9a_2 + 27a_3 &= 8 \end{aligned}$$

cuja solução é $a_0 = 1$, $a_1 = \frac{5}{6}$, $a_2 = 0$ e $a_3 = \frac{1}{6}$. Portanto

$$P(x) = 1 + \frac{5}{6}x + \frac{1}{6}x^3$$

Exemplo 57. Encontre o polinômio da forma $P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$ que passa pelos pontos

$$(0,0),(1,1),(2,4),(3,9)$$

Este problema é equivalente ao seguinte sistema linear:

$$\begin{aligned} a_0 &= 0 \\ a_0 + a_1 + a_2 + a_3 &= 1 \\ a_0 + 2a_1 + 4a_2 + 8a_3 &= 4 \\ a_0 + 3a_1 + 9a_2 + 27a_3 &= 9 \end{aligned}$$

cuja solução é $a_0 = 0$, $a_1 = 0$, $a_2 = 1$ e $a_3 = 0$. Portanto

$$P(x) = x^2$$

Esta abordagem direta que fizemos ao calcular os coeficientes do polinômio na base canônica se mostra ineficiente quando o número de pontos é grande e quando existe grande discrepância nas abscissas. Neste caso a matriz de Vandermonde é mal-condicionada (ver [5]), acarretando um aumento dos erros de arredondamento na solução do sistema.

Uma maneira de resolver este problema é escrever o polinômio em uma base que produza um sistema mais bem-condicionado.

6.2 Diferenças divididas de Newton

O método das diferenças divididas de Newton consistem em construir o polinômio interpolador da seguinte forma:

$$\begin{aligned} P(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots \\ + a_n(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1}). \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Assim, o problema de calcular os coeficientes a_0, a_1, ..., a_n é equivalente ao seguinte sistema linear:

$$\begin{aligned}
a_0 &= y_0 \\
a_0 + a_1(x_1 - x_0) &= y_1 \\
a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) &= y_2 \\
&\vdots \\
a_0 + a_1(x_n - x_0) + a_2(x_n - x_0)(x_n - x_1) + \cdots + a_n(x_n - x_0)\cdots(x_n - x_{n-1}) &= y_n
\end{aligned}$$

. O qual é equivalente à sua forma matricial:

$$\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
1 & (x_1 - x_0) & 0 & \cdots & 0 \\
1 & (x_2 - x_0) & (x_2 - x_0)(x_2 - x_1) & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
1 & (x_n - x_0) & (x_n - x_0)(x_n - x_1) & \cdots & (x_n - x_0)\cdots(x_n - x_{n-1})
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} =
\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

Este é um sistema triangular inferior que pode ser facilmente resolvido conforme:

$$\begin{aligned}
a_0 &= y_0 \\
a_1 &= \frac{y_1 - a_0}{x_1 - x_0} = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \\
a_2 &= \frac{y_2 - a_1(x_2 - x_0) - a_0}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{\frac{y_2 - y_1}{(x_2 - x_1)} - \frac{y_1 - y_0}{(x_1 - x_0)}}{(x_2 - x_0)} \\
&\cdots
\end{aligned}$$

A solução deste sistema pode ser escrita em termos das Diferenças Divididas de Newton, definidas recursivamente conforme:

$$\begin{aligned}
f[x_j] &= y_j \\
f[x_j, x_{j+1}] &= \frac{f[x_{j+1}] - f[x_j]}{x_{j+1} - x_j} \\
f[x_j, x_{j+1}, x_{j+2}] &= \frac{f[x_{j+1}, x_{j+2}] - f[x_j, x_{j+1}]}{x_{j+2} - x_j} \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Nesta notação, temos $a_k = f[x_0, x_1, x_2, \ldots, x_k]$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Podemos esquematizar o método na seguinte tabela:

j	x_j	$f[x_j]$	$f[x_{j-1},x_j]$	$f[x_{j-2},x_{j-1},x_j]$
0	x_0	$f[x_0]$		
			$f[x_0,x_1] = \frac{f[x_1]-f[x_0]}{x_1-x_0}$	
1	x_1	$f[x_1]$		$f[x_0,x_1,x_2] = \frac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0}$
			$f[x_1,x_2] = \frac{f[x_2]-f[x_1]}{x_2-x_1}$	
2	x_2	$f[x_2]$		

Exemplo 58. Encontrar o polinômio que passe pelos seguintes pontos

$$(-1,3),(0,1),(1,3),(3,43)$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

j	x_j	$f[x_j]$	$f[x_{j-1},x_j]$	$f[x_{j-2},x_{j-1},x_j]$	$f[x_{j-3},x_{j-2},x_{j-1},x_j]$
0	-1	3			
			$\frac{1-3}{0-(-1)} = -2$		
1	0	1		$\frac{2-(-2)}{1-(-1)} = 2$	
			$\frac{3-1}{1-0} = 2$		$\frac{6-2}{3-(-1)} = 1$
2	1	3		$\frac{20-2}{3-0} = 6$	
			$\frac{43-3}{3-1} = 20$		
3	3	43			

Portanto

$$\begin{aligned} P(x) &= 3 - 2(x+1) + 2(x+1)x + (x+1)x(x-1) \\ &= x^3 + 2x^2 - x + 1 \end{aligned}$$

Exercícios

E 6.2.1. Considere o seguinte conjunto de pontos:

$$(-2,-47),(0,-3),(1,4)(2,41)$$

. Encontre o polinômio interpolador usando os métodos vistos.

E 6.2.2. No `Scilab`, faça um gráfico com os pontos e o polinômio interpolador do Exercício 6.2.1.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

6.3 Polinômios de Lagrange

Outra maneira clássica de resolver o problema da interpolação polinomial é através do polinômios de Lagrange. Dado um conjunto de pontos $\{x_j\}_{j=1}^n$ distintos dois a dois, definimos os polinômios de Lagrange como os polinômios de grau $n-1$ que satisfazem as seguintes condições:

$$L_k(x_j) = \begin{cases} 1, & k = j \\ 0, & k \neq j \end{cases}$$

Assim, a solução do problema de encontrar os polinômios de grau $n-1$ tais $P(x_j) = y_j$,$j = 1, \cdots, n$ é dado por

$$P(x) = y_1 L_1(x) + y_2 L_2(x) + \cdots + y_n L_n(x) = \sum_{j=1}^{n} y_j L_j(x)$$

Para construir os polinômios de Lagrange, basta olhar para sua forma fatorada, ou seja:

$$L_k(x) = C_k \prod_{1 \leq j \neq k \leq n} (x - x_j)$$

onde o coeficiente C_k é obtido da condição $L_k(x_k) = 1$:

$$L_k(x_k) = C_k \prod_{1 \leq j \neq k \leq n} (x_k - x_j) \Longrightarrow C_k = \frac{1}{\prod_{1 \leq j \neq k \leq n} (x_k - x_j)}$$

Portanto,

$$L_k(x) = \prod_{1 \leq j \neq k \leq n} \frac{(x - x_j)}{(x_k - x_j)}$$

Observação 16. O problema de interpolação quando escrito usando como base os polinômios de Lagrange produz um sistema linear diagonal.

Exemplo 59. Encontre o polinômio da forma $P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$ que passa pelos pontos

(0,0),(1,1),(2,4),(3,9)

Escrevemos:

$$\begin{aligned} L_1(x) &= \frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(0-1)(0-2)(0-3)} = -\frac{1}{6}x^3 + x^2 - \frac{11}{6}x + 1 \\ L_2(x) &= \frac{x(x-2)(x-3)}{1(1-2)(1-3)} = \frac{1}{2}x^3 - \frac{5}{2}x^2 + 3x \\ L_3(x) &= \frac{x(x-1)(x-3)}{2(2-1)(2-3)} = -\frac{1}{2}x^3 + 2x^2 - \frac{3}{2}x \\ L_4(x) &= \frac{x(x-1)(x-2)}{3(3-1)(3-2)} = \frac{1}{6}x^3 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Assim temos:

$$P(x) = 0 \cdot L_1(x) + 1 \cdot L_2(x) + 4 \cdot L_3(x) + 9 \cdot L_4(x) = x^2$$

Exemplo 60. Encontre o polinômio da forma $P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$ que passa pelos pontos

$$(0,0),(1,1),(2,0),(3,1)$$

Como as abscissas são as mesmas do exemplo anterior, podemos utilizar os mesmos polinômios de Lagrange, assim temos:

$$P(x) = 0 \cdot L_1(x) + 1 \cdot L_2(x) + 0 \cdot L_3(x) + 1 \cdot L_4(x) = \frac{2}{3}x^3 - 3x^2 + \frac{10}{3}x$$

6.4 Aproximação de funções reais por polinômios interpoladores

Teorema 4. *Dados $n+1$ pontos distintos, x_0, x_1, $\cdots$, x_n, dentro de um intervalo $[a,b]$ e uma função f com $n+1$ derivadas contínuas nesse intervalo ($f \in C^{n+1}[a,b]$), então para cada x em $[a,b]$, existe um número $\xi(x)$ em (a,b) tal que*

$$f(x) = P(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n),$$

onde $P(x)$ é o polinômio interpolador. Em especial, pode-se dizer que

$$|f(x) - P(x)| \leq \frac{M}{(n+1)!}\left|(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)\right|,$$

onde

$$M = \max_{x\in[a,b]} |f^{(n+1)}(\xi(x))|$$

Exemplo 61. Considere a função $f(x) = \cos(x)$ e o polinômio $P(x)$ de grau 2 tal que $P(0) = \cos(0) = 1$, $P(\frac{1}{2}) = \cos(\frac{1}{2})$ e $P(1) = \cos(1)$. Use a fórmula de Lagrange para encontrar $P(x)$. Encontre o erro máximo que se assume ao aproximar o valor de $\cos(x)$ pelo de $P(x)$ no intervalo [0,1]. Trace os gráficos de $f(x)$ e $P(x)$ no intervalo [0,1] no mesmo plano cartesiano e, depois, trace o gráfico da diferença $\cos(x) - P(x)$. Encontre o erro efetivo máximo $|\cos(x) - P(x)|$.

$$\begin{aligned} P(x) &= 1\frac{(x-\frac{1}{2})(x-1)}{(0-\frac{1}{2})(0-1)} + \cos\left(\frac{1}{2}\right)\frac{(x-0)(x-1)}{(\frac{1}{2}-0)(\frac{1}{2}-1)} + \cos(1)\frac{(x-0)(x-\frac{1}{2})}{(1-0)(1-\frac{1}{2})} \\ &\approx 1 - 0{,}0299720583066x - 0{,}4297256358252x^2 \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
L1=poly([.5 1],'x');L1=L1/horner(L1,0)
L2=poly([0 1],'x');L2=L2/horner(L2,0.5)
L3=poly([0 .5],'x');L3=L3/horner(L3,1)
P=L1+cos(.5)*L2+cos(1)*L3
x=[0:.05:1]
plot(x,cos)
plot(x,horner(P,x),'red')
plot(x,horner(P,x)-cos(x))
```

Para encontrar o erro máximo, precisamos estimar $|f'''(x)| = |\sin(x)| \leq \sin(1) < 0{,}85$ e

$$\max_{x\in[0,1]} \left| x\left(x-\frac{1}{2}\right)(x-1)\right|$$

O polinômio de grau três $Q(x) = x\left(x-\frac{1}{2}\right)(x-1)$ tem um mínimo (negativo) em $x_1 = \frac{3+\sqrt{3}}{6}$ e um máximo (positivo) em $x_2 = \frac{3-\sqrt{3}}{6}$. Logo:

$$\max_{x\in[0,1]} \left| x\left(x-\frac{1}{2}\right)(x-1)\right| \leq \max\{|Q(x_1)|,\, |Q(x_2)|\} \approx 0{,}0481125.$$

Portanto:

$$|f(x) - P(x)| < \frac{0{,}85}{3!} 0{,}0481125 \approx 0{,}0068159 < 7\cdot 10^{-3}$$

Para encontrar o erro efetivo máximo, basta encontrar o máximo de $|P(x) - cos(x)|$. O mínimo (negativo) de $P(x) - cos(x)$ acontece em $x_1 = 4{,}29\cdot 10^{-3}$ e o máximo (positivo) acontece em $x_2 = 3{,}29\cdot 10^{-3}$. Portanto, o erro máximo efetivo é $4{,}29\cdot 10^{-3}$.

Exemplo 62. Considere o problema de aproximar o valor da integral $\int_0^1 f(x)dx$ pelo valor da integral do polinômio $P(x)$ que coincide com $f(x)$ nos pontos $x_0 = 0$, $x_1 = \frac{1}{2}$ e $x_2 = 1$. Use a fórmula de Lagrange para encontrar $P(x)$. Obtenha o valor de $\int_0^1 f(x)dx$ e encontre uma expressão para o erro de truncamento.

O polinômio interpolador de $f(x)$ é

$$\begin{aligned} P(x) &= f(0)\frac{(x-\frac{1}{2})(x-1)}{(0-\frac{1}{2})(0-1)} + f\left(\frac{1}{2}\right)\frac{(x-0)(x-1)}{(\frac{1}{2}-0)(\frac{1}{2}-1)} + f(1)\frac{(x-0)(x-\frac{1}{2})}{(1-0)(1-\frac{1}{2})} \\ &= f(0)(2x^2-3x+1) + f\left(\frac{1}{2}\right)(-4x^2+4x) + f(1)(2x^2-x) \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

e a integral de $P(x)$ é:

$$\begin{aligned}\int_0^1 P(x)dx &= \left[f(0)\left(\frac{2}{3}x^3-\frac{3}{2}x^2+x\right)\right]_0^1+\left[f\left(\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{4}{3}x^3+2x^2\right)\right]_0^1\\&+\left[f(1)\left(\frac{2}{3}x^3-\frac{1}{2}x^2\right)\right]_0^1\\&=f(0)\left(\frac{2}{3}-\frac{3}{2}+1\right)+f\left(\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{4}{3}+2\right)+f(1)\left(\frac{2}{3}-\frac{1}{2}\right)\\&=\frac{1}{6}f(0)+\frac{2}{3}f\left(\frac{1}{2}\right)+\frac{1}{6}f(1)\end{aligned}$$

Para fazer a estimativa de erro usando o teorema (4), e temos

$$\begin{aligned}\left|\int_0^1 f(x)dx-\int_0^1 P(x)dx\right| &= \left|\int_0^1 f(x)-P(x)dx\right|\\&\leq \int_0^1|f(x)-P(x)|dx\\&\leq \frac{M}{6}\int_0^1\left|x\left(x-\frac{1}{2}\right)(x-1)\right|dx\\&= \frac{M}{6}\left[\int_0^{1/2}x\left(x-\frac{1}{2}\right)(x-1)dx\right.\\&- \left.\int_{1/2}^1 x\left(x-\frac{1}{2}\right)(x-1)dx\right]\\&= \frac{M}{6}\left[\frac{1}{64}-\left(-\frac{1}{64}\right)\right]=\frac{M}{192}.\end{aligned}$$

Lembramos que $M=\max_{x\in[0,1]}|f'''(x)|$.

Observação 17. Existem estimativas melhores para o erro de truncamento para este esquema de integração numérica. Veremos com mais detalhes tais esquemas na teoria de integração numérica.

Exemplo 63. Use o resultado do exemplo anterior para aproximar o valor das seguintes integrais:

a) $\int_0^1 \ln(x+1)dx$

b) $\int_0^1 e^{-x^2}dx$

Solução. Usando a fórmula obtida, temos que

$$\int_0^1 \ln(x+1)dx \approx 0{,}39 \pm \frac{1}{96}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx 0{,}75 \pm \frac{3{,}87}{192}$$

$\Diamond$

Exercícios

E 6.4.1. Use as mesmas técnicas usadas o resultado do Exemplo (62) para obter uma aproximação do valor de:

$$\int_0^1 f(x)dx$$

através do polinômio interpolador que coincide com $f(x)$ nos pontos $x = 0$ e $x = 1$.

6.5 Ajuste de curvas pelo método dos mínimos quadrados

No problema de interpolação, desejamos encontrar uma função $f(x)$ tal que

$$f(x_j) = y_j$$

para um conjunto de pontos dados.

Existem diversas situações em que desejamos encontrar uma função que se aproxime desses pontos.

No problema de ajuste de curvas, busca-se a função $f(x)$ de família de funções dadas que melhor se aproxima de um conjunto de pontos dados. O critério mais usado para o ajuste é critério dos mínimos quadrados, ou seja, buscamos a função $f(x)$ da família que minimiza a soma dos erros elevados ao quadrado:

$$E_q = [f(x_1) - y_1]^2 + [f(x_2) - y_2]^2 + \cdots + [f(x_n) - y_n]^2 = \sum_{j=1}^{n} [f(x_j) - y_j]^2$$

Exemplo 64. Encontre a função do tipo $f(x) = ax$ que melhor se aproxima dos seguintes pontos:

$$(0, -0{,}1), (1,\ 2), (2,\ 3{,}7) \text{ e } (3,\ 7).$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

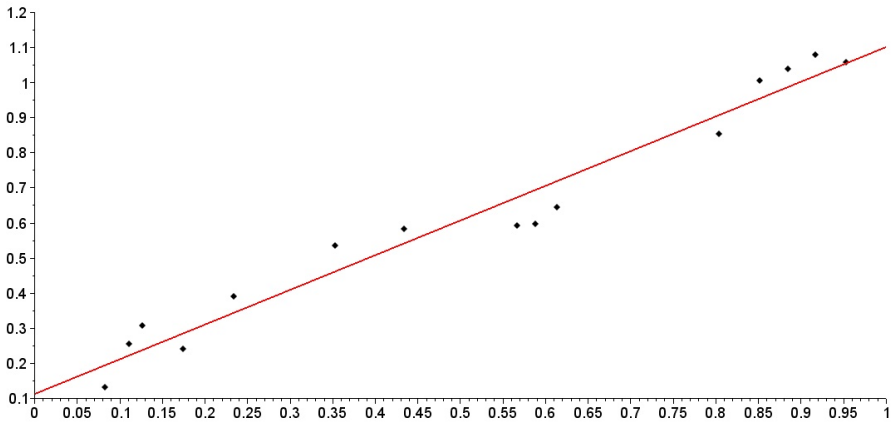


Figura 6.1: Conjunto de 15 pontos e a reta que melhor se ajuste a eles pelo critério do mínimos quadrados.

Solução. Defina

$$E_q = [f(x_1) - y_1]^2 + [f(x_2) - y_2]^2 + [f(x_3) - y_3]^2 + [f(x_4) - y_4]^2$$

temos que

$$\begin{aligned} E_q &= [f(0) + 0{,}1]^2 + [f(1) - 2]^2 + [f(2) - 3{,}7]^2 + [f(3) - 7]^2 \\ &= [0{,}1]^2 + [a - 2]^2 + [2a - 3{,}7]^2 + [3a - 7]^2 \end{aligned}$$

Devemos encontrar o parâmetro a que minimiza o erro, portanto, calculamos:

$$\frac{\partial E_q}{\partial a} = 2[a - 2] + 4[2a - 3{,}7] + 6[3a - 7] = 28a - 60{,}8$$

Portanto o valor de a que minimiza o erro é $a = \frac{60{,}8}{28}$.

```
x=[0 1 2 3]'
y=[-.1 2 3.7 7]'
plot2d(x,y,style=-4)
```

$\Diamond$

Exemplo 65. Encontre a função do tipo $f(x) = bx + a$ que melhor aproxima os pontos:

$$(0, -0{,}1), (1,\ 2), (2,\ 3{,}7) \text{ e } (3,\ 7).$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Solução.

$$\begin{aligned} E_q &= [f(0)+0{,}1]^2 + [f(1)-2]^2 + [f(2)-3{,}7]^2 + [f(3)-7]^2 \\ &= [a+0{,}1]^2 + [a+b-2]^2 + [a+2b-3{,}7]^2 + [a+3b-7]^2 \end{aligned}$$

Devemos encontrar os parâmetros a b que minimizam o erro, por isso, calculamos as derivadas parciais:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_q}{\partial a} &= 2[a+0{,}1] + 2[a+b-2] + 2[a+2b-3{,}7] + 2[a+3b-7] \\ \frac{\partial E_q}{\partial b} &= 2[a+b-2] + 4[a+2b-3{,}7] + 6[a+3b-7] \end{aligned}$$

O erro mínimo acontece quando as derivadas são nulas, ou seja:

$$\begin{aligned} 8a + 12b &= 25{,}2 \\ 12a + 28b &= 60{,}8 \end{aligned}$$

Cuja solução é dada por $a = -0{,}3$ e $b = 2{,}3$. Portanto a função que procuramos é $f(x) = -0{,}3 + 2{,}3x$. ◊

6.6 O caso linear

6.6.1 O método dos mínimos quadrados

Considere o sistema linear dado por $Ax = b$ onde A é uma matriz $n \times m$ e b é um vetor de n linhas. Assumimos as seguintes hipóteses:

- $n \geq m$. O número de linhas é igual ou superior ao número de colunas. (Mais equações que incógnitas)
- O posto de A é m, i.e., existem m linhas L.I. Isso implica que $Av = 0$ apenas quando $v = 0$

Neste caso, não seremos necessariamente capazes de encontrar um vetor x que satisfaça exatamente a equação $Ax = b$, pelo que estamos interessamos no problema de encontrar o vetor x (ordem m) que minimiza o erro quadrático dado por:

$$E := \sum_{i=1}^{n} [z_i - b_i]^2 \tag{6.1}$$

onde $z = Ax$ e z_i é linha i do vetor z, dado por:

$$z_i = (Ax)_i = \sum_{j=1}^{m} a_{ij} x_j, \quad i = 1, \cdots, n \tag{6.2}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

onde a_{ij} é o elemento de A na linha i e coluna j. Substituindo (6.2) em (6.1)

$$E := \sum_{i=1}^{n} \left[\sum_{j=1}^{m} a_{ij}x_j - b_i \right]^2 \tag{6.3}$$

Esta é uma função diferenciável nos coeficientes x_j e portanto todo ponto de mínimo acontece quando $\nabla E = 0$, ou seja, quando

$$\frac{\partial}{\partial x_l} E = 0, \forall 1 \leq l \leq m$$

O que implica a seguinte condição

$$0 = \frac{\partial}{\partial x_l} E = \sum_{i=1}^{n} 2 \left[\sum_{j=1}^{m} a_{ij}x_j - b_i \right] a_{il}, \quad l = 1, \cdots, m$$

Equivalente a

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} a_{il}x_j a_{ij} = \sum_{i=1}^{n} a_{il}b_i, \quad l = 1, \cdots, m$$

que pode ser reescrito na forma vetorial como:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} a_{i1}x_j a_{ij} \\ \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} a_{i2}x_j a_{ij} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} a_{im}x_j a_{ij} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} a_{i1}b_i \\ \sum_{i=1}^{n} a_{i2}b_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} a_{im}b_i \end{bmatrix} \tag{6.4}$$

Observamos agora que a expressão (6.4) é equivalente ao seguinte problema matricial:

$$\boxed{A^T Ax = A^T b} \tag{6.5}$$

Teorema 5. *A matriz $M = A^T A$ é quadrada de ordem m e é invertível sempre que o posto da matriz A é igual a número de colunas m.*

Demonstração. Para provar que M é invertível precisamos mostrar que $Mv = 0$ implica $v = 0$:

$$Mv = 0 \Longrightarrow A^T Av = 0$$

tomando o produto interno da expressão $0 = A^T Av$ com v, temos:

$$0 = \left\langle A^T Av, v \right\rangle = \langle Av, Av \rangle = \|Av\|^2$$

Então se $Mv = 0$ $Av = 0$, como o posto de A é igual ao número de colunas, $v = 0$. □

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Outra propriedade importante é que M é simétrica, ou seja, $M = M^T$. Isso é facilmente provado pelo seguinte argumento:

$$M^T = (A^T A)^T = (A)^T (A^T)^T = A^T A = M$$

6.6.2 Ajuste linear de curvas

Seja $f_1(x), f_2(x), \ldots, f_m(x)$ um conjunto de m funções e $(x_1,y_1), (x_2,y_2), \ldots, (x_n,y_n)$ um conjunto de n pontos. Procuram-se os coeficientes $a_1,a_2, \ldots, a_m$ tais que a função dada por

$$f(x) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + \ldots + a_m f_m(x)$$

minimiza o erro dado por

$$E_q = \sum_{i=1}^{n} [f(x_i) - y_i]^2$$

como $f(x) = \sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x)$, temos

$$E_q = \sum_{i=1}^{n} \left[\sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x_i) - y_i \right]^2$$

Este problema é equivalente a resolver pelo métodos dos mínimos quadrados o seguinte sistema linear:

$$\begin{bmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \cdots & f_m(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \cdots & f_m(x_2) \\ f_1(x_3) & f_2(x_3) & \cdots & f_m(x_3) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(x_n) & f_2(x_n) & \cdots & f_m(x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

Exemplo 66. Encontre a reta que melhor aproxima o seguinte conjunto de dados:

x_i	y_i
0,01	1,99
1,02	4,55
2,04	7,20
2,95	9,51
3,55	10,82

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Solução. Desejamos então encontrar os valores de a e b tais que a função $f(x) = ax + b$ melhor se ajusta aos pontos da tabela. Afim de usar o critério dos mínimos quadrados, escrevemos o problema na forma matricial dada por:

$$\begin{bmatrix} 0{,}01 & 1 \\ 1{,}02 & 1 \\ 2{,}04 & 1 \\ 2{,}95 & 1 \\ 3{,}55 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1{,}99 \\ 4{,}55 \\ 7{,}2 \\ 9{,}51 \\ 10{,}82 \end{bmatrix}$$

Multiplicamos agora ambos os lados pela transposta:

$$\begin{bmatrix} 0{,}01 & 1{,}02 & 2{,}04 & 2{,}95 & 3{,}55 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

o que fornece:

$$\begin{bmatrix} 0{,}01 & 1{,}02 & 2{,}04 & 2{,}95 & 3{,}55 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0{,}01 & 1 \\ 1{,}02 & 1 \\ 2{,}04 & 1 \\ 2{,}95 & 1 \\ 3{,}55 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 0{,}01 & 1{,}02 & 2{,}04 & 2{,}95 & 3{,}55 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1{,}99 \\ 4{,}55 \\ 7{,}2 \\ 9{,}51 \\ 10{,}82 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 26{,}5071 & 9{,}57 \\ 9{,}57 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 85{,}8144 \\ 34{,}07 \end{bmatrix}$$

A solução desse sistema é $a = 2{,}5157653$ e $b = 1{,}9988251$
A tabela abaixo mostra os valores dados e os valores ajustados:

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

x_i	y_i	$ax_i + b$	$ax_i + b - y_i$
0,01	1,99	2,0239828	0,0339828
1,02	4,55	4,5649057	0,0149057
2,04	7,2	7,1309863	−0,0690137
2,95	9,51	9,4203327	−0,0896673
3,55	10,82	10,929792	0,1097919

$\Diamond$

Exercícios

E 6.6.1. Encontrar a parábola $y = ax^2 + bx + c$ que melhor aproxima o seguinte conjunto de dados:

x_i	y_i
0,01	1,99
1,02	4,55
2,04	7,2
2,95	9,51
3,55	10,82

e complete a tabela:

x_i	y_i	$ax_i^2 + bx_i + c$	$ax_i^2 + bx_i + c - y_i$
0,01	1,99		
1,02	4,55		
2,04	7,20		
2,95	9,51		
3,55	10,82		

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 6.6.2. Dado o seguinte conjunto de dados

x_i	y_i
0,0	31
0,1	35
0,2	37
0,3	33
0,4	28
0,5	20
0,6	16
0,7	15
0,8	18
0,9	23
1,0	31

- Encontre a função do tipo $f(x) = a+b\sin(2\pi x)+c\cos(2\pi x)$ que melhor aproxima os valores dados.
- Encontre a função do tipo $f(x) = a+bx+cx^2+dx^3$ que melhor aproxima os valores dados.

6.7 Aproximando problemas não lineares por problemas lineares

Eventualmente, problemas de ajuste de curvas podem recair num sistema não linear. Por exemplo, se desejamos ajustar a função $y = Ae^{bx}$ ao conjunto de pontos (x_0,y_0), (x_1,y_1) e (x_2,y_2), temos que minimizar o funcional

$$E_q = (Ae^{x_0 b} - y_0)^2 + (Ae^{x_1 b} - y_1)^2 + (Ae^{x_2 b} - y_2)^2$$

ou seja, resolver o sistema

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_q}{\partial A} &= 2(Ae^{x_0 b} - y_0)e^{x_0 b} + 2(Ae^{x_1 b} - y_1)e^{x_1 b} + 2(Ae^{x_2 b} - y_2)e^{x_2 b} = 0 \\
\frac{\partial E_q}{\partial b} &= 2Ax_0(Ae^{x_0 b} - y_0)e^{x_0 b} + 2Ax_1(Ae^{x_1 b} - y_1)e^{x_1 b} \\
&\quad + 2x_2 A(Ae^{x_2 b} - y_2)e^{x_2 b} = 0
\end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

que é não linear em A e b. Esse sistema pode ser resolvido pelo método de Newton-Raphson, o que pode se tornar custoso, ou mesmo inviável quando não dispomos de uma boa aproximação da solução para inicializar o método.

Felizmente, algumas famílias de curvas admitem uma transformação que nos leva a um problema linear. No caso da curva $y = Ae^{bx}$, observe que $\ln y = \ln A + bx$. Assim, em vez de ajustar a curva original $y = Ae^{bx}$ a tabela de pontos, ajustamos a curva submetida a transformação logarítmica

$$z = \ln A + bx := B + bx.$$

Usamos os três pontos $(x_0, \ln y_0) := (x_0, \tilde{y}_0)$, $(x_1, \ln y_1) := (x_1, \tilde{y}_1)$ e $(x_2, \ln y_2) := (x_2, \tilde{y}_2)$ e resolvemos o sistema linear

$$A^T A \begin{bmatrix} B \\ b \end{bmatrix} = A^T \begin{bmatrix} \tilde{y}_0 \\ \tilde{y}_1 \\ \tilde{y}_2 \end{bmatrix},$$

onde

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_0 \\ 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \end{bmatrix}$$

Exemplo 67. Encontre uma curva da forma $y = Ae^x$ que melhor ajusta os pontos (1,2), (2,3) e (3,5).

Temos

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$$

e a solução do sistema leva em $B = 0{,}217442$ e $b = 0{,}458145$. Portanto, $A = e^{0{,}217442} = 1{,}24289$.

Observação 18. Os coeficientes obtidos a partir dessa linearização são aproximados, ou seja, são diferentes daqueles obtidos quando aplicamos mínimos quadrados não linear. Observe que estamos minimizando $\sum_i [\ln y_i - \ln(f(x_i))]^2$ em vez de $\sum_i [y_i - f(x_i)]^2$. No exemplo resolvido, a solução do sistema não linear original seria $A = 1{,}19789$ e $B = 0{,}474348$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Observação 19. Mesmo quando se deseja resolver o sistema não linear, a solução do problema linearizado pode ser usada para construir condições iniciais.

A próxima tabela apresenta algumas curvas e transformações que linearizam o problema de ajuste.

curva	transformação	problema linearizado
$y = ae^{bx}$	$Y = \ln y$	$Y = \ln a + bx$
$y = ax^b$	$Y = \ln y$	$Y = \ln a + b \ln x$
$y = ax^b e^{cx}$	$Y = \ln y$	$Y = \ln a + b \ln x + cx$
$y = ae^{(b+cx)^2}$	$Y = \ln y$	$Y = \ln a + b^2 + bcx + c^2x^2$
$y = \frac{a}{b+x}$	$Y = \frac{1}{y}$	$Y = \frac{b}{a} + \frac{1}{a}x$
$y = A\cos(\omega x + \phi)$ ω conhecido	–	$y = a\cos(\omega x) - b\sin(\omega x)$, $a = A\cos(\phi)$, $b = A\sin(\phi)$

Exemplo 68. Encontre a função f da forma $y = f(x) = A\cos(2\pi x + \phi)$ que ajusta a tabela de pontos

x_i	y_i
0,0	9,12
0,1	1,42
0,2	- 7,76
0,3	- 11,13
0,4	- 11,6
0,5	- 6,44
0,6	1,41
0,7	11,01
0,8	14,73
0,9	13,22
1,0	9,93

Solução. Usando o fato que $y = A\cos(2\pi x + \phi) = a\cos(2\pi x) - b\sin(2\pi x)$,

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

onde $a = A\cos(\phi)$ e $b = A\sin(\phi)$, $z = [\ a \quad b\ ]^T$ é solução do problema

$$B^T B z = B^T y,$$

onde

$$B = \begin{bmatrix} \cos(2\pi x_0) & -\sin(2\pi x_0) \\ \cos(2\pi x_1) & -\sin(2\pi x_1) \\ \vdots & \\ \cos(2\pi x_{10}) & -\sin(2\pi x_{10}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1. & 0. \\ 0{,}8090170 & -0{,}5877853 \\ 0{,}3090170 & -0{,}9510565 \\ -0{,}3090170 & -0{,}9510565 \\ -0{,}8090170 & -0{,}5877853 \\ -1{,}0000000 & 0{,}0000000 \\ -0{,}8090170 & 0{,}5877853 \\ -0{,}3090170 & 0{,}9510565 \\ 0{,}3090170 & 0{,}9510565 \\ 0{,}8090170 & 0{,}5877853 \\ 1{,}0000000 & 0{,}0000000 \end{bmatrix}.$$

Assim, $a = 7{,}9614704$ e $b = 11{,}405721$ e obtemos o seguinte sistema:

$$\begin{cases} A\cos(\phi) = 7{,}9614704 \\ A\sin(\phi) = 11{,}405721 \end{cases}.$$

Observe que

$$A^2 = 7{,}9614704^2 + 11{,}405721^2$$

e, escolhendo $A > 0$, $A = 13{,}909546$ e

$$\sin(\phi) = \frac{11{,}405721}{13{,}909546} = 0{,}8199923$$

Assim, como $\cos\phi$ também é positivo, ϕ é um ângulo do primeiro quadrante:

$$\phi = 0{,}9613976$$

Portanto $f(x) = 13{,}909546\cos(2\pi x + 0{,}9613976)$. Observe que nesse exemplo a solução do problema linear é a mesma do problema não linear. $\Diamond$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 69. Encontre a função f da forma $y = f(x) = \frac{a}{b+x}$ que ajusta a tabela de pontos

x_i	y_i
0,0	101
0,2	85
0,4	75
0,6	66
0,8	60
1,0	55

usando uma das transformações tabeladas.

Solução. Usando o fato que $Y = \frac{1}{y} = \frac{b}{a} + \frac{1}{a}x$, $z = \begin{bmatrix} \frac{b}{a} & \frac{1}{a} \end{bmatrix}^T$ é solução do problema

$$A^T A z = A^T Y,$$

onde

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \\ 1 & x_4 \\ 1 & x_5 \\ 1 & x_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0{,}0 \\ 1 & 0{,}2 \\ 1 & 0{,}4 \\ 1 & 0{,}6 \\ 1 & 0{,}8 \\ 1 & 1{,}0 \end{bmatrix}$$

e

$$Y = \begin{bmatrix} 1/y_1 \\ 1/y_2 \\ 1/y_3 \\ 1/y_4 \\ 1/y_5 \\ 1/y_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0{,}0099010 \\ 0{,}0117647 \\ 0{,}0133333 \\ 0{,}0151515 \\ 0{,}0166667 \\ 0{,}0181818 \end{bmatrix}$$

Assim, $\frac{1}{a} = 0{,}0082755$ e $\frac{b}{a} = 0{,}0100288$ e, então, $a = 120{,}83924$ e $b = 1{,}2118696$, ou seja, $f(x) = \frac{120{,}83924}{1{,}2118696+x}$. $\Diamond$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

6.8 Interpolação linear segmentada

Considere o conjunto $(x_i,y_i)_{j=1}^{n}$ de n pontos. Assumiremos que $x_{i+1} > x_i$, ou seja, as abscissas são distintas e estão em ordem crescente. A função linear que interpola os pontos x_i e x_{i+1} no intervalo i é dada por

$$P_i(x) = y_i \frac{(x_{i+1} - x)}{(x_{i+1} - x_i)} + y_{i+1} \frac{(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_i)}$$

O resultado da interpolação linear segmentada é a seguinte função contínua definida por partes no intervalo $[x_1,x_n]$:

$$f(x) = P_i(x), \quad x \in [x_i,x_{i+1}]$$

Exemplo 70. Construa uma função linear por partes que interpola os pontos (0,0), (1,4), (2,3), (3,0), (4,2), (5,0).

A função procurada pode ser construída da seguinte forma:

$$f(x) = \begin{cases} 0\frac{x-1}{0-1} + 1\frac{x-0}{1-0} & , 0 \leq x < 1 \\ 4\frac{x-2}{1-2} + 3\frac{x-1}{2-1} & , 1 \leq x < 2 \\ 3\frac{x-3}{2-3} + 0\frac{x-2}{3-2} & , 2 \leq x \leq 3 \end{cases}$$

Simplificando, obtemos:

$$f(x) = \begin{cases} x & , 0 \leq x < 1 \\ -x + 5 & , 1 \leq x < 2 \\ -3x + 9 & , 2 \leq x \leq 3 \end{cases}$$

A Figura 6.2 é um esboço da função $f(x)$ obtida. Ela foi gerada no `Scilab` usando os comandos:

```
//pontos fornecidos
xi = [0;1;2;3;4;5]
yi = [0;4;3;0;2;0]
//numero de pontos
n = 6
//funcao interpoladora
function [y] = f(x)
  for i=1:n-2
    if ((x>=xi(i)) & (x<xi(i+1))) then
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
      y = yi(i)*(x-xi(i+1))/(xi(i) - xi(i+1)) ...
          + yi(i+1)*(x-xi(i))/(xi(i+1) - xi(i));
    end
  end

  if ((x>=xi(n-1)) & (x<=xi(n))) then
    y = yi(n-1)*(x-xi(n))/(xi(n-1) - xi(n)) ...
        + yi(n)*(x-xi(n-1))/(xi(n) - xi(n-1));
  end
endfunction
//graficando
xx = linspace(xi(1),xi(n),500)';
clear yy
for i=1:max(size(xx))
  yy(i) = f(xx(i))
end
plot(xi,yi,'r.',xx,yy,'b-')
```

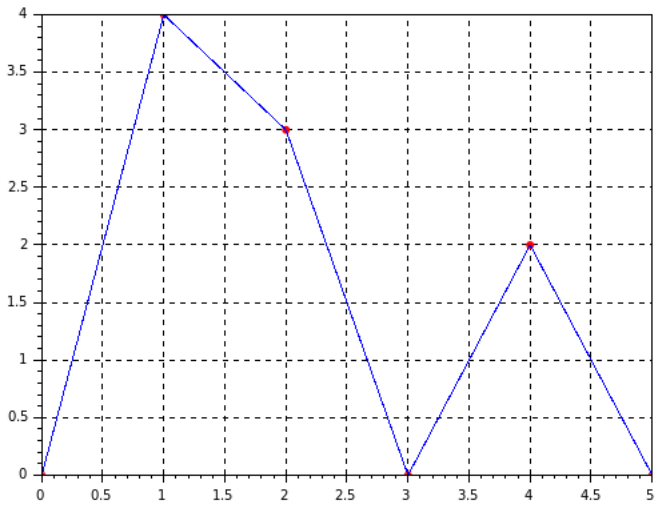


Figura 6.2: Interpolação linear segmentada.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

6.9 Interpolação cúbica segmentada - spline

Dado um conjunto de n pontos $(x_j,y_j)_{j=1}^n$ tais que $x_{j+1} > x_j$, ou seja, as abscissas são distintas e estão em ordem crescente; um spline cúbico que interpola estes pontos é uma função $s(x)$ com as seguintes propriedades:

i Em cada segmento $[x_j,x_{j+1}]$, $j = 1,2,\ldots n-1$ $s(x)$ é um polinômio cúbico.

ii para cada ponto, $s(x_j) = y_j$, i.e., o spline interpola os pontos dados.

iii $s(x) \in C^2$, i.e., é função duas vezes continuamente diferenciável.

Da primeira hipótese, escrevemos

$$s(x) = s_j(x), x \in [x_j,x_{j+1}], \;\; j = 1,\ldots,n-1$$

com

$$s_j(x) = a_j + b_j(x - x_j) + c_j(x - x_j)^2 + d_j(x - x_j)^3$$

O problema agora consiste em obter os 4 coeficientes de cada um desses $n-1$ polinômios cúbicos.

Veremos que a simples definição de spline produz $4n-6$ equações linearmente independentes:

$$\begin{aligned}
s_j(x_j) &= y_j, & j &= 1,\ldots,n-1\\
s_j(x_{j+1}) &= y_{j+1}, & j &= 1,\ldots,n-1\\
s'_j(x_{j+1}) &= s'_{j+1}(x_{j+1}), & j &= 1,\ldots,n-2\\
s''_j(x_{j+1}) &= s''_{j+1}(x_{j+1}), & j &= 1,\ldots,n-2
\end{aligned}$$

Como

$$s'_j(x) = b_j + 2c_j(x - x_j) + 3d_j(x - x_j)^2 \tag{6.6}$$

e

$$s''_j(x) = 2c_j + 6d_j(x - x_j), \tag{6.7}$$

temos, para $j = 1,\ldots,n-1$, as seguintes equações

$$\begin{aligned}
a_j &= y_j,\\
a_j + b_j(x_{j+1} - x_j) + c_j(x_{j+1} - x_j)^2 + d_j(x_{j+1} - x_j)^3 &= y_{j+1},\\
b_j + 2c_j(x_{j+1} - x_j) + 3d_j(x_{j+1} - x_j)^2 &= b_{j+1},\\
c_j + 3d_j(x_{j+1} - x_j) &= c_{j+1},
\end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Por simplicidade, definimos

$$h_j = x_{j+1} - x_j$$

e temos

$$\begin{aligned} a_j &= y_j, \\ a_j + b_j h_j + c_j h_j^2 + d_j h_j^3 &= y_{j+1}, \\ b_j + 2c_j h_j + 3d_j h_j^2 &= b_{j+1}, \\ c_j + 3d_j h_j &= c_{j+1}, \end{aligned}$$

que podem ser escrita da seguinte maneira

$$a_j = y_j, \tag{6.8}$$

$$d_j = \frac{c_{j+1} - c_j}{3h_j}, \tag{6.9}$$

$$\begin{aligned} b_j &= \frac{y_{j+1} - y_j - c_j h_j^2 - \frac{c_{j+1}-c_j}{3h_j} h_j^3}{h_j}, \\ &= \frac{3y_{j+1} - 3y_j - 3c_j h_j^2 - c_{j+1} h_j^2 + c_j h_j^2}{3h_j} \\ &= \frac{3y_{j+1} - 3y_j - 2c_j h_j^2 - c_{j+1} h_j^2}{3h_j} \end{aligned} \tag{6.10}$$

Trocando o índice j por $j-1$ na terceira equação (6.8), $j = 2, \ldots, n-1$

$$b_{j-1} + 2c_{j-1} h_{j-1} + 3d_{j-1} h_{j-1}^2 = b_j \tag{6.11}$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} \frac{3y_j - 3y_{j-1} - 2c_{j-1} h_{j-1}^2 - c_j h_{j-1}^2}{3h_{j-1}} + 2c_{j-1} h_{j-1} + c_j h_{j-1} - c_{j-1} h_{j-1} \\ = \frac{3y_{j+1} - 3y_j - 2c_j h_j^2 - c_{j+1} h_j^2}{3h_j}. \end{aligned} \tag{6.12}$$

Fazendo as simplificações, obtemos:

$$c_{j-1} h_{j-1} + c_j (2h_j + 2h_{j-1}) + c_{j+1} h_j = 3\frac{y_{j+1} - y_j}{h_j} - 3\frac{y_j - y_{j-1}}{h_{j-1}}. \tag{6.13}$$

É costumeiro acrescentar a incógnita c_n ao sistema. A incógnita c_n não está relacionada a nenhum dos polinômios interpoladores. Ela é uma construção

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

artificial que facilita o cálculo dos coeficientes do spline. Portanto, a equação acima pode ser resolvida para $j = 2, \ldots, n-1$.

Para determinar unicamente os n coeficientes c_n precisamos acrescentar duas equações linearmente independentes às $n-2$ equações dadas por (6.13). Essas duas equações adicionais definem o tipo de spline usado.

6.9.1 Spline natural

Uma forma de definir as duas equações adicionais para completar o sistema (6.13) é impor condições de fronteira livres (ou naturais), ou seja,

$$S''(x_1) = S''(x_n) = 0. \tag{6.14}$$

Substituindo na equação (6.7)

$$s_1''(x_1) = 2c_1 + 6d_1(x_1 - x_1) = 0 \Longrightarrow c_1 = 0.$$

e

$$s_{n-1}''(x_n) = 2c_{n-1} + 6d_{n-1}(x_n - x_{n-1}) = 0.$$

Usando o fato que

$$c_{n-1} + 3d_{n-1}h_{n-1} = c_n$$

temos que

$$c_n = -3d_{n-1}(x_n - x_{n-1}) + 3d_{n-1}h_{n-1} = 0.$$

Essa duas equações para c_1 e c_n juntamente com as equações (6.13) formam um sistema de n equações $Ac = z$, onde

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ h_1 & 2h_2 + 2h_1 & h_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & h_2 & 2h_3 + 2h_2 & h_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{n-2} & 2h_{n-2} + 2h_{n-1} & h_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{6.15}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

$$c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \qquad \text{e} \qquad z = \begin{bmatrix} 0 \\ 3\frac{y_3-y_2}{h_2} - 3\frac{y_2-y_1}{h_1} \\ 3\frac{y_4-y_3}{h_3} - 3\frac{y_3-y_2}{h_2} \\ \vdots \\ 3\frac{y_{n-1}-y_{n-2}}{h_{n-2}} - 3\frac{y_{n-2}-y_{n-3}}{h_{n-3}} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{6.16}$$

Observe que a matriz A é diagonal dominante estrita e, portanto, o sistema $Ac = z$ possui solução única. Calculado c, os valores dos a_n, b_n e d_n são obtidos diretamente pelas expressões (6.8), (6.10) e (6.9), respectivamente.

Exemplo 71. Construa um spline cúbico natural que passe pelos pontos (2, 4,5), (5, − 1,9), (9, 0,5) e (12, − 0,5).

Solução. O spline desejado é uma função definida por partes da forma:

$$f(x) = \begin{cases} a_1 + b_1(x-2) + c_1(x-2)^2 + d_1(x-2)^3 & , 2 \leq x < 5 \\ a_2 + b_2(x-5) + c_2(x-5)^2 + d_2(x-5)^3 & , 5 \leq x < 9 \\ a_3 + b_3(x-9) + c_3(x-9)^2 + d_3(x-9)^3 & , 9 \leq x \leq 12 \end{cases} . \tag{6.17}$$

Os coeficientes c_1, c_2 e c_3 resolvem o sistema $Ac = z$, onde

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 2\cdot 3 + 2\cdot 4 & 4 & 0 \\ 0 & 4 & 2\cdot 4 + 2\cdot 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 14 & 4 & 0 \\ 0 & 4 & 14 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} \qquad \text{e} \qquad z = \begin{bmatrix} 0 \\ 3\frac{0,5-(-1,9)}{4} - 3\frac{(-1,9)-4,5}{3} \\ 3\frac{-0,5-0,5}{3} - 3\frac{0,5-(-1,9)}{4} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 8,2 \\ -2,8 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Observe que c_4 é um coeficiente artificial para o problema. A solução é $c_1 = 0$, $c_2 = 0,7$, $c_3 = -0,4$ e $c_4 = 0$. Calculamos os demais coeficientes usando as

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

expressões (6.8), (6.10) e (6.9):

$$\begin{aligned} a_1 &= y_1 = 4{,}5 \\ a_2 &= y_2 = -1{,}9 \\ a_3 &= y_3 = 0{,}5 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_1 &= \frac{c_2 - c_1}{3h_1} = \frac{0{,}7 - 0}{3 \cdot 3} = 0{,}0777778 \\ d_2 &= \frac{c_3 - c_2}{3h_2} = \frac{-0{,}4 - 0{,}7}{3 \cdot 4} = -0{,}0916667 \\ d_3 &= \frac{c_4 - c_3}{3h_3} = \frac{0 + 0{,}4}{3 \cdot 3} = 0{,}0444444 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{y_2 - y_1}{h_1} - \frac{h_1}{3}(2c_1 + c_2) \\ &= \frac{-1{,}9 - 4{,}5}{3} - \frac{3}{3}(2 \cdot 0 - 0{,}7) = -2{,}8333333 \\ b_2 &= \frac{y_3 - y_2}{h_2} - \frac{h_2}{3}(2c_2 + c_3) \\ &= \frac{0{,}5 - (-1{,}9)}{4} - \frac{4}{3}(2 \cdot 0{,}7 + 0{,}4) = -0{,}7333333 \\ b_3 &= \frac{y_4 - y_3}{h_3} - \frac{h_3}{3}(2c_3 + c_4) \\ &= \frac{-0{,}5 - 0{,}5}{3} - \frac{3}{3}(2 \cdot (-0{,}4) + 0) = 0{,}4666667 \end{aligned}$$

Portanto:

$$f(x) = \begin{cases} 4{,}5 - 2{,}833(x-2) + 0{,}078(x-2)^3 & , 2 \leq x < 5 \\ -1{,}9 - 0{,}733(x-5) + 0{,}7(x-5)^2 - 0{,}092(x-5)^3 & , 5 \leq x < 9 \\ 0{,}5 + 0{,}467(x-9) - 0{,}4(x-9)^2 + 0{,}044(x-9)^3 & , 9 \leq x \leq 12 \end{cases}$$

No `Scilab`, podemos utilizar:

```
X = [2 5 9 12]'
Y = [4.5 -1.9 0.5 -0.5]'
h = X(2:4)-X(1:3)
A = [1 0 0 0;h(1) 2*h(1)+2*h(2) h(2) 0; ...
   0 h(2) 2*h(2)+2*h(3) h(3);0 0 0 1 ]
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
z = [0, 3*(Y(3)-Y(2))/h(2)-3*(Y(2)-Y(1))/h(1), ...
   3*(Y(4)-Y(3))/h(3)-3*(Y(3)-Y(2))/h(2), 0]'
c = A\z
for i=1:3
   a(i) = Y(i)
   d(i) = (c(i+1)-c(i))/(3*h(i))
   b(i) = (Y(i+1)-Y(i))/h(i)-h(i)/3*(2*c(i)+c(i+1))
end

for i=1:3
    P(i) = poly([a(i) b(i) c(i) d(i)],'x','coeff')
    z = [X(i):.01:X(i+1)]
    plot(z,horner(P(i),z-X(i)))
end
```

$\Diamond$

6.9.2 Spline fixado

Alternativamente, para completar o sistema (6.13), podemos impor condições de contorno fixadas, ou seja,

$$\begin{aligned} S'(x_1) &= f'(x_1) \\ S'(x_n) &= f'(x_n). \end{aligned}$$

Substituindo na equação (6.6)

$$s_1'(x_1) = b_1 + 2c_1(x_1 - x_1) + 3d_j(x_1 - x_1)^2 = f'(x_1) \Longrightarrow b_1 = f'(x_1) \quad (6.18)$$

e

$$\begin{aligned} s_{n-1}'(x_n) &= b_{n-1} + 2c_{n-1}(x_n - x_{n-1}) + 3d_j(x_n - x_{n-1})^2 \\ &= b_{n-1} + 2c_{n-1}h_{n-1} + 3d_{n-1}h_{n-1}^2 = f'(x_n) \end{aligned} \quad (6.19)$$

Usando as equações (6.9) e (6.10) para $j = 1$ e $j = n - 1$, temos:

$$2c_1h_1 + c_2h_1 = 3\frac{y_2 - y_1}{h_1} - 3f'(x_1) \quad (6.20)$$

e

$$c_{n-1}h_{n-1} + c_nh_{n-1} = 3f'(x_n) - 3\frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} \quad (6.21)$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Essas duas equações juntamente com as equações (6.13) formam um sistema de n equações $Ac = z$, onde

$$A = \begin{bmatrix} 2h_1 & h_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ h_1 & 2h_2+2h_1 & h_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & h_2 & 2h_3+2h_2 & h_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{n-2} & 2h_{n-2}+2h_{n-1} & h_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{n-1} & 2h_{n-1} \end{bmatrix}$$

$$c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad z = \begin{bmatrix} 3\frac{y_2-y_1}{h_1} - 3f'(x_1) \\ 3\frac{y_3-y_2}{h_2} - 3\frac{y_2-y_1}{h_1} \\ 3\frac{y_4-y_3}{h_3} - 3\frac{y_3-y_2}{h_2} \\ \vdots \\ 3\frac{y_{n-1}-y_{n-2}}{h_{n-2}} - 3\frac{y_{n-2}-y_{n-3}}{h_{n-3}} \\ 3f'(x_n) - 3\frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}} \end{bmatrix}$$

Observe que a matriz A é diagonal dominante estrita e, portanto, o sistema $Ac = z$ possui solução única. Calculado c, os valores dos a_n, b_n e d_n são obtidos diretamente pelas expressões (6.8), (6.10) e (6.9), respectivamente.

Exemplo 72. Construa um spline cúbico com fronteira fixada que interpola a função $y = \sin(x)$ nos pontos $x = 0$, $x = \frac{\pi}{2}$, $x = \pi$, $x = \frac{3\pi}{2}$ e $x = 2\pi$.

O spline desejado passa pelos pontos (0,0), (π/2,1), (π,0), ($3\pi/2, -1$) e (2π,0) e tem a forma:

$$f(x) = \begin{cases} a_1 + b_1x + c_1x^2 + d_1x^3 & , 0 \le x < \frac{\pi}{2} \\ a_2 + b_2(x-\frac{\pi}{2}) + c_2(x-\frac{\pi}{2})^2 + d_2(x-\frac{\pi}{2})^3 & , \frac{\pi}{2} \le x < \pi \\ a_3 + b_3(x-\pi) + c_3(x-\pi)^2 + d_3(x-\pi)^3 & , \pi \le x < \frac{3\pi}{2} \\ a_4 + b_4(x-\frac{3\pi}{2}) + c_4(x-\frac{3\pi}{2})^2 + d_4(x-\frac{3\pi}{2})^3 & , \frac{3\pi}{2} \le x \le 2\pi \end{cases}.$$

Observe que ele satisfaz as condição de contorno $f'(0) = cos(0) = 1$ e $f'(2\pi) = cos(2\pi) = 1$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Os coeficientes c_1, c_2, c_3 e c_4 resolvem o sistema $Ac = z$, onde:

$$A = \begin{bmatrix} \pi & \pi/2 & 0 & 0 & 0 \\ \pi/2 & 2\pi & \pi/2 & 0 & 0 \\ 0 & \pi/2 & 2\pi & \pi/2 & 0 \\ 0 & 0 & \pi/2 & 2\pi & \pi/2 \\ 0 & 0 & 0 & \pi/2 & \pi \end{bmatrix}$$

$$c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad z = \begin{bmatrix} 3\frac{1-0}{\pi/2} - 3 \cdot 1 \\ 3\frac{0-1}{\pi/2} - 3\frac{1-0}{\pi/2} \\ 3\frac{-1-0}{\pi/2} - 3\frac{0-1}{\pi/2} \\ 3\frac{0-(-1)}{\pi/2} - 3\frac{(-1)-0}{\pi/2} \\ 3 \cdot 1 - 3\frac{0-(-1)}{\pi/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6/\pi - 3 \\ -12/\pi \\ 0 \\ 12/\pi \\ 3 - 6/\pi \end{bmatrix}$$

Aqui c_5 é um coeficiente artificial para o problema. A solução é $c_1 = -0{,}0491874$, $c_2 = -0{,}5956302$, $c_3 = 0$, $c_4 = 0{,}5956302$ e $c_5 = 0{,}0491874$. Calculamos os demais coeficientes usando as expressões (6.8), (6.10) e (6.9):

$$\begin{aligned} a_1 &= y_1 = 0 \\ a_2 &= y_2 = 1 \\ a_3 &= y_3 = 0 \\ a_4 &= y_3 = -1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_1 &= \frac{c_2 - c_1}{3h_1} = \frac{-0{,}5956302 - (-0{,}0491874)}{3 \cdot \pi/2} = -0{,}1159588 \\ d_2 &= \frac{c_3 - c_2}{3h_2} = \frac{0 - (-0{,}5956302)}{3 \cdot \pi/2} = 0{,}1263967 \\ d_3 &= \frac{c_4 - c_3}{3h_3} = \frac{0{,}5956302 - 0}{3 \cdot \pi/2} = 0{,}1263967 \\ d_4 &= \frac{c_5 - c_4}{3h_4} = \frac{0{,}0491874 - 0{,}5956302}{3 \cdot \pi/2} = -0{,}1159588 \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

$$
\begin{aligned}
b_1 &= \frac{y_2 - y_1}{h_1} - \frac{h_1}{3}(2c_1 + c_2) \\
&= \frac{1-0}{\pi/2} - \frac{\pi/2}{3}(2 \cdot (-0{,}0491874) - 0{,}5956302) = 1 \\
b_2 &= \frac{y_3 - y_2}{h_2} - \frac{h_2}{3}(2c_2 + c_3) \\
&= \frac{0-1}{\pi/2} - \frac{\pi/2}{3}(2 \cdot (-0{,}5956302) + 0) = -0{,}0128772 \\
b_3 &= \frac{y_4 - y_3}{h_3} - \frac{h_3}{3}(2c_3 + c_4) \\
&= \frac{-1-0}{\pi/2} - \frac{\pi/2}{3}(2 \cdot 0 + 0{,}5956302) = -0{,}9484910 \\
b_4 &= \frac{y_5 - y_4}{h_4} - \frac{h_4}{3}(2c_4 + c_5) \\
&= \frac{0-(-1)}{\pi/2} - \frac{\pi/2}{3}(2 \cdot 0{,}5956302 + 0{,}0491874) = -0{,}0128772
\end{aligned}
$$

Portanto,

$$
f(x) = \begin{cases}
x - 0{,}049x^2 - 0{,}12x^3 & , 0 \leq x < \frac{\pi}{2} \\
1 + -0{,}01(x - \frac{\pi}{2}) - 0{,}6(x - \frac{\pi}{2})^2 + 0{,}13(x - \frac{\pi}{2})^3 & , \frac{\pi}{2} \leq x < \pi \\
-0{,}95(x - \pi) + 0{,}13(x - \pi)^3 & , \pi \leq x < \frac{3\pi}{2} \\
-1 - 0{,}01(x - \frac{3\pi}{2}) + 0{,}6(x - \frac{3\pi}{2})^2 - 0{,}12(x - \frac{3\pi}{2})^3 & , \frac{3\pi}{2} \leq x \leq 2\pi
\end{cases}
$$

No `Scilab`, podemos resolver este problema fazendo:

```
//limpa memoria
clear A, B, a, b, c, d
//pontos fornecidos
xi = [0; %pi/2; %pi; 3*%pi/2; 2*%pi]
yi = sin(xi)
//numero de pontos
n = 5
disp('Pontos fornecidos:')
disp([xi, yi])
//vetor h
h = xi(2:n) - xi(1:n-1);
//matriz A
for i=1:n
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
    for j=1:n
        if ((j==1) & (i==1)) then
            A(i,j) = 2*h(1);
        elseif (j == i-1) then
            A(i,j) = h(i-1);
        elseif ((i>1) & (i<n) & (i==j)) then
            A(i,j) = 2*(h(i) + h(i-1));
        elseif (j==i+1) then
            A(i,j) = h(i);
        elseif ((j==n) & (i==n)) then
            A(i,j) = 2*h(n-1);
        else
            A(i,j) = 0;
        end
    end
end
disp('Matriz A:')
disp(A)
//vetor z
for i=1:n
  if ((i==1)) then
    z(i) = 3*(yi(2)-yi(1))/h(1) - 3*cos(xi(1));
  elseif ((i>1) & (i < n)) then
    z(i) = 3*(yi(i+1)-yi(i))/h(i) ...
           - 3*(yi(i) - yi(i-1))/h(i-1);
  elseif (i == n) then
    z(i) = 3*cos(xi(n)) - 3*(yi(n) - yi(n-1))/h(n-1);
  end
end
disp('Vetor z:')
disp(z)
//coeficientes c
c = inv(A)*z
disp('Coeficientes c:')
disp(c)
//coeficientes a
a = yi(1:n-1);
disp('Coeficientes a:')
disp(a)
//coeficientes b
for j=1:n-1
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
  b(j) = (3*yi(j+1) - 3*yi(j) - 2*c(j)*h(j)^2 ...
  - c(j+1)*h(j)^2)/(3*h(j));
end
disp('Coeficientes b:')
disp(b)
//coeficientes d
for j=1:n-1
  d(j) = (c(j+1) - c(j))/(3*h(j));
end
disp('Coeficientes d:')
disp(d)
//spline cubico obtido
function [y] = s(x)
  for i=1:n-2
    if ((x>=xi(i)) & (x<xi(i+1))) then
      y = a(i) + b(i)*(x-xi(i)) ...
          + c(i)*(x-xi(i))^2 + d(i)*(x-xi(i))^3;
    end
  end
  if ((x>=xi(n-1)) & (x<=xi(n))) then
    y = a(n-1) + b(n-1)*(x-xi(n-1)) ...
        + c(n-1)*(x-xi(n-1))^2 + d(n-1)*(x-xi(n-1))^3;
  end
endfunction
```

Resumo sobre Splines

Dado um conjunto de pontos (x_i,y_i), $i = 1,2,\ldots,n$, um spline cúbico é a seguinte função definida por partes:

$$s(x)=\begin{cases} a_1+b_1(x-x_1)+c_1(x-x_1)^2+d_1(x-x_1)^3 & ,x_1 \le x < x_2 \\ a_2+b_2(x-x_2)+c_2(x-x_2)^2+d_2(x-x_2)^3 & ,x_2 \le x < x_3 \\ \vdots & \vdots \\ a_{n-1}+b_{n-1}(x-x_{n-1})+c_{n-1}(x-x_{n-1})^2+d_{n-1}(x-x_{n-1})^3 & ,x_{n-1} \le x \le x_n \end{cases}$$

Definindo-se $h_j = x_{j+1} - x_j$, os coeficientes c_j, $j = 1,2,\ldots,n$, são solução

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

do sistema linear $Ac = z$, onde:

Spline Natural $s_1''(x_1) = 0$ e $s_{n-1}''(x_n) = 0$	Spline Fixado $s_1'(x_1) = f'(x_1)$ e $s_{n-1}'(x_n) = f'(x_n)$
$a_{i,j} = \begin{cases} 1 & ,j = i = 1 \\ h_{i-1} & ,j = i-1, i < n \\ 2(h_i + h_{i-1}) & ,j = i, 1 < i < n \\ h_i & ,j = i+1, i > 1 \\ 1 & ,j = i = n \\ 0 & ,\text{caso contrário.} \end{cases}$	$a_{i,j} = \begin{cases} 2h_1 & ,j = i = 1 \\ h_{i-1} & ,j = i-1 \\ 2(h_i + h_{i-1}) & ,j = i, 1 < i < n \\ h_i & ,j = i+1 \\ 2h_{n-1} & ,j = i = n \\ 0 & ,\text{caso contrário.} \end{cases}$
$z_i = \begin{cases} 0 & ,i = 1 \\ 3\frac{y_{i+1}-y_i}{h_i} - 3\frac{y_i-y_{i-1}}{h_{i-1}} & ,1 < i < n \\ 0 & ,i = n \end{cases}$	$z_i = \begin{cases} 3\frac{y_2-y_1}{h_1} - 3f'(x_1) & ,i = 1 \\ 3\frac{y_{i+1}-y_i}{h_i} - 3\frac{y_i-y_{i-1}}{h_{i-1}} & ,1 < i < n \\ 3f'(x_n) - 3\frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}} & ,i = n \end{cases}$

os coeficientes a_j, b_j e d_j, $j = 1,2,\ldots,n-1$, são calculados conforme segue:

$$a_j = y_j$$
$$b_j = \frac{3y_{j+1} - 3y_j - 2c_j h_j^2 - c_{j+1} h_j^2}{3h_j}$$
$$d_j = \frac{c_{j+1} - c_j}{3h_j}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Capítulo 7

Derivação e integração numérica

7.1 Derivação Numérica

Dado um conjunto de pontos $(x_i,y_i)_{i=1}^n$, a derivada $\left(\frac{dy}{dx}\right)_i$ pode ser calculada de várias formas. Na próxima seção trabalharemos com diferenças finitas, que é mais adequada quando as abcissas estão próximas e os dados não sofrem perturbações significativas. Na seção subsequente trataremos os casos quando os dados oscilam via ajuste ou interpolações de curvas.

7.1.1 Aproximação da derivada por diferenças finitas

A derivada $f'(x_0)$ de uma função $f(x)$ no ponto x_0 é

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

Da definição, se $h \neq 0$ é pequeno (não muito pequeno para evitar o cancelamento catastrófico), é esperado que uma aproximação para a derivada no ponto x_0 seja dada por:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}. \tag{7.1}$$

Exemplo 73. Calcule a derivada numérica da função $f(x) = \cos(x)$ no ponto $x = 1$ usando $h = 0{,}1$, $h = 0{,}01$, $h = 0{,}001$ e $h = 0{,}0001$.

Solução. Usando a fórmula de diferenças dada pela Equação (7.1), devemos calcular:

$$f'(x) \approx \frac{cos(1+h) - cos(1)}{h}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

para cada valor de h solicitado. Fazendo isso, obtemos a seguinte tabela:

h	$\frac{f(1+h)-f(1)}{h}$
0,1	$\frac{0{,}4535961-0{,}5403023}{0{,}1}=-0{,}8670618$
0,01	$\frac{0{,}5318607-0{,}5403023}{0{,}01}=-0{,}8441584$
0,001	$\frac{0{,}5403023-0{,}5403023}{0{,}001}=-0{,}841741$
0,0001	$\frac{0{,}5403023-0{,}5403023}{0{,}0001}=-0{,}841498$

No `Scilab`, podemos calcular a aproximação da derivada $f'(1)$ com $h = 0{,}1$ usando as seguintes linhas de código:

```
deff('y = f(x)','y = cos(x)')
x0 = 1
h = 0.1
dp = (f(x0+h) - f(x0))/h
```

E, similarmente, para outros valores de x_0 e h. ♢

Observe que, no exemplo anterior, quanto menor h, melhor é a aproximação, visto que o valor exato para a derivada é $f'(1) = -\sin(1) = -0{,}8414710$. Porém, quando $h = 10^{-13}$, a derivada numérica é $-0{,}8404388$ (usando aritmética `double`), resultado pior que aquele para $h = 0{,}0001$. Além disso, na mesma aritmética, quando $h = 10^{-16}$ a derivada numérica calculada é zero (cancelamento catastrófico). Isso nos motiva a pensar qual é o melhor h.

Essa aproximação para a derivada é denominada diferenças progressivas. A derivada numérica também pode ser aproximada usando definições equivalentes:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}$$

que é denominada diferenças regressivas ou

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

que é denominada diferenças centrais.

Exemplo 74. Calcule a derivada numérica da função $f(x) = \cos(x)$ no ponto $x = 1$ usando diferenças progressivas, diferenças regressivas e diferenças centrais com $h = 0{,}1$, $h = 0{,}01$ e $h = 0{,}001$.

Solução. A tabela abaixo mostra a derivada numérica para cada valor de h.

Diferenças	h=0,1
Progressivas	$-0{,}8670618$
Regressivas	$\frac{\cos(1) - \cos(0{,}9)}{0{,}1} = -0{,}8130766$
Centrais	$\frac{\cos(1{,}1) - \cos(0{,}9)}{0{,}2} = -0{,}8400692$
Diferenças	h=0,01
Progressivas	$-0{,}8441584$
Regressivas	$\frac{\cos(1) - \cos(0{,}99)}{0{,}01} = -0{,}8387555$
Centrais	$\frac{\cos(1{,}01) - \cos(0{,}99)}{0{,}02} = -0{,}8414570$
Diferenças	h=0,01
Progressivas	$-0{,}841741$
Regressivas	$\frac{\cos(1) - \cos(0{,}999)}{0{,}001} = -0{,}8412007$
Centrais	$\frac{\cos(1{,}001) - \cos(0{,}999)}{0{,}002} = -0{,}8414708$

$\Diamond$

7.1.2 Erros de truncamento

Seja $D_{+,h}f(x_0)$ a aproximação da derivada de f em x_0 por diferenças progressivas, $D_{-,h}f(x_0)$ a aproximação por diferenças regressivas e $D_{0,h}f(x_0)$ a aproximação por diferenças centrais, então

$$\begin{aligned} D_{+,h}f(x_0) - f'(x_0) &= \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} - f'(x_0) \\ &= \frac{f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + O(h^3) - f(x_0)}{h} - f'(x_0) \\ &= \frac{h}{2}f''(x_0) + O(h^2) = O(h). \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Analogamente:

$$\begin{aligned} D_{-,h}f(x_0) - f'(x_0) &= \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} - f'(x_0) \\ &= \frac{f(x_0) - \left(f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + O(h^3)\right)}{h} - f'(x_0) \\ &= -\frac{h}{2}f''(x_0) + O(h^2) = O(h). \end{aligned}$$

Também:

$$\begin{aligned} D_{0,h}f(x_0) - f'(x_0) &= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} - f'(x_0) \\ &= \frac{f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + O(h^3)}{2h} \\ &\quad - \frac{f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + O(h^3)}{2h} - f'(x_0) \\ &= O(h^2). \end{aligned}$$

Exemplo 75. Calcule a derivada numérica e o erro de truncamento de $f(x) = e^{-x}$ em $x = 1{,}5$ pela fórmula de diferença progressiva para $h = 0{,}1$, $h = 0{,}01$ e $h = 0{,}001$.

Solução. Como $|f''(x)| = |e^{-x}| < 1$, então $|f'_+(x_0) - f'(x_0)| < \frac{h}{2}$.

h	diferenças progressivas	erro $= \frac{h}{2}$
0,1	−0,2123364	0,05
0,01	−0,2220182	0,005
0,001	−0,2230186	0,0005

O valor exato da derivada é $f'(1{,}5) = -0{,}2231302$. ◊

7.1.3 Erros de arredondamento

Para entender como os erros de arredondamento se propagam ao calcular as derivadas numéricas vamos considerar o operador de diferenças finitas progressivas

$$D_{+,h}f(x) = \frac{f(x + h) - f(x)}{h}.$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Nesse contexto temos o valor exato $f'(x)$ para a derivada, a sua aproximação numérica $D_{+,h}f(x)$ e a representação em número de máquina do operador $D_{+,h}f(x)$ que denotaremos por $\overline{D_{+,h}f(x)}$. Seja $\varepsilon(x,h)$ o erro de arredondamento ao calcularmos a derivada e consideremos

$$\overline{D_{+,h}f(x)} = D_{+,h}f(x)(1+\varepsilon(x,h)) = \frac{\overline{f(x+h)} - \overline{f(x)}}{h}(1+\varepsilon(x,h)).$$

Também, consideremos

$$|\overline{f(x+h)} - f(x+h)| = \delta(x,h) \leq \delta$$

e

$$|\overline{f(x)} - f(x)| = \delta(x,0) \leq \delta,$$

onde $\overline{f(x+h)}$ e $\overline{f(x)}$ são as representação em ponto flutuante dos números $f(x+h)$ e $f(x)$, respectivamente. A diferença do valor da derivada e sua aproximação representada em ponto flutuante pode ser estimada da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\left|f'(x) - \overline{D_{+,h}f(x)}\right| &= \left|f'(x) - \frac{\overline{f(x+h)} - \overline{f(x)}}{h}(1+\varepsilon(x,h))\right| \\
&= \left|f'(x) - \left(\frac{\overline{f(x+h)} - \overline{f(x)}}{h} + \frac{f(x+h) - f(x+h)}{h}\right.\right. \\
&+ \left.\left.\frac{f(x) - f(x)}{h}\right)(1+\varepsilon)\right| \\
&= \left|f'(x) + \left(-\frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{\overline{f(x+h)} - f(x+h)}{h}\right.\right. \\
&+ \left.\left.\frac{\overline{f(x)} - f(x)}{h}\right)(1+\varepsilon)\right| \\
&\leq \left|f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h}\right| + \left(\left|\frac{\overline{f(x+h)} - f(x+h)}{h}\right|\right. \\
&+ \left.\left|\frac{\overline{f(x)} - f(x)}{h}\right|\right)|1+\varepsilon| + \left|\frac{f(x+h) - f(x)}{h}\right|\varepsilon \\
&\leq Mh + \left(\left|\frac{\delta}{h}\right| + \left|\frac{\delta}{h}\right|\right)|1+\varepsilon| + |f'(x)|\varepsilon \\
&\leq Mh + \left(\frac{2\delta}{h}\right)|1+\varepsilon| + |f'(x)|\varepsilon
\end{aligned}$$

onde

$$M = \frac{1}{2}\max_{x\leq y\leq x+h}|f''(y)|$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

está relacionado com o erro de truncamento.

Esta estimativa mostra que se o valor de h for muito pequeno o erro ao calcular a aproximação numérica cresce. Isso nos motiva a procurar o valor ótimo de h que minimiza o erro.

Exemplo 76. Estude o comportamento da derivada de $f(x) = e^{-x^2}$ no ponto $x = 1{,}5$ quando h fica pequeno.

Solução. Segue a tabela com os valores da derivada para vários valores de h.

h	10^{-2}	10^{-4}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}
$D_{+,h}f(1{,}5)$	$-0{,}3125246$	$-0{,}3161608$	$-0{,}3161973$	$-0{,}3161976$	$-0{,}3161977$	$-0{,}3161977$

h	10^{-10}	10^{-11}	10^{-12}	10^{-13}	10^{-14}	10^{-15}
$D_{+,h}f(1{,}5)$	$-0{,}3161976$	$-0{,}3161971$	$-0{,}3162332$	$-0{,}3158585$	$-0{,}3178013$	$-0{,}3747003$

h	10^{-2}	10^{-4}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}
$D_{+,h}f(1{,}5)$	$-0{,}3125246$	$-0{,}3161608$	$-0{,}3161973$	$-0{,}3161976$	$-0{,}3161977$	$-0{,}3161977$

Observe que o valor exato é $-0{,}3161977$ e o h ótimo é algo entre 10^{-8} e 10^{-9}. ◊

7.1.4 Aproximações de alta ordem

Para aproximar a derivada de uma função $f(x)$ em x_0, x_1 ou x_2 usaremos os três pontos vizinhos $(x_0,f(x_0))$, $(x_1,f(x_1))$ e $(x_2,f(x_2))$. Uma interpolação usando polinômios de Lagrange para esses três pontos é da forma:

$$\begin{aligned} f(x) = {} & f(x_0)\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1)\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \\ & + f(x_2)\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} + \frac{f'''(\xi(x))}{6}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2). \end{aligned}$$

A derivada de $f(x)$ é

$$\begin{aligned} f'(x) = {} & f(x_0)\frac{2x-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1)\frac{2x-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \\ & + f(x_2)\frac{2x-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \\ & + \frac{f'''(\xi(x))}{6}\left((x-x_1)(x-x_2)+(x-x_0)(2x-x_1-x_2)\right) \\ & + D_x\left(\frac{f'''(\xi(x))}{6}\right)(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2). \end{aligned} \tag{7.2}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Trocando x por x_0, temos

$$\begin{aligned} f'(x_0) = & f(x_0)\frac{2x_0 - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + f(x_1)\frac{2x_0 - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \\ & + f(x_2)\frac{2x_0 - x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\ & + \frac{f'''(\xi(x_0))}{6}\left((x_0 - x_1)(x_0 - x_2) + (x_0 - x_0)(2x_0 - x_1 - x_2)\right) \\ & + D_x\left(\frac{f'''(\xi(x_0))}{6}\right)(x_0 - x_0)(x_0 - x_1)(x_0 - x_2). \end{aligned}$$

Considerando uma malha equiespaçada onde $x_1 = x_0 + h$ e $x_2 = x_0 + 2h$, temos:

$$\begin{aligned} f'(x_0) = & f(x_0)\frac{-3h}{(-h)(-2h)} + f(x_1)\frac{-2h}{(h)(-h)} \\ & + f(x_2)\frac{-h}{(2h)(h)} + \frac{f'''(\xi(x_0))}{6}\left((-h)(-2h)\right) \\ = & \frac{1}{h}\left[-\frac{3}{2}f(x_0) + 2f(x_1) - \frac{1}{2}f(x_2)\right] + h^2\frac{f'''(\xi(x_0))}{3} \end{aligned}$$

Similarmente, trocando x por x_1 ou trocando x por x_2 na expressão (7.2), temos outras duas expressões

$$\begin{aligned} f'(x_1) &= \frac{1}{h}\left[-\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_2)\right] + h^2\frac{f'''(\xi(x_1))}{6} \\ f'(x_2) &= \frac{1}{h}\left[\frac{1}{2}f(x_0) - 2f(x_1) + \frac{3}{2}f(x_2)\right] + h^2\frac{f'''(\xi(x_2))}{3} \end{aligned}$$

Podemos reescrever as três fórmulas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= \frac{1}{h}\left[-\frac{3}{2}f(x_0) + 2f(x_0 + h) - \frac{1}{2}f(x_0 + 2h)\right] + h^2\frac{f'''(\xi(x_0))}{3} \\ f'(x_0 + h) &= \frac{1}{h}\left[-\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_0 + 2h)\right] + h^2\frac{f'''(\xi(x_0 + h))}{6} \\ f'(x_0 + 2h) &= \frac{1}{h}\left[\frac{1}{2}f(x_0) - 2f(x_0 + h) + \frac{3}{2}f(x_0 + 2h)\right] + h^2\frac{f'''(\xi(x_0 + 2h))}{3} \end{aligned}$$

ou ainda

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)\right] + h^2\frac{f'''(\xi(x_0))}{3} \quad (7.3)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[f(x_0 + h) - f(x_0 - h)\right] + h^2\frac{f'''(\xi(x_0))}{6} \quad (7.4)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[f(x_0 - 2h) - 4f(x_0 - h) + 3f(x_0)\right] + h^2\frac{f'''(\xi(x_0))}{3} \quad (7.5)$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Observe que uma das fórmulas é exatamente as diferenças centrais obtida anteriormente.

Analogamente, para construir as fórmulas de cinco pontos tomamos o polinômio de Lagrange para cinco pontos e chegamos a cinco fórmulas, sendo uma delas a seguinte:

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}\left[f(x_0-2h) - 8f(x_0-h) + 8f(x_0+h) - f(x_0+2h)\right] + \frac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi(x_0)) \tag{7.6}$$

Exemplo 77. Calcule a derivada numérica de $f(x) = e^{-x^2}$ em $x = 1{,}5$ pela fórmula de três e cinco pontos para $h = 0{,}1$, $h = 0{,}01$ e $h = 0{,}001$.

Solução. A tabela mostra os resultados:

h	$h = 0{,}1$	$h = 0{,}01$	$h = 0{,}001$
diferenças progressivas	$-0{,}2809448$	$-0{,}3125246$	$-0{,}3158289$
diferenças regressivas	$-0{,}3545920$	$-0{,}3199024$	$-0{,}3165667$
três pontos usando (7.3)	$-0{,}3127746$	$-0{,}3161657$	$-0{,}3161974$
três pontos usando (7.4)	$-0{,}3177684$	$-0{,}3162135$	$-0{,}3161978$
três pontos usando (7.5)	$-0{,}3135824$	$-0{,}3161665$	$-0{,}3161974$
cinco pontos usando (7.6)	$-0{,}3162384$	$-0{,}316197677$	$-0{,}3161976736860$

O valor exato da derivada é $f'(1{,}5) = -0{,}3161976736856$. ◊

7.1.5 Aproximação para a segunda derivada

Para aproximar a derivada segunda, considere as expansões em série de Taylor

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

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

Somando as duas expressões, temos:

$$f(x_0+h) + f(x_0-h) = 2f(x_0) + h^2f''(x_0) + O(h^4)$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

ou seja, uma aproximação de segunda ordem para a derivada segunda em x_0 é

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0+h) - 2f(x_0) + f(x_0-h)}{h^2} + O(h^2) := D^2_{0,h} f(x_0) + O(h^2),$$

onde

$$D^2_{0,h} f(x_0) = \frac{f(x_0+h) - 2f(x_0) + f(x_0-h)}{h^2}.$$

Exemplo 78. Calcule a derivada segunda numérica de $f(x) = e^{-x^2}$ em $x = 1{,}5$ para $h = 0{,}1$, $h = 0{,}01$ e $h = 0{,}001$.

Solução. A tabela mostra os resultados:

h	$h = 0{,}1$	$h = 0{,}01$	$h = 0{,}001$
$D^2_{0,h} f(1{,}5)$	0,7364712	0,7377814	0,7377944

Observe que $f''(x) = (4x^2 - 2)e^{-x^2}$ e $f''(1{,}5) = 0{,}7377946$. ◊

7.1.6 Derivada via ajuste ou interpolação

Dado os valores de uma função em pontos $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$, as derivadas $\left(\frac{dy}{dx}\right)_i$ podem ser obtidas através da derivada de uma curva que melhor ajusta ou interpola os pontos. Esse tipo de técnica é necessário quando os pontos são muito espaçados entre si ou quando a função oscila muito. Por exemplo, dado os pontos (0,1), (1,2), (2,5), (3,9), a parábola que melhor ajusta os pontos é

$$Q(x) = 0{,}95 + 0{,}45x + 0{,}75x^2.$$

Usando esse ajuste para calcular as derivadas, temos:

$$Q'(x) = 0{,}45 + 1{,}5x$$

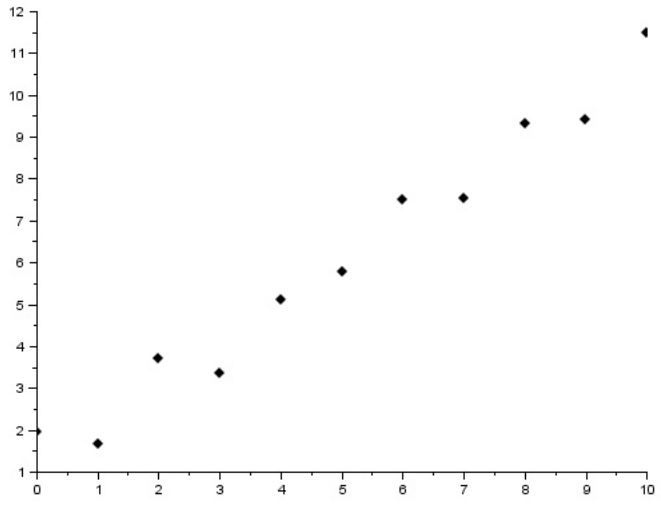
e

$$y'(x_1) \approx Q'(x_1) = 0{,}45, \qquad y'(x_2) \approx Q'(x_2) = 1{,}95,$$
$$y'(x_3) \approx Q'(x_3) = 3{,}45 \qquad \text{e} \qquad y'(x_4) \approx Q'(x_4) = 4{,}95$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Agora olhe o gráfico da seguinte tabela de pontos.

x	y
0	1,95
1	1,67
2	3,71
3	3,37
4	5,12
5	5,79
6	7,50
7	7,55
8	9,33
9	9,41
10	11,48



Observe que as derivadas calculadas por diferenças finitas oscilam entre um valor pequeno e um grande em cada intervalo e além disso, a fórmula progressiva difere da regressiva significantemente. Por exemplo, por

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

diferenças regressivas $f'(7) \approx \frac{(7{,}55-7{,}50)}{1} = 0{,}05$ e por diferenças progressivas $f'(7) \approx \frac{(9{,}33-7{,}55)}{1} = 1{,}78$. A melhor forma de calcular a derivada aqui é fazer um ajuste de curva. A reta que melhor ajusta os dados da tabela é $y = f(x) = 1{,}2522727 + 0{,}9655455x$. Usando esse ajuste, temos $f'(7) \approx 0{,}9655455$.

Exercícios

E 7.1.1. Expanda a função suave $f(x)$ em um polinômio de Taylor adequado para obter as seguintes aproximações:

a) $f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} + O(h)$

b) $f'(x) = \frac{f(x)-f(x-h)}{h} + O(h)$

c) $f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} + O(h^2)$

d) $f''(x) = \frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2} + O(h^2)$

E 7.1.2. Use os esquemas numéricos do exercício 7.1.1 para aproximar as seguintes derivadas:

a) $f'(x)$ onde $f(x) = \sin(x)$ e $x = 2$.

b) $f'(x)$ onde $f(x) = e^{-x}$ e $x = 1$.

c) $f''(x)$ onde $f(x) = e^{-x}$ e $x = 1$.

Use $h = 10^{-2}$ e $h = 10^{-3}$ e compare com os valores obtidos através da avaliação numérica das derivadas exatas.

E 7.1.3. Use a expansão da função $f(x)$ em torno de $x = 0$ em polinômios de Taylor para encontrar os coeficientes a_1, a_2 e a_3 tais que

a) $f'(0) = a_1 f(0) + a_2 f(h) + a_3 f(2h) + O(h^2)$

b) $f'(0) = a_1 f(0) + a_2 f(-h) + a_3 f(-2h) + O(h^2)$

c) $f'(0) = a_1 f(-h_1) + a_2 f(0) + a_3 f(h_2) + O(h^2), \;\; |h_1|, |h_2| = O(h)$

d) $f''(0) = a_1 f(0) + a_2 f(h) + a_3 f(2h) + O(h)$

e) $f''(0) = a_1 f(0) + a_2 f(-h) + a_3 f(-2h) + O(h)$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 7.1.4. As tensões na entrada, v_i, e saída, v_o, de um amplificador foram medidas em regime estacionário conforme tabela abaixo.

0.	0.5	1.	1.5	2.	2.5	3.	3.5	4.	4.5	5.
0.	1.05	1.83	2.69	3.83	4.56	5.49	6.56	6.11	7.06	8.29

onde a primeira linha é a tensão de entrada em volts e a segunda linha é tensão de saída em volts. Sabendo que o ganho é definido como

$$\frac{\partial v_o}{\partial v_i}.$$

Calcule o ganho quando $v_i = 1$ e $v_i = 4.5$ usando as seguintes técnicas:

a) Derivada primeira numérica de primeira ordem usando o próprio ponto e o próximo.

b) Derivada primeira numérica de primeira ordem usando o próprio ponto e o anterior.

c) Derivada primeira numérica de segunda ordem usando o ponto anterior e o próximo.

d) Derivada primeira analítica da função do tipo $v_0 = a_1 v_i + a_3 v_i^3$ que melhor se ajusta aos pontos pelo critério dos mínimos quadrados.

Caso	a	b	c	d
$v_i = 1$				
$v_i = 4.5$				

Dica:

```
y=[0 1.05 1.83 2.69 3.83 4.56 5.49 6.56 6.11 7.06 8.29]
```

7.2 Problemas de valor contorno

Nesta seção usaremos a aproximação numérica da derivada para resolver problemas de valor de contorno da forma

$$\begin{cases} -u_{xx} = f(x,u), \;\; a < x < b. \\ u(a) = u_a \\ u(b) = u_b \end{cases}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Resolver numericamente o problema acima exige uma discretização do domínio [a,b], ou seja, dividir o domínio em N partes iguais, definindo

$$h = \frac{b-a}{N}$$

O conjunto de abcissas x_i, $i = 1,...,N+1$ formam uma malha para o problema discreto. Nosso objetivo é encontrar as ordenadas $u_i = u(x_i)$ que satisfazem a versão discreta:

$$\begin{cases} -\frac{u_{i+1}-2u_i+u_{i-1}}{h^2} = f(x_i,u_i), \ \ 2 \leq i \leq N. \\ u_1 = u_a \\ u_{N+1} = u_b \end{cases}$$

O vetor solução $(u_i)_{i=1}^{N+1}$ do problema é solução do sistema acima, que é linear se f for linear em u e não linear caso contrário.

Exemplo 79. Encontre uma solução numérica para o problema de contorno:

$$\begin{cases} -u_{xx} + u = e^{-x}, \ \ 0 < x < 1. \\ u(0) = 1 \\ u(1) = 2 \end{cases}$$

Solução. Observe que

$$h = \frac{1}{N}$$

e a versão discreta da equação é

$$\begin{cases} -\frac{u_{i+1}-2u_i+u_{i-1}}{h^2} + u_i = e^{-x_i}, \ \ 2 \leq i \leq N. \\ u_1 = 1 \\ u_{N+1} = 2 \end{cases}$$

ou seja,

$$\begin{cases} u_1 = 1 \\ -u_{i+1} + (2+h^2)u_i - u_{i-1} = h^2 e^{-x_i}, \ \ 2 \leq i \leq N. \\ u_{N+1} = 2 \end{cases}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

que é um sistema linear. A sua forma matricial é:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2+h^2 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2+h^2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2+h^2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_N \\ u_{N+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ h^2 e^{-x_2} \\ h^2 e^{-x_3} \\ \vdots \\ h^2 e^{-x_N} \\ 2 \end{bmatrix}$$

Para $N = 10$, temos a seguinte solução:

$$\begin{bmatrix} 1{,}000000 \\ 1{,}0735083 \\ 1{,}1487032 \\ 1{,}2271979 \\ 1{,}3105564 \\ 1{,}4003172 \\ 1{,}4980159 \\ 1{,}6052067 \\ 1{,}7234836 \\ 1{,}8545022 \\ 2{,}000000 \end{bmatrix}$$

$\Diamond$

Exercícios

E 7.2.1. Considere o seguinte problema de valor de contorno para a equação de calor no estado estacionário:

$$\begin{cases} -u_{xx} = 32, \ \ 0 < x < 1. \\ u(0) = 5 \\ u(1) = 10 \end{cases}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Defina $u_j = u(x_j)$ onde $x_j = (j-1)h$ e $j = 1,\ldots,5$. Aproxime a derivada segunda por um esquema de segunda ordem e transforme a equação diferencial em um sistema de equações lineares. Escreva este sistema linear na forma matricial e resolva-o. Faça o mesmo com o dobro de subintervalos, isto é, com malha de 9 pontos.

E 7.2.2. Considere o seguinte problema de valor de contorno para a equação de calor no estado estacionário:

$$\begin{cases} -u_{xx} = 200e^{-(x-1)^2}, \ \ 0 < x < 2. \\ u(0) = 120 \\ u(2) = 100 \end{cases}$$

Defina $u_j = u(x_j)$ onde $x_j = (j-1)h$ e $j = 1,\ldots,21$. Aproxime a derivada segunda por um esquema de segunda ordem e transforme a equação diferencial em um sistema de equações lineares. Resolva o sistema linear obtido.

E 7.2.3. Considere o seguinte problema de valor de contorno para a equação de calor no estado estacionário:

$$\begin{cases} -u_{xx} = 200e^{-(x-1)^2}, \ \ 0 < x < 2. \\ u'(0) = 0 \\ u(2) = 100 \end{cases}$$

Defina $u_j = u(x_j)$ onde $x_j = (j-1)h$ e $j = 1,\ldots,21$. Aproxime a derivada segunda por um esquema de segunda ordem, a derivada primeira na fronteira por um esquema de primeira ordem e transforme a equação diferencial em um sistema de equações lineares. Resolva o sistema linear obtido.

E 7.2.4. Considere o seguinte problema de valor de contorno para a equação de calor no estado estacionário com um termo não-linear de radiação:

$$\begin{cases} -u_{xx} = 100 - \frac{u^4}{10000}, \ \ 0 < x < 2. \\ u(0) = 0 \\ u(2) = 10 \end{cases}$$

Defina $u_j = u(x_j)$ onde $x_j = (j-1)h$ e $j = 1,\ldots,21$. Aproxime a derivada segunda por um esquema de segunda ordem e transforme a equação diferencial em um sistema de equações não lineares. Resolva o sistema obtido.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Expresse a solução com dois algarismos depois do separador decimal. Dica: Veja problema 38 da lista 2, seção de sistemas não lineares.

E 7.2.5. Considere o seguinte problema de valor de contorno para a equação de calor no estado estacionário com um termo não-linear de radiação e um termo de convecção:

$$\begin{cases} -u_{xx} + 3u_x = 100 - \frac{u^4}{10000}, \ \ 0 < x < 2. \\ u'(0) = 0 \\ u(2) = 10 \end{cases}$$

Defina $u_j = u(x_j)$ onde $x_j = (j-1)h$ e $j = 1, \ldots, 21$. Aproxime a derivada segunda por um esquema de segunda ordem, a derivada primeira na fronteira por um esquema de primeira ordem, a derivada primeira no interior por um esquema de segunda ordem e transforme a equação diferencial em um sistema de equações não lineares. Resolva o sistema obtido.

E 7.2.6. Considere o seguinte problema de valor de contorno:

$$\begin{cases} -u'' + 2u' = e^{-x} - \frac{u^2}{100}, \ \ 1 < x < 4. \\ u'(1) + u(1) = 2 \\ u'(4) = -1 \end{cases}$$

Defina $u_j = u(x_j)$ onde $x_j = 1 + (j-1)h$ e $j = 1, \ldots, 101$. Aproxime a derivada segunda por um esquema de segunda ordem, a derivada primeira na fronteira por um esquema de primeira ordem, a derivada primeira no interior por um esquema de segunda ordem e transforme a equação diferencial em um sistema de equações não lineares. Resolva o sistema obtido.

7.3 Integração numérica

Considere o problema de calcular a área entre uma função positiva, o eixo x e as retas $x = a$ e $x = b$. O valor exato dessa área é calculada fazendo uma aproximação por retângulos com bases iguais e depois tomando o limite quando o número de retângulos tende ao infinito:

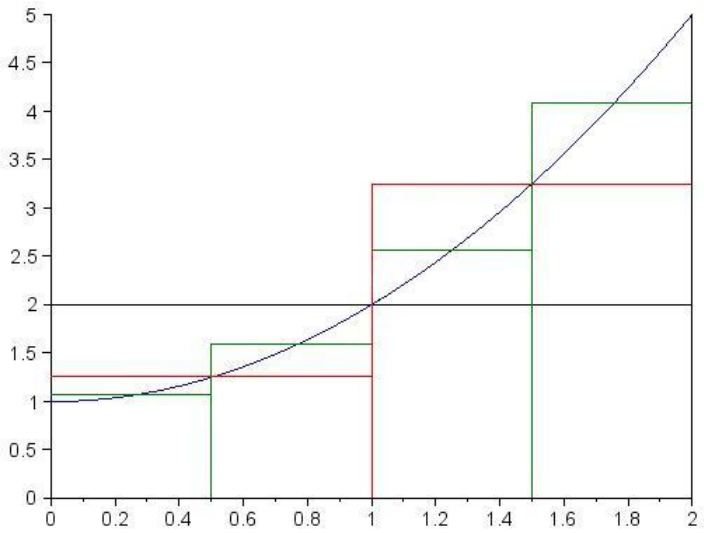
$$A = \lim_{n \to \infty} \sum_{i=1}^{n} f(x_i) h_n,$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

onde $h_n = \frac{b-a}{n}$ é o tamanho da base dos retângulo e $f(x_i)$, $1 \leq i \leq n$, $a + (i-1)h \leq x_i \leq a + ih$, é a altura dos retângulos. Essa definição é generalizada para cálculo de integrais num intervalo $[a,b]$:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} f(x_i)h_n.$$

A figura abaixo mostra um exemplo quando $f(x) = x^2+1$, $0 \leq x \leq 2$. Temos a aproximação por um retângulo com base $h_1 = 2$, depois com dois retângulos de base $h_2 = 1$ e, finalmente com quatro retângulo de bases $h_3 = 0{,}5$.



Os valores aproximados para a integral são dados na tabela:

	$h_1 = 2$	$h_2 = 1$	$h_3 = 0{,}5$	$h_4 = 0{,}25$
$\int_0^2 (x^2+1)dx$	$h_1 f(1) = 4$	$h_2 f(0{,}5) + h_2 f(1{,}5) = 4{,}5$	4,625	4,65625

Observe que

$$\int_0^2 (x^2+1)dx = \left[\frac{x^3}{3} + x\right]_0^2 = \frac{8}{3} + 2 = 4{,}6666667$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

7.3.1 Regras de Newton-Cotes

A integral de uma função num intervalo [a,b], também chamada de quadratura numérica, é aproximada pela soma

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

onde x_i, $1 \leq i \leq n$, são pontos distintos do intervalo [a,b]. Nessa definição, a integral $\int_0^2 (x^2+1)dx$ (dada na seção **??**) usando uma aproximação por retângulo usa apenas um ponto, o ponto médio do intervalo ($x_1 = 1$), e a soma se reduz a uma parcela ($(2-0)f(1)$). A fórmula geral para essa caso, chamado de regra do ponto médio é:

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right) := hf(x_1). \tag{7.7}$$

Regra do ponto médio

A regra do ponto médio (7.7) pode ser deduzida mais formalmente usando a expansão de Taylor

$$f(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x-x_1) + \frac{f''(\xi(x))}{2}(x-x_1)^2$$

que leva a integral

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b f(x_1)dx + f'(x_1)\int_a^b (x-x_1)dx + \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2}(x-x_1)^2 dx.$$

Usando o teorema do valor médio para integrais e que $h = b-a$ e $x_1 = (a+b)/2$, temos:

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= hf(x_1) + f'(x_1)\int_a^b (x-x_1)dx + f''(\eta)\int_a^b \frac{1}{2}(x-x_1)^2 dx \\
&= hf(x_1) + f'(x_1)\left[\frac{(x-x_1)^2}{2}\right]_a^b + f''(\eta)\left[\frac{1}{6}(x-x_1)^3\right]_a^b \\
&= hf(x_1) + f'(x_1)\left[\frac{(b-x_1)^2}{2} - \frac{(a-x_1)^2}{2}\right] \\
&+ f''(\eta)\left[\frac{1}{6}(b-x_1)^3 - \frac{1}{6}(a-x_1)^3\right] \\
&= hf(x_1) + \frac{h^3 f''(\eta)}{3}.
\end{aligned}$$

para $a \leq \eta \leq b$.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 80. Use a regra do ponto médio para aproximar a integral

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx.$$

Depois divida a integral em duas

$$\int_0^{1/2} e^{-x^2} dx + \int_{1/2}^1 e^{-x^2} dx.$$

e aplique a regra do ponto médio em cada uma delas. Finalmente, repita o processo dividindo em quatro integrais.

Usando o intervalo [0,1], temos $h = 1$ e $x_1 = 1/2$. A regra do ponto médio resulta em

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx 1 \cdot e^{-1/4} = 0{,}7788008$$

Usando dois intervalos, [0,1/2] e [1/2,1] e usando a regra do ponto médio em cada um dos intervalos, temos:

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx 0{,}5 \cdot e^{-1/16} + 0{,}5 \cdot e^{-9/16}) = 0{,}4697065 + 0{,}2848914 = 0{,}7545979$$

Agora, usando quatro intervalos, temos

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx 0{,}25 \cdot e^{-1/64} + 0{,}25 \cdot e^{-9/64} + 0{,}25 \cdot e^{-25/64} + 0{,}25 \cdot e^{-49/64} = 0{,}7487471$$

Observe que o valor da integral é

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx = 0{,}7468241330.$$

A forma natural de obter as regras de integração é usar o polinômio de Lagrange que passa pelo pontos $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=1}^n$

$$f(x) = P_n(x) + \text{termo de erro} = \sum_{i=1}^n f(x_i) L_i(x) + \prod_{i=1}^n (x - x_i) \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}.$$

e integramos

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \left[f(x_i) \int_a^b L_i(x) dx \right] + \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b \prod_{i=1}^n (x - x_i) f^{(n+1)}(\xi(x)) dx.$$

A fórmula de quadratura então é

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

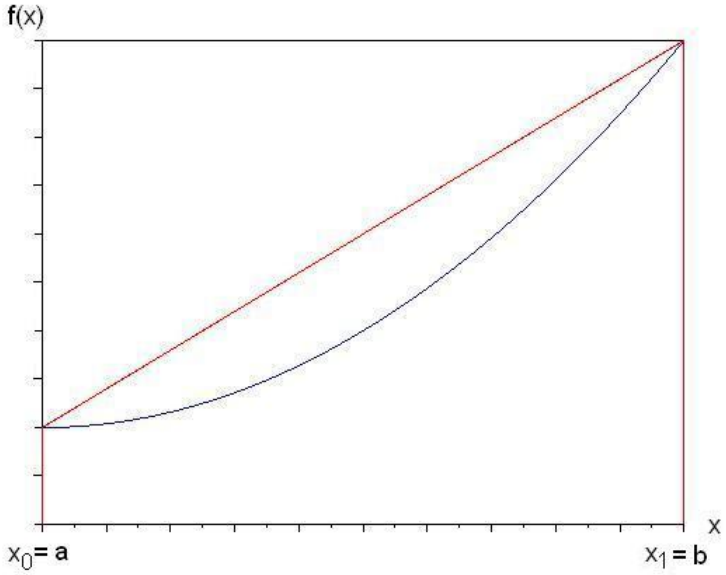
onde

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

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Regra do Trapézio

A regra do trapézio consiste em aproximar a integral por um trapézio em vez de um retângulo, como fizemos. Para isso, o polinômio de Lagrange deve ser uma reta, como mostra a figura.



O polinômio de Lagrange de primeira ordem que passa por $(x_0,f(x_0)) := (a,f(a))$ e $(x_1,f(x_1)) := (b,f(b))$ é dado por

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

onde $h = x_1 - x_0$. Podemos integrar a função $f(x)$ aproximando-a por esse polinômio:

$$\int_a^b f(x)dx = f(x_0)\int_a^b \frac{(x-x_0)}{h}dx - f(x_1)\int_a^b \frac{(x-x_1)}{h}dx + \frac{1}{2!}\int_a^b (x-x_0)(x-x_1)f''(\xi(x))dx.$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Pelo teorema do valor médio, existe $a \leq \eta \leq b$ tal que $\int_a^b f(\xi(x))g(x)dx = f(\eta)\int_a^b g(x)dx$ e, portanto,

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= f(x_0)\left[\frac{(x-x_0)^2}{2h}\right]_{x_0}^{x_1} - f(x_1)\left[\frac{(x-x_1)^2}{2h}\right]_{x_0}^{x_1} \\
&+ \frac{f''(\eta)}{2}\left[\frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2}(x_1+x_0) + x_0x_1x\right]_{x_0}^{x_1} \\
&= f(x_0)\frac{(x_1-x_0)^2}{2h} + f(x_1)\frac{(x_0-x_1)^2}{2h} \\
&+ \frac{f''(\eta)}{2}\left(\frac{x_1^3}{3} - \frac{x_1^2}{2}(x_1+x_0) + x_0x_1x_1 - \frac{x_0^3}{3} + \frac{x_0^2}{2}(x_1+x_0) - x_0x_1x_0\right) \\
&= f(x_0)\frac{h^2}{2h} + f(x_1)\frac{h^2}{2h} \\
&+ \frac{f''(\eta)}{2}\frac{2x_1^3 - 3x_1^2(x_1+x_0) + 6x_1^2x_0 - 2x_0^3 + 3x_0^2(x_1+x_0) - 6x_1x_0^2}{6} \\
&= \frac{h}{2}(f(x_0)+f(x_1)) + \frac{f''(\eta)}{12}\left(x_0^3 - 3x_0^2x_1 + 3x_1^2x_0 - x_1^3\right) \\
&= \frac{h}{2}(f(x_0)+f(x_1)) - \frac{h^3f''(\eta)}{12}
\end{aligned}$$

Exemplo 81. Use a regra do trapézio para aproximar a integral

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx.$$

Depois divida a integral em duas

$$\int_0^{1/2} e^{-x^2}dx + \int_{1/2}^1 e^{-x^2}dx.$$

e aplica a regra do trapézio em cada uma delas. Finalmente, repita o processo dividindo em quatro integrais.

Usando o intervalo [0,1], temos $h = 1$, $x_0 = 0$ e $x_1 = 1$. A regra do trapézio resulta em

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \approx \frac{1}{2}(e^0 + e^{-1}) = 0{,}6839397$$

Usando dois intervalos, [0,1/2] e [1/2,1] e usando a regra do trapézio em cada um dos intervalos, temos:

$$\begin{aligned}
\int_0^1 e^{-x^2}dx &\approx \frac{0{,}5}{2}\left(e^0 + e^{-1/4}\right) + \frac{0{,}5}{2}\left(e^{-1/4} + e^{-1}\right) \\
&= 0{,}4447002 + 0{,}2866701 = 0{,}7313703.
\end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Agora, usando quatro intervalos, temos

$$\begin{aligned}\int_0^1 e^{-x^2}dx &\approx \frac{0{,}25}{2}\left(e^0+e^{-1/16}\right)+\frac{0{,}25}{2}\left(e^{-1/16}+e^{-1/4}\right)\\ &+\frac{0{,}25}{2}\left(e^{-1/4}+e^{-9/16}\right)+\frac{0{,}25}{2}\left(e^{-9/16}+e^{-1}\right)\\ &=0{,}7429841\end{aligned}$$

Regra de Simpson

A regra de Simpson consiste em aproximar a integral usando três pontos do intervalo:

$$x_0=a,\qquad x_1:=\frac{a+b}{2}=x_0+h\qquad\text{e}\qquad x_2:=b=x_1+h.$$

com $h=(b-a)/2$. Para isso, o polinômio de Lagrange deve ser uma parábola:

$$\begin{aligned}P_2(x)=f(x_0)&\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+f(x_1)\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\\ &+f(x_2)\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}.\end{aligned}$$

Se usarmos o mesma metodologia da regra dos trapézios, calcularemos

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b P_2(x)dx+\int_a^b\frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{6}f'''(\xi(x))dx$$

e obteremos o fórmula de Simpson com um erro de quarta ordem. O fato é que a regra de Simpson tem ordem cinco e, para isso, usaremos uma abordagem alternativa. Considere o polinômio de Taylor

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

onde $x_0\le\xi(x)\le x_2$ e integre no intervalo $[a,b]=[x_0,x_2]$:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx=&\left[f(x_1)(x-x_1)+f'(x_1)\frac{(x-x_1)^2}{2}+\frac{f''(x_1)}{6}(x-x_1)^3\right.\\ &\left.+\frac{f'''(x_1)}{24}(x-x_1)^4\right]_{x_0}^{x_2}\\ &+\frac{1}{24}\int_{x_0}^{x_2}f^{(4)}(\xi(x))(x-x_1)^4dx,\end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Pelo teorema do valor médio, existe $x_0 \leq \eta \leq x_2$ tal que

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \Bigg[f(x_1)(x-x_1) + f'(x_1)\frac{(x-x_1)^2}{2} + \frac{f''(x_1)}{6}(x-x_1)^3 \\ &+ \frac{f'''(x_1)}{24}(x-x_1)^4\Bigg]_{x_0}^{x_2} \\ &+ \frac{f^{(4)}(\eta)}{24}\int_{x_0}^{x_2}(x-x_1)^4dx \\ &= \Bigg[f(x_1)(x-x_1) + f'(x_1)\frac{(x-x_1)^2}{2} + \frac{f''(x_1)}{6}(x-x_1)^3 \\ &+ \frac{f'''(x_1)}{24}(x-x_1)^4\Bigg]_{x_0}^{x_2} \\ &+ \frac{f^{(4)}(\eta)}{120}\left[(x-x_1)^5\right]_{x_0}^{x_2}\end{aligned}$$

Usando o fato que

$$\begin{aligned}(x_2-x_1)^3 - (x_0-x_1)^3 &= 2h^3, \\ (x_2-x_1)^4 - (x_0-x_1)^4 &= 0\end{aligned}$$

e

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

temos

$$\int_a^b f(x)dx = 2hf(x_1) + \frac{h^3}{3}f''(x_1) + \frac{h^5 f^{(4)}(\eta)}{60}.$$

Usando a diferenças finitas centrais para a derivada segunda:

$$f''(x_1) = \frac{f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)}{h^2} + \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\eta_1),$$

$x_0 \leq \eta_1 \leq x_2$, temos

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= 2hf(x_1) + \frac{h^3}{3}\left(\frac{f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)}{h^2} + \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\eta_1)\right) \\ &+ \frac{h^5 f^{(4)}(\eta)}{60} \\ &= \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right) - \frac{h^5}{12}\left(\frac{1}{3}f^{(4)}(\eta_1) - \frac{1}{5}f^{(4)}(\eta)\right).\end{aligned}$$

Pode-se mostrar que é possível escolher η_2 que substitua η e η_1 com a seguinte estimativa

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right) - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta_2).$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 82. Use a regra de Simpson para aproximar a integral

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx.$$

Depois divida a integral em duas

$$\int_0^{1/2} e^{-x^2} dx + \int_{1/2}^1 e^{-x^2} dx.$$

e aplica a regra de Simpson em cada uma delas.

Usando o intervalo [0,1], temos $h = 1/2$, $x_0 = 0$, $x_1 = 1/2$ e $x_2 = 1$. A regra de Simpson resulta em

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx \frac{0{,}5}{3}(e^0 + 4e^{-1/4} + e^{-1}) = 0{,}7471804$$

Usando dois intervalos, [0,1/2] e [1/2,1] e usando a regra do trapézio em cada um dos intervalos, temos:

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \approx \frac{0{,}25}{3}(e^0 + 4e^{-1/16} + e^{-1/4}) + \frac{0{,}25}{3}(e^{-1/4} + 4e^{-9/16} + e^{-1}) = 0{,}7468554$$

7.3.2 Regras compostas

Vimos que em todas as estimativas de erro que derivamos, o erro depende do tamanho do intervalo de integração. Uma estratégia para reduzir o erro consiste em particionar o intervalo de integração em diversos subintervalos menores:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$$

onde $x_i = a + (i-1)h$, $h = (b-a)/n$ e $i = 1{,}2{,}\ldots{,}n+1$, sendo n o número de subintervalos da partição do intervalo de integração. Depois, aplica-se um método simples de integração em cada subintervalo.

Método composto dos trapézios

A **regra composta dos trapézios** assume a seguinte forma:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \sum_{i=1}^{n} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx \\ &\approx \sum_{i=1}^{n} \frac{x_{i+1} - x_i}{2} \left[f(x_i) + f(x_{i+1})\right]\end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Como $h = x_{i+1} - x_i$, temos:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &\approx \frac{h}{2}\sum_{k=1}^{N_i}\left[f(x_k) + f(x_{k+1})\right] \\ &= \frac{h}{2}\left[f(x_1) + 2f(x_2) + 2f(x_3) + \cdots + 2f(x_{N_i}) + f(x_{N_i+1})\right] \\ &= \frac{h}{2}\left[f(x_1) + f(x_{N_i+1})\right] + h\sum_{i=2}^{N_i} f(x_i)\end{aligned}$$

Código Scilab: Trapézio Composto

O código Scilab abaixo é uma implementação do método do trapézio composto para calcular:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left[f(x_1) + f(x_{n+1})\right] + h\sum_{i=2}^{n} f(x_i) + O(h^3),$$

onde $h = (b-a)/n$ e $x_i = a + (i-1)h$, $i = 1,2,\ldots,n+1$. Os parâmetros de entrada são: `f` o integrando definido como uma função no Scilab, `a` o limite inferior de integração, `b` o limite superior de integração, `n` o número de subintervalos desejado. A variável de saída é `y` e corresponde a aproximação calculada de $\int_a^b f(x)\,dx$.

```
function [y] = trap_comp(f,a,b,n)
  h = (b-a)/n
  x = linspace(a,b,n+1)
  y = h*(f(x(1)) + f(x(n+1)))/2
  for i = 2:n
    y = y + h*f(x(i))
  end
endfunction
```

Método composto de Simpson

Já a regra composta de Simpson assume a seguinte forma:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &= \sum_{k=1}^{n}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \\ &\approx \sum_{k=1}^{n}\frac{x_{x+1} - x_k}{6}\left[f(x_k) + 4f\left(\frac{x_{k+1} + x_k}{2}\right) + f(x_{k+1})\right]\end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

onde, como anteriormente, $x_k = a+(k-1)h$, $h = (b-a)/n$ e $i = 1,2,\ldots,n+1$, sendo n o número de subintervalos da partição do intervalo de integração. Podemos simplificar o somatório acima, escrevendo:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\left[f(x_1) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i+1}) + 4\sum_{i=1}^{n} f(x_{2i}) + f(x_{2n+1})\right] + O(h^5)$$

onde, agora, $h = (b-a)/(2n)$, $x_i = a + (i-1)h$, $i = 1,2,\ldots,2n+1$.

Código Scilab: Simpson Composto

O código Scilab abaixo é uma implementação do método de Simpson composto para calcular:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left[f(x_1) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i+1}) + 4\sum_{i=1}^{n} f(x_{2i}) + f(x_{2n+1})\right] + O(h^3),$$

onde $h = (b-a)/(2n)$ e $x_i = a+(i-1)h$, $i = 1,2,\ldots,2n+1$. Os parâmetros de entrada são: `f` o integrando definido como uma função no Scilab, `a` o limite inferior de integração, `b` o limite superior de integração, `n` o número de subintervalos desejado. A variável de saída é `y` e corresponde a aproximação calculada de $\int_a^b f(x)\,dx$.

Exemplo 83. Calcule numericamente a integral

$$\int_0^2 x^2 e^{x^2} dx$$

pelas regras compostas do ponto médio, trapézio e Simpson variando o número de intervalos
$N_i = 1,\ 2,\ 3,\ 6,\ 12,\ 24,\ 48,\ 96.$

n	ponto médio	Trapézios	Simpson
1	5,4365637	218,3926	76,421909
2	21,668412	111,91458	51,750469
3	31,678746	80,272022	47,876505
6	41,755985	55,975384	46,495785
12	45,137529	48,865685	46,380248
24	46,057757	47,001607	46,372373
48	46,292964	46,529682	46,37187
96	46,352096	46,411323	46,371838

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

7.3.3 O método de Romberg

O método de Romberg é um método simplificado para construir quadraturas de alta ordem.

Considere o método de trapézios composto aplicado à integral

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

Defina $I(h)$ a aproximação desta integral pelo método dos trapézios composto com malha de largura constante igual a h. Aqui $h = \frac{b-a}{N_i}$ para algum N_i inteiro, i.e.:

$$I(h) = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{j=2}^{N_i} f(x_j) + f(b)\right], \quad N_i = \frac{b-a}{h}$$

Teorema 6. *Se $f(x)$ é uma função analítica no intervalo (a,b), então a função $I(h)$ admite uma representação na forma*

$$I(h) = I_0 + I_2h^2 + I_4h^4 + I_6h^6 + \dots$$

Para um demonstração, veja [4]. Em especial observamos que

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{h\to 0} I(h) = I_0$$

Ou seja, o valor exato da integral procurada é dado pelo coeficiente I_0.

A ideia central do método de Romberg, agora, consiste em usar a extrapolação de Richardson para construir métodos de maior ordem a partir do métodos dos trapézios para o intervalo (a,b)

Exemplo 84. Construção do método de quarta ordem.

$$\begin{aligned} I(h) &= I_0 + I_2h^2 + I_4h^4 + I_6h^6 + \dots \\ I\left(\frac{h}{2}\right) &= I_0 + I_2\frac{h^2}{4} + I_4\frac{h^4}{16} + I_6\frac{h^6}{64} + \dots \end{aligned}$$

Usamos agora uma eliminação gaussiana para obter o termo I_0:

$$\frac{4I(h/2) - I(h)}{3} = I_0 - \frac{1}{4}I_4h^4 - \frac{5}{16}I_6h^6 + \dots$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Vamos agora aplicar a fórmula para $h = b - a$,

$$\begin{aligned} I(h) &= \frac{h}{2}\left[f(a) + f(b)\right] \\ I(h/2) &= \frac{h}{4}\left[f(a) + 2f\left(c\right) + f(b)\right], \ c = \frac{a+b}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{4I(h/2) - I(h)}{3} &= \frac{h}{3}\left[f(a) + 2f\left(c\right) + f(b)\right] - \frac{h}{6}\left[f(a) + f(b)\right] \\ &= \frac{h}{6}\left[f(a) + 4f\left(c\right) + f(b)\right] \end{aligned}$$

Observe que esquema coincide com o método de Simpson.

A partir de agora, usaremos a seguinte notação

$$\begin{aligned} R_{1,1} &= I(h) \\ R_{2,1} &= I(h/2) \\ R_{3,1} &= I(h/4) \\ &\vdots \\ R_{n,1} &= I(h/2^{n-1}) \end{aligned}$$

Observamos que os pontos envolvidos na quadratura $R_{k,1}$ são os mesmos pontos envolvidos na quadratura $R(k-1,1)$ acrescidos dos pontos centrais, assim, temos a seguinte fórmula de recorrência:

$$R_{k,1} = \frac{1}{2}R_{k-1,1} + \frac{h}{2^{k-1}}\sum_{i=1}^{2^{k-2}} f\left(a + (2i-1)\frac{h}{2^{k-1}}\right)$$

Definimos $R_{k,2}$ para $k \geq 2$ como o esquema de ordem quatro obtido da fórmula do exemplo 84:

$$R_{k,2} = \frac{4R_{k,1} - R_{k-1,1}}{3}$$

Os valores $R_{k,2}$ representam então os valores obtidos pelo método de Simpson composto aplicado a uma malha composta de $2^{k-1} + 1$ pontos.

Similarmente os valores de $R_{k,j}$ são os valores obtidos pela quadratura de ordem $2j$ obtida via extrapolação de Richardson. Pode-se mostrar que

$$R_{k,j} = R_{k,j-1} + \frac{R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}.$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 85. Construa o esquema de Romberg para aproximar o valor de $\int_0^2 e^{-x^2}dx$ com erro de ordem 8.

O que nos fornece os seguintes resultados:

55,59815	0,000000	0,000000	0,000000
30,517357	22,157092	0,000000	0,000000
20,644559	17,353626	17,033395	0,000000
17,565086	16,538595	16,484259	**16,475543**

Ou seja, temos:

$$\int_0^2 e^{x^2}dx \approx 16{,}475543$$

usando uma aproximação de ordem 8.

Exemplo 86. Construa o esquema de Romberg para aproximar o valor de $\int_0^2 x^2e^{x^2}dx$ com erro de ordem 12.

O que nos fornece:

218,3926					
111,91458	76,421909				
66,791497	51,750469	50,105706			
51,892538	46,926218	46,604601	46,549028		
47,782846	46,412949	46,378731	46,375146	46,374464	
46,72661	46,374531	46,37197	46,371863	46,37185	**46,371847**

Ou seja, temos:

$$\int_0^2 x^2e^{x^2}dx \approx 46{,}371847$$

com uma aproximação de ordem 12.

7.3.4 Ordem de precisão

Todos os métodos de quadratura que vimos até o momento são da forma

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=1}^{N} w_j f(x_j)$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 87. (a) Método do trapézio

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx [f(a)+f(b)]\frac{b-a}{2}\\ &= \frac{b-a}{2}f(a)+\frac{b-a}{2}f(b)\\ &:= w_1f(x_1)+w_2f(x_2)=\sum_{j=1}^{2}w_jf(x_j)\end{aligned}$$

(b) Método do trapézio com dois intervalos

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \left[f(a)+2f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]\frac{b-a}{4}\\ &= \frac{b-a}{4}f(a)+\frac{b-a}{2}f\left(\frac{a+b}{2}\right)+\frac{b-a}{4}f(b)\\ &:= w_1f(x_1)+w_2f(x_2)+w_3f(x_3)=\sum_{j=1}^{3}w_jf(x_j)\end{aligned}$$

(c) Método de Simpson

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]\frac{b-a}{6}\\ &= \frac{b-a}{6}f(a)+\frac{2(b-a)}{3}f\left(\frac{a+b}{2}\right)+\frac{b-a}{6}f(b)\\ &:= \sum_{j=1}^{3}w_jf(x_j)\end{aligned}$$

(d) Método de Simpson com dois intervalos

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \left[f(a)+4f\left(\frac{3a+b}{4}\right)+2f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right.\\ &+ \left.4f\left(\frac{a+3b}{4}\right)+f(b)\right]\frac{b-a}{12}\\ &= \frac{b-a}{12}f(a)+\frac{b-a}{3}f\left(\frac{3a+b}{4}\right)+\frac{b-a}{6}f\left(\frac{a+b}{2}\right)\\ &+ \frac{b-a}{3}f\left(\frac{a+3b}{4}\right)+\frac{b-a}{12}f(b)\\ &:= \sum_{j=1}^{5}w_jf(x_j)\end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

A principal técnica que temos usado para desenvolver os métodos numéricos é o **polinômio de Taylor**:

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n + R_n(x)$$

Integrando termo a termo, temos:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \int_a^b a_0 dx + \int_a^b a_1 x dx + \int_a^b a_2 x^2 dx + \ldots + \\ &\quad \int_a^b a_n x^n dx + \int_a^b R_n(x)dx \\ &= a_0(b-a) + a_1\frac{b^2-a^2}{2} + a_2\frac{b^3-a^3}{3} + \ldots + \\ &\quad a_n\frac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1} + \int_a^b R_n(x)dx\end{aligned}$$

Neste momento, é natural investigar o desempenho de um esquema numérico aplicado a funções do tipo $f(x) = x^n$.

Definição 5. *A* **ordem de precisão** *ou* **ordem de exatidão** *de um esquema de quadratura numérica como o maior inteiro positivo* **n** *para o qual o esquema é exato para todas as funções do tipo* x^k *com* $0 \leq k \leq n$*, ou seja, Um esquema é dito de ordem n se*

$$\sum_{j=1}^{n} w_j f(x_j) = \int_a^b f(x)dx, \quad f(x) = x^k,\ k = 0,1,\ldots n$$

ou, equivalentemente:

$$\sum_{j=1}^{n} w_j x_j^k = \int_a^b x^k dx = \frac{b^{k+1}-a^{k+1}}{k+1}, \quad k = 0,1,\ldots n$$

Observação 20. Se o método tem ordem 0 ou mais, então

$$\sum_{j=1}^{n} w_j = b - a$$

Exemplo 88. A ordem de precisão do esquema de trapézios é 1:

$$\int_a^b f(x)dx \approx [f(a) + f(b)]\,\frac{b-a}{2} = \sum_{j=1}^{2} w_j f(x_j)$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

onde $w_j = \frac{b-a}{2}$, $x_1 = a$ e $x_2 = b$.

$$\begin{aligned}
(k=0): &\quad \sum_{j=1}^{n} w_j = b-a \\
(k=1): &\quad \sum_{j=1}^{n} w_j x_j = (a+b)\frac{b-a}{2} = \frac{b^2-a^2}{2} \\
(k=2): &\quad \sum_{j=1}^{n} w_j x_j^2 = (a^2+b^2)\frac{b-a}{2} \neq \frac{b^3-a^3}{3}
\end{aligned}$$

Exemplo 89. A ordem de precisão do esquema de Simpson é 3:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]\frac{b-a}{6} = \sum_{j=1}^{3} w_j f(x_j)$$

onde $w_1 = w_3 = \frac{b-a}{6}$,$w_2 = 4\frac{b-a}{6}$, $x_1 = a$, $x_2 = \frac{a+b}{2}$ e $x_3 = b$

$$\begin{aligned}
(k=0): &\quad \sum_{j=1}^{n} w_j = (1+4+1)\frac{b-a}{6} = b-a \\
(k=1): &\quad \sum_{j=1}^{n} w_j x_j = (a+4\frac{a+b}{2}+b)\frac{b-a}{6} = (a+b)\frac{b-a}{2} = \frac{b^2-a^2}{2} \\
(k=2): &\quad \sum_{j=1}^{n} w_j x_j^2 = (a^2+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^2+b^2)\frac{b-a}{6} = \frac{b^3-a^3}{3} \\
(k=3): &\quad \sum_{j=1}^{n} w_j x_j^3 = (a^3+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^3+b^3)\frac{b-a}{6} = \frac{b^4-a^4}{4} \\
(k=4): &\quad \sum_{j=1}^{n} w_j x_j^4 = (a^4+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^4+b^4)\frac{b-a}{6} \neq \frac{b^5-a^5}{4}
\end{aligned}$$

Exemplo 90. Encontre os pesos w_j e as abscissas x_j tais que o esquema de dois pontos

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2)$$

é de ordem 3.

Solução. Temos um sistema de quatro equações e quatro incógnitas dado

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

por:

$$\begin{aligned} w_1 + w_2 &= 2 \\ x_1 w_1 + x_2 w_2 &= 0 \\ x_1^2 w_1 + x_2^2 w_2 &= \frac{2}{3} \\ x_1^3 w_1 + x_2^3 w_2 &= 0 \end{aligned}$$

Da segunda e quarta equação, temos:

$$\frac{w_1}{w_2} = -\frac{x_2}{x_1} = -\frac{x_2^3}{x_1^3}$$

Como $x_1 \neq x_2$, temos $x_1 = -x_2$ e $w_1 = w_2$. Da primeira equação, temos $w_1 = w_2 = 1$. Da terceira equação, temos $-x_1 = x_2 = \frac{\sqrt{3}}{3}$.

Esse esquema de ordem de precisão três e dois pontos chama-se quadratura de Gauss-Legendre com dois pontos:

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

$\Diamond$

Exemplo 91. Comparação

$f(x)$	Exato	Trapézio	Simpson	Gauss-Legendre (2)
e^x	$e - e^{-1}$ $\approx 2{,}35040$	$e^{-1} + e$ $\approx 3{,}08616$	$\frac{e^{-1} + 4e^0 + e^1}{3}$ $\approx 2{,}36205$	$e^{-\frac{-\sqrt{3}}{3}} + e^{\frac{\sqrt{3}}{3}}$ $\approx 2{,}34270$
$x^2\sqrt{3+x^3}$	$\frac{16}{9} - \frac{4}{9}\sqrt{2}$ $\approx 1{,}14924$	3,41421	1,13807	1,15411
$x^2 e^{x^3}$	$\frac{e-e^{-1}}{3} \approx 0{,}78347$	3,08616	1,02872	0,67905

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

7.3.5 Quadratura de Gauss-Legendre

A quadratura de Gauss-Legendre de n pontos é o esquema numérico

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{j=1}^{n} w_j f(x_j)$$

cuja ordem de exatidão é $2n-1$.

- O problema de encontrar os n pesos e n abscissas é equivalente a um sistema não linear com $2n$ equações e $2n$ incógnitas.

- Pode-se mostrar que este problema sempre tem solução e que a solução é única se $x_1 < x_2 < \ldots < x_n$

- As abscissas são das pelos zeros do enésimo polinômio de Legendre, $P_n(x)$.

- Os pesos são dados por

$$w_j = \frac{2}{\left(1 - x_j^2\right)\left[P_n'(x_j)\right]^2}.$$

- Estes dados são tabelados e facilmente encontrados.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

n	x_j	w_j
1	0	2
2	$\pm\frac{\sqrt{3}}{3}$	1
3	0 $\pm\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{8}{9}$ $\frac{5}{9}$
4	$\pm\sqrt{\left(3-2\sqrt{6/5}\right)/7}$ $\pm\sqrt{\left(3+2\sqrt{6/5}\right)/7}$	$\frac{18+\sqrt{30}}{36}$ $\frac{18-\sqrt{30}}{36}$

Exemplo 92. Aproximar

$$\int_{-1}^{1}\sqrt{1+x^2}dx$$

pelo método de Gauss-Legendre com 3 pontos.

Solução.

$$I_3=\frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)+\frac{8}{9}f(0)+\frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)\approx 2{,}2943456$$

No Scilab: ◊

Exemplo 93. Aproximar

$$\int_{-1}^{1}\sqrt{1+x^2}dx$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

pelo método de Gauss-Legendre com 4 pontos.

Solução.
```
I4=f(x4(1))*w4(1)+f(-x4(1))*w4(1)+f(x4(2))*w4(2)+f(-x4(2))*w4(2)
```
◊

Exemplo 94. Aproximar

$$\int_0^1 \sqrt{1+x^2}dx$$

pelo método de Gauss-Legendre com 3, 4 e 5 pontos.

Solução. Para tanto, fazemos a mudança de variáveis $u = 2x - 1$:

$$\int_0^1 \sqrt{1+x^2}dx = \frac{1}{2}\int_{-1}^1 \sqrt{1+\left(\frac{u+1}{2}\right)^2}du$$

E, então aplicamos a quadratura gaussiana nesta última integral.

```
deff('y=f(u)','y=sqrt(1+(u+1)^2/4)/2')
I3=f(0)*w3(1)+f(x3(2))*w3(2)+f(-x3(2))*w3(2)
I4=f(x4(1))*w4(1)+f(-x4(1))*w4(1)+f(x4(2))*w4(2)+f(-x4(2))*w4(2)
I5=f(0)*w5(1)+f(x5(2))*w5(2)+f(-x5(2))*w5(2)+f(x5(3))*w5(3) ...
  +f(-x5(3))*w5(3)
```

◊

Exercícios

E 7.3.1. Calcule numericamente as seguintes integrais usando os métodos simples do Ponto médio, Trapézio e Simpson. Calcule também o valor exato usando seus conhecimentos de Cálculo I. Complete a tabela abaixo conforme modelo:

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

	exato	Ponto médio	Trapézio	Simpso
$\int_0^1 e^{-x}dx$	$1-e^{-1}\approx 0.6321206$	$e^{-1/2}\approx 0.6065307$	$\frac{1+e^{-1}}{2}\approx 0.6839397$	$\frac{1+4e^{-1/2}+e^{-1}}{6}\approx$
$\int_0^1 x^2dx$				
$\int_0^1 x^3dx$				
$\int_0^1 xe^{-x^2}dx$				
$\int_0^1 \frac{1}{x^2+1}dx$				
$\int_0^1 \frac{x}{x^2+1}dx$				
$\int_0^1 \frac{1}{x+1}dx$				

E 7.3.2. Dados os valores da função $f(x)$, $f(2)=2$, $f(3)=4$ e $f(4)=8$, calcule o valor aproximado de

$$\int_2^4 f(x)dx$$

pelos métodos simples de ponto médio, trapézio e Simpson.

E 7.3.3. Dê a interpretação geométrica dos métodos do ponto médio, trapézio e Simpson. A partir desta construção geométrica, deduza as fórmulas para aproximar

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

Verifique o método de Simpson pode ser entendido como uma média aritmética ponderada entre os métodos de trapézio e ponto médio. Encontre os pesos envolvidos. Explique o que são os métodos compostos.

E 7.3.4. Calcule numericamente o valor de $\int_2^5 e^{4-x^2}dx$ usando os métodos compostos do ponto médio, trapézio e Simpson. Obtenha os resultados

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

utilizando, em cada quadratura, o número de pontos indicado.

n	Ponto médio	Trapézios	Simpson
3			
5			
7			
9			

E 7.3.5. Use as rotinas construídas em aula e calcule numericamente o valor das seguintes integrais usando o método composto dos trapézios para os seguintes números de pontos:

n	h	$\int_0^1 e^{-4x^2}dx$	$\int_0^1 \frac{1}{1+x^2}dx$	$\int_0^1 x^4(1-x)^4dx$	$\int_0^1 e^{-\frac{1}{x^2+1}}dx$
17		0.4409931			
33		0.4410288			
65		0.4410377			
129		0.4410400			
257		0.4410405			
513		0.4410406			
1025		0.4410407	0.7853981	$1.5873015873016 \cdot 10^{-3}$	$4.6191723776309 \cdot 10^{-1}$

Para cada integrando encontre o função $I(h) = a_0+a_1h+a_2h^2+a_3h^3+a_4h^4$ que melhor se ajusta aos dados, onde $h = \frac{1}{n-1}$. Discuta os resultados com base no teorema envolvido na construção do método de Romberg.

E 7.3.6. Calcule os valores da quadratura de Romberg de $R_{1,1}$ até $R_{4,4}$ para $\int_0^\pi \sin(x)dx$. Não use rotinas prontas neste problema.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 7.3.7. Sem usar rotinas prontas, use o método de integração de Romberg para obter a aproximação $R_{3,3}$ das seguintes integrais:

a) $\int_0^1 e^{-x^2} dx$

b) $\int_0^2 \sqrt{2 - \cos(x)} dx$

c) $\int_0^2 \frac{1}{\sqrt{2-\cos(x)}} dx$

E 7.3.8. Encontre uma expressão para $R_{2,2}$ em termos de $f(x)$ e verifique o método de Romberg $R_{2,2}$ é equivalente ao método de Simpson.

E 7.3.9. Considere o problema de aproximar numericamente o valor de

$$\int_0^{100} \left(e^{\frac{1}{2}\cos(x)} - 1 \right) dx$$

pelo método de Romberg. Usando rotinas prontas, faça o que se pede.

- Calcule $R(6,k)$, $k = 1, \ldots, 6$ e observe os valores obtidos.
- Calcule $R(7,k)$, $k = 1, \ldots, 6$ e observe os valores obtidos.
- Calcule $R(8,k)$, $k = 1, \ldots, 6$ e observe os valores obtidos.
- Discuta os resultados anteriores e proponha uma estratégia mais eficiente para calcular o valor da integral.

E 7.3.10. Encontre os pesos w_1, w_2 e w_3 tais que o esquema de quadratura dado por

$$\int_0^1 f(x)dx \approx w_1 f(0) + w_2 f(1/2) + w_3 f(1)$$

apresente máxima ordem de exatidão. Qual a ordem obtida?

E 7.3.11. Encontre a ordem de exatidão do seguinte método de integração:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \frac{2}{3} \left[f\left(\frac{-\sqrt{2}}{2} \right) + f(0) + f\left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right) \right]$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 7.3.12. Encontre a ordem de exatidão do seguinte método de integração:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = -\frac{1}{210}f'(-1) + \frac{136}{105}f(-1/2) - \frac{62}{105}f(0) + \frac{136}{105}f(1/2) + \frac{1}{210}f'(1)$$

E 7.3.13. Encontre os pesos w_1, w_2 e w_3 tal que o método de integração

$$\int_{0}^{1} f(x)dx \approx w_1 f(1/3) + w_2 f(1/2) + w_3 f(2/3)$$

tenha ordem de exatidão máxima. Qual é ordem obtida?

E 7.3.14. Explique por quê quando um método simples tem estimativa de erro de truncamento local de ordem h^n, então o método composto associado tem estimativa de erro de ordem h^{n-1}.

E 7.3.15. Quantos pontos são envolvidos no esquema de quadratura $R_{3,2}$? Qual a ordem do erro deste esquema de quadratura? Qual a ordem de exatidão desta quadradura?

E 7.3.16. Encontre os pesos w_1 e w_2 e as abcissas x_1 e x_2 tais que

$$\int_{-1}^{1} f(x) = w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2)$$

quando $f(x) = x^k,\ k = 0,1,2,3$, isto é o método apresente máxima ordem de exatidão possível com dois pontos.

Use esse método para avaliar o valor da integral das seguintes integrais e compare com os valores obtidos para Simpson e trapézio, bom como com o valor exato.

a) $\int_{-1}^{1} (2 + x - 5x^2 + x^3)\, dx$

b) $\int_{-1}^{1} e^x dx$

c) $\int_{-1}^{1} \frac{dx}{\sqrt{x^2+1}}$

E 7.3.17. Encontre os pesos w_1, w_2 e w_3 tal que o método de integração

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx w_1 f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + w_2 f(0) + w_3 f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

tenha ordem de exatidão máxima. Qual é ordem obtida?

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 7.3.18. Encontre aproximações para a seguinte integral via Gauss-Legendre com 2, 3, 4, 5, 6 e 7 pontos e compare com o valor exato

$$\int_{-1}^{1} x^4 e^{x^5} dx.$$

E 7.3.19. Encontre aproximações para as seguintes integrais via Gauss-Legendre com 4 e 5 pontos:

a) $\int_0^1 e^{-x^4} dx$

b) $\int_1^4 \log(x + e^x) dx$

c) $\int_0^1 e^{-x^2} dx$

E 7.3.20. Calcule numericamente o valor das seguintes integrais usando a quadratura de Gauss-Legendre para os seguintes valores de n:

n	$\int_0^1 e^{-4x^2} dx$	$\int_0^1 \frac{1}{1+x^2} dx$	$\int_0^1 x^4(1-x)^4 dx$	$\int_0^1 e^{-\frac{1}{x^2+1}} dx$
2				
3				
4				
5				
8				
10				
12				
14				
16	0.4410407	0.7853982	0.0015873	0.4619172

Exercícios finais

E 7.3.21. O valor exato da integral imprópria $\int_0^1 x \ln(x) dx$ é dado por

$$\int_0^1 x \ln(x) dx = \left(\frac{x^2}{2} \ln x - \frac{x^2}{4} \right) \Big|_0^1 = -1/4$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Aproxime o valor desta integral usando a regra de Simpson para $n = 3$, $n = 5$ e $n = 7$. Como você avalia a qualidade do resultado obtido? Por que isso acontece.

E 7.3.22. O valor exato da integral imprópria $\int_0^\infty e^{-x^2}dx$ é dado por $\frac{\sqrt{\pi}}{2}$. Escreva esta integral como

$$I = \int_0^1 e^{-x^2}dx + \int_0^1 u^{-2}e^{-1/u^2}du = \int_0^1 \left(e^{-x^2} + x^{-2}e^{-1/x^2}\right)dx$$

e aproxime seu valor usando o esquema de trapézios e Simpson para $n = 5$, $n = 7$ e $n = 9$.

E 7.3.23. Estamos interessados em avaliar numericamente a seguinte integral:

$$\int_0^1 \ln(x)\sin(x)dx$$

cujo valor com 10 casas decimais corretas é $-.2398117420$.

a) Aproxime esta integral via Gauss-Legendre com $n = 2$,$n = 3$, $n = 4$, $n = 5$, $n = 6$ e $n = 7$.

b) Use a identidade

$$\begin{aligned}\int_0^1 \ln(x)\sin(x)dx &= \int_0^1 \ln(x)xdx + \int_0^1 \ln(x)\left[\sin(x) - x\right]dx \\ &= \left(\frac{x^2}{2}\ln x - \frac{x^2}{4}\right)\Big|_0^1 + \int_0^1 \ln(x)\left[\sin(x) - x\right]dx \\ &= -\frac{1}{4} + \int_0^1 \ln(x)\left[\sin(x) - x\right]dx\end{aligned}$$

e aproxime a integral $\int_0^1 \ln(x)\left[\sin(x) - x\right]dx$ numericamente via Gauss-Legendre com $n = 2$, $n = 3$, $n = 4$, $n = 5$, $n = 6$ e $n = 7$.

c) Compare os resultados e discuta levando em consideração as respostas às seguintes perguntas: 1)Qual função é mais bem-comportada na origem? 2)Na segunda formulação, qual porção da solução foi obtida analiticamente e, portanto, sem erro de truncamento?

E 7.3.24. Considere o problema de calcular numericamente a integral $I = \int_{-1}^1 f(x)dx$ quando $f(x) = \frac{\cos(x)}{\sqrt{|x|}}$.

a) O que acontece quando se aplica diretamente a quadratura gaussiana com um número impar de abscissas?

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

b) Calcule o valor aproximado por quadratura gaussiana com $n = 2$, $n = 4$, $n = 6$ e $n = 8$.

c) Calcule o valor aproximado da integral removendo a singularidade

$$\begin{aligned} I &= \int_{-1}^{1} \frac{\cos(x)}{\sqrt{|x|}} dx = \int_{-1}^{1} \frac{\cos(x) - 1}{\sqrt{|x|}} dx + \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{|x|}} dx \\ &= \int_{-1}^{1} \frac{\cos(x) - 1}{\sqrt{|x|}} dx + 2\int_{0}^{1} \frac{1}{\sqrt{x}} dx = \int_{-1}^{1} \frac{\cos(x) - 1}{\sqrt{|x|}} dx + 4 \end{aligned}$$

e aplicando quadratura gaussiana com $n = 2$, $n = 4$, $n = 6$ e $n = 8$.

d) Calcule o valor aproximado da integral removendo a singularidade, considerando a paridade da função

$$I = 4 + \int_{-1}^{1} \frac{\cos(x) - 1}{\sqrt{|x|}} dx = 4 + 2\int_{0}^{1} \frac{\cos(x) - 1}{\sqrt{x}} dx = 4 + \sqrt{2}\int_{-1}^{1} \frac{\cos\left(\frac{1+u}{2}\right) - 1}{\sqrt{1+u}} du$$

e aplicando quadratura gaussiana com $n = 2$, $n = 4$, $n = 6$ e $n = 8$.

e) Expandindo a função $\cos(x)$ em série de Taylor, truncando a série depois do n-ésimo termos não nulo e integrando analiticamente.

f) Aproximando a função $\cos(x)$ pelo polinômio de Taylor de grau 4 dado por

$$P_4(x) = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24}$$

e escrevendo

$$\begin{aligned} I &= \int_{-1}^{1} \frac{\cos(x)}{\sqrt{|x|}} dx = \int_{-1}^{1} \frac{\cos(x) - P_4(x)}{\sqrt{|x|}} dx + \int_{-1}^{1} \frac{P_4(x)}{\sqrt{|x|}} dx \\ &= 2 \underbrace{\int_{0}^{1} \frac{\cos(x) - P_4(x)}{\sqrt{x}} dx}_{\text{Resolver numericamente}} + 2 \underbrace{\int_{0}^{1} \left(x^{-1/2} - \frac{x^{3/2}}{2} + \frac{x^{7/2}}{24} \right) dx}_{\text{Resolver analiticamente}} \end{aligned}$$

E 7.3.25. Calcule numericamente o valor das seguintes integrais com um erro relativo inferior a 10^{-4}.

a) $\displaystyle\int_{0}^{1} \frac{\sin(\pi x)}{x} dx$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

b) $\int_0^1 \frac{\sin(\pi x)}{x(1-x)}dx$

c) $\int_0^1 \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}x\right)}{\sqrt{x(1-x)}}dx$

d) $\int_0^1 \ln(x)\cos(x)dx$

E 7.3.26. Calcule as integrais $\int_0^1 \frac{e^x}{|x|^{1/4}}dx$ e $\int_0^1 \frac{e^{-x}}{|x|^{4/5}}dx$ usando procedimentos analíticos e numéricos.

E 7.3.27. Use a técnica de integração por partes para obter a seguinte identidade envolvendo integrais impróprias:

$$I = \int_0^\infty \frac{\cos(x)}{1+x}dx = \int_0^\infty \frac{\sin(x)}{(1+x)^2}dx.$$

Aplique as técnicas estudadas para aproximar o valor de I e explique por que a integral da direita é mais bem comportada.

E 7.3.28. Resolva a equação

$$x + \int_0^x e^{-y^2}dy = 5$$

com 5 dígitos significativos.

E 7.3.29. O calor específico (molar) de um sólido pode ser aproximado pela teoria de Debye usando a seguinte expressão

$$C_V = 9Nk_B\left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \int_0^{T_D/T} \frac{y^4e^y}{(e^y-1)^2}dy$$

onde N é a constante de Avogrado dado por $N = 6.022 \times 10^{23}$ e k_B é a constante de Boltzmann dada por $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$. T_D é temperatura de Debye do sólido.

a) Calcule o calor específico do ferro em quando $T = 200K$, $T = 300K$ e $T = 400K$ supondo $T_D = 470K$.

b) Calcule a temperatura de Debye de um sólido cujo calor específico a temperatura de $300K$ é $24J/K/mol$. Dica: aproxime a integral por um esquema numérico com um número fixo de pontos.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

c) Melhore sua cultura geral: A lei de Dulong-Petit para o calor específico dos sólidos precede a teoria de Debye. Verifique que a equação de Debye é consistente com Dulong-Petit, ou seja:

$$\lim_{T \to \infty} C_v = 3Nk_B.$$

Dica: use $e^y \approx 1 + y$ quando $y \approx 0$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Capítulo 8

Problemas de valor inicial

Neste capítulo, desenvolveremos técnicas numérica para aproximar a solução de problemas de valor inical da forma

$$\begin{aligned} y'(t) &= f(y(t),t) && \text{(8.1a)} \\ y(t_0) &= y_0 \ \text{(condição inicial).} && \text{(8.1b)} \end{aligned}$$

A ingógnita de um problema de valor inicial é uma função que satisfaz a equação diferencial (8.1a) e a condição inicial (8.1b).

Exemplo 95. Considere o seguinte problema de valor inicial

$$\begin{aligned} y'(t) &= 2y(t), && \text{(8.2a)} \\ y(t_0) &= 1. && \text{(8.2b)} \end{aligned}$$

A solução desta equação é dada pela função $y(t) = e^{2y}$ pois $y'(t) = 2e^{2t} = 2y(t)$ e $y(0) = e^0 = 1$.

Muito problemas de valor inicial da forma (8.1) não podem ser resolvidos exatamente, ou seja, sabe-se que a solução existe e é única, porém não podemos expressá-la em termos de funções elementares. Por isso é necessário calcular aproximações numéricas. Diversos métodos completamente diferentes estão disponíveis para aproximar uma função real.

Aqui nos limitaremos a estudar métodos que se fundamentam em tentar calcular $y(t)$ em um conjunto finito de valores de t. Esse conjunto de valores para t será denotado por $\{t_i\}_{i=1}^N$, isto é $\{t_1, t_2, t_3, \ldots, t_N\}$ e calculamos o valor aproximado da função solução $y(t_i)$ em cada ponto da malha usando esquemas numéricos.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

8.1 Método de Euler

Retornemos ao problema de valor inicial (8.1) dado por:

$$\begin{aligned} y'(t) &= f(y(t),t) && \text{(8.3a)} \\ y(0) &= y_0 \ \text{(condição inicial)} && \text{(8.3b)} \end{aligned}$$

O Método de Euler aplicado à solução desse problema consiste em aproximar a derivada $y'(t)$ por um esquema de primeira ordem do tipo

$$y'(t) = \frac{y(t+h) - y(t)}{h} + O(h), \ \ h > 0.$$

Aqui h é o passo do método, que consideraremos uma constante. Assim temos (8.3) se transforma em:

$$\begin{aligned} \frac{y(t+h) - y(t)}{h} &= f(y(t),t) + O(h) \\ y(t+h) &= y(t) + hf(y(t),t) + O(h^2). \end{aligned}$$

Definimos, então, $t^{(k)} = (k-1)h$ e $y^{(k)}$ como a aproximação para $y\left(t^{(k)}\right)$ produzida pelo Método de Euler. Assim, obtemos

$$\begin{aligned} y^{(k+1)} &= y^{(k)} + hf(y^{(k)},t^{(k)}) \ \text{(aproximação da EDO)}, && \text{(8.4)} \\ y^{(1)} &= y_0 \ \ \text{(condição inicial)}. && \text{(8.5)} \end{aligned}$$

O problema (8.4) consiste em um esquema iterativo, isto é, $y^{(1)}$ é a condição inicial; $y^{(2)}$ pode ser obtido de $y^{(2)}$; $y^{(3)}$, de $y^{(4)}$ e assim por diante, calculamos o termo $y^{(n)}$ apartir do anterior $y^{(n-1)}$.

Exemplo 96. Retornemos ao o problema de valor inicial do exemplo (8.2):

$$\begin{aligned} y'(t) &= 2y(t) \\ y(0) &= 1 \end{aligned}$$

Cuja solução é $y(t) = e^{2t}$. O método de Euler aplicado a este problema produz o seguinte esquema:

$$\begin{aligned} y^{(k+1)} &= y^{(k)} + 2hy^{(k)} = (1+2h)y^{(k)} \\ y^{(1)} &= 1, \end{aligned}$$

cuja solução é dada por

$$y^{(k)} = (1+2h)^{k-1}.$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Como $t = (k-1)h$, a solução aproximada pelo Método de Euler é

$$y(t) \approx \tilde{y}(t) = (1+2h)^{\frac{t}{h}}.$$

Observe que $\tilde{y}(t) \neq y(t)$, mas se h é pequeno, a aproximação é boa, pois

$$\lim_{h \to 0+} (1+2h)^{\frac{t}{h}} = e^{2t}.$$

Vamos agora, analisar o desempenho do Método de Euler usando um exemplo mais complicado, porém ainda simples suficiente para que possamos obter a solução exata:

Exemplo 97. Considere o problema de valor inicial relacionado à equação logística:

$$\begin{aligned} y'(t) &= y(t)(1-y(t)) \\ y(0) &= 1/2 \end{aligned}$$

Podemos obter a solução exata desta equação usando o método de separação de variáveis e o método das frações parciais. Para tal escrevemos:

$$\frac{dy(t)}{y(t)(1-y(t))} = dt$$

O termo $\frac{1}{y(1-y)}$ pode ser decomposto em frações parciais como $\frac{1}{y} - \frac{1}{1-y}$ e chegamos na seguinte equação diferencial:

$$\left(\frac{1}{y} + \frac{1}{1-y}\right) dy = dt.$$

Integrando termo-a-termo, temos a seguinte equação algébrica relacionando $y(t)$ e t:

$$\ln(y) - \ln(1-y) = t + C$$

Onde C é a constante de integração, que é definida pela condição inicial, isto é, $y = 1/2$ em $t = 0$. Substituindo, temos $C = 0$. O que resulta em:

$$\ln\left(\frac{y}{1-y}\right) = t$$

Equivalente a

$$\frac{y}{1-y} = e^t$$

e

$$y = (1-y)e^t$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Colocando o termo y em evidência, encontramos:

$$(1 + e^t)y = e^t \tag{8.6}$$

E, finalmente, encontramos a solução exata dada por $y(t) = \frac{e^t}{1+e^t}$.

Vejamos, agora, o esquema iterativo produzido pelo método de Euler:

$$\begin{aligned} y^{(k+1)} &= y^{(k)} + hy^{(k)}(1 - y^{(k)}), & \text{(8.7a)} \\ y^{(1)} &= 1/2. & \text{(8.7b)} \end{aligned}$$

Para fins de comparação, calculamos a solução de (97) e de (8.7) para alguns valores de t e de passo h e resumimos na tabela (8.1).

Figura 8.1: Tabela comparativa enter Método de Euler e solução exata para problema 97.

t	Exato	Euler $h = 0{,}1$	Euler $h = 0{,}01$
0	1/2	0,5	0,5
1/2	$\frac{e^{1/2}}{1+e^{1/2}} \approx 0{,}6224593$	0,6231476	0,6225316
1	$\frac{e}{1+e} \approx 0{,}7310586$	0,7334030	0,7312946
2	$\frac{e^2}{1+e^2} \approx 0{,}8807971$	0,8854273	0,8812533
3	$\frac{e^3}{1+e^3} \approx 0{,}9525741$	0,9564754	0,9529609

No exemplo a seguir, apresentamos um problema envolvendo uma equação não-autônoma, isto é, quando a função $f(y,t)$ depende explicitamente do tempo.

Exemplo 98. Resolva o problema de valor inicial

$$\begin{aligned} y' &= -y + t \\ y(0) &= 1, \end{aligned}$$

cuja solução exata é $y(t) = 2e^{-t} + t - 1$.

O esquema recursivo de Euler fica:

$$\begin{aligned} y^{(k+1)} &= y(k) - hy(k) + ht^{(k)} \\ y(0) &= 1 \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Comparação

t	Exato	Euler $h = 0{,}1$	Euler $h = 0{,}01$
0	1	1	1
1	$2e^{-1} \approx 0{,}7357589$	0,6973569	0,7320647
2	$2e^{-2} + 1 \approx 1{,}2706706$	1,2431533	1,2679593
3	$2e^{-3} + 2 \approx 2{,}0995741$	2,0847823	2,0980818

No exemplo 99, mostramos como o Método de Euler pode ser facilmente estendido para problemas envolvendo sistemas de equações diferenciais..

Exemplo 99. Escreva o processo iterativo de Euler para resolver numericamente o seguinte sistema de equações diferenciais

$$\begin{aligned} x' &= -y \\ y' &= x \\ x(0) &= 1 \\ y(0) &= 0, \end{aligned}$$

cuja solução exata é $x(t) = \cos(t)$ e $y(t) = \sin(t)$.

Par aplicar o Método de Euler a um sistema, devemos encarar as diversas incógnitas do sistema como formando um vetor, neste caso, encrevemos:

$$z(t) = \begin{bmatrix} x(t) \\ y(t) \end{bmatrix}.$$

O sistema é igualmente escrito na forma vetorial:

$$\begin{bmatrix} x^{(k+1)} \\ y^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x^{(k)} \\ y^{(k)} \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} -y^{(k)} \\ x^{(k)} \end{bmatrix}.$$

Observe que este processo iterativo é equivalente a:

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= x^{(k)} - hy^{(k)} \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + hx^{(k)}. \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exemplo 100. Escreva o problema de valor inicial de segunda ordem dado por

$$\begin{aligned} y'' + y' + y &= \cos(t), \\ y(0) &= 1, \\ y'(0) &= 0, \end{aligned}$$

como um problema envolvendo um sistema de primeira ordem.

A fim de transformar a equação diferencial dada em um sistema de equações de primeira ordem, introduzimos a substituição $w = y'$, de forma que obtermos o sistema:

$$\begin{aligned} y' &= w \\ w' &= -w - y + \cos(t) \\ y(0) &= 1 \\ w(0) &= 0 \end{aligned}$$

Portanto, o Método de Euler produz o seguinte processo iterativo:

$$\begin{aligned} y^{(k+1)} &= y^{(k)} + hw^{(k)}, \\ w^{(k+1)} &= w^{(k)} - hw^{(k)} - hy^{(k)} + h\cos(t^{(k)}), \\ y^{(1)} &= 1, \\ w^{(1)} &= 0. \end{aligned}$$

Exercícios

E 8.1.1. Resolva o problema de valor inicial dado por

$$\begin{aligned} y' &= -2y + \sqrt{y} \\ y(0) &= 1 \end{aligned}$$

com passo $h = 0.1$ e $h = 0.1$ para obter aproximações para $y(1)$. Compare com a solução exata dada por $y(t) = \left(1 + 2e^{-t} + e^{-2t}\right)/4$

E 8.1.2. Resolva o problema de valor inicial dado por

$$\begin{aligned} y' &= -2y + \sqrt{z} \\ z' &= -z + y \\ y(0) &= 0 \\ z(0) &= 2 \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

com passo $h = 0.2$, $h = 0.2$, $h = 0.02$ e $h = 0.002$ para obter aproximações para $y(2)$ e $z(2)$.

E 8.1.3. Resolva o problema de valor inicial dado por

$$\begin{aligned} y' &= \cos(ty(t)) \\ y(0) &= 1 \end{aligned}$$

com passo $h = 0.1$, $h = 0.01$, $h = 0.001$, $h = 0.0001$ e 0.00001 para obter aproximações para $y(2)$.

8.2 Método de Euler melhorado

O método de Euler foi o primeiro método que estudamos e sua principal virtude é a simplicidade. Outros métodos, no entanto, podem apresentar resultados superiores. Vamos apresentar agora uma pequena modificação ao Método de Euler, dando origem a um novo método chamado de Método de Euler Modificado ou Método de Euler Melhorado.

No método de Euler, usamos a seguinte iteração:

$$\begin{aligned} y^{(k+1)} &= y^{(k)} + hf(y^{(k)},t^{(k)}) \\ y^{(1)} &= y_0 \ \text{(condição inicial)} \end{aligned}$$

A ideia do método de Euler Melhorado é substituir a declividade $f(y^{(k)},t^{(k)})$ pela média aritmética entre $f(y^{(k)},t^{(k)})$ e $f(y^{(k+1)},t^{(k+1)})$, isto é, as declividades avaliadas no início e no fim do intervalo $[t^{(k)},t^{(k+1)}]$.

No entanto, não dispomos do valor de $y^{(k+1)}$ antes de executar o passo. Assim aproximamos esta grandeza pelo valor produzido pelo Método de Euler original:

$$\tilde{y}^{(k+1)} = y^{(k)} + hf(y^{(k)},t^{(k)}).$$

De posse desta aproximação, calculamos a média aritmética e, finalmente, com esta média, realizamos o passo do Método de Euler Melhorado. O processo iterativo de Euler Melhorado é, portanto, dado por:

$$\begin{aligned} \tilde{y}^{(k+1)} &= y^{(k)} + hf(y^{(k)},t^{(k)}) \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + \frac{h}{2}\left[f(y^{(k)},t^{(k)}) + f(\tilde{y}^{(k+1)},t^{(k+1)})\right] \\ y^{(1)} &= y_0 \ \text{(condição inicial)} \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Podemos reescrever este mesmo processo iterativo da seguinte forma:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(y^{(k)},t^{(k)}), \\ k_2 &= hf(y^{(k)}+k_1,t^{(k+1)}), \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} + \frac{k_1+k_2}{2}, \\ y^{(1)} &= y_0 \ \text{(condição inicial)}. \end{aligned}$$

Aqui k_1 e k_2 são variáveis auxiliares que representam as inclinações e devem ser calculadas a cada passo. Esta notação é compatível com a notação usada nos métodos de Runge-Kutta, uma família de esquemas iterativos para aproximar problemas de valor inicial, da qual o Método de Euler e o Método de Euler Melhorado são casos particulares. Veremos os métodos de Runge-Kutta na seção 8.4.

Exercícios

E 8.2.1. Use o Método de Euler melhorado para obter uma aproximação numérica do valor de $y(1)$ quando $y(t)$ satisfaz o seguinte problema de valor inicial

$$\begin{aligned} y'(t) &= -y(t) + e^{y(t)}, \\ y(0) &= 0, \end{aligned}$$

usando passos $h = 0{,}1$ e $h = 0{,}01$.

E 8.2.2. Use o Método de Euler e o Método de Euler melhorado para obter aproximações numéricas para a solução do seguinte problema de valor inicial para $t \in [0,1]$:

$$\begin{aligned} y'(t) &= -y(t) - y(t)^2, \\ y(0) &= 1, \end{aligned}$$

usando passo $h = 0{,}1$. Complete a tabela abaixo com os valores obtidos e compare com o valores obtidos da solução exata dada por $y(t) = \frac{1}{2e^t-1}$,

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

complete também com o erro absoluto obtido em cada método:

t	Exato	Euler	Euler Melhorado	Erro Euler	Erro Euler Melhorado
0.0					
0.1					
0.2					
0.3					
0.4					
0.5					
0.6					
0.7					
0.8					
0.9					
1.0					

8.3 Ordem de precisão

8.3.1 Ordem de precisão do Método de Euler

Considere o problema de valor inicial dado por

$$\begin{aligned} y'(t) &= f(y(t),t), \\ y(0) &= y_0. \end{aligned}$$

No método de Euler, aproximamos a derivada $y'(t)$ por um esquema de primeira ordem do tipo

$$y'(t) = \frac{y(t+h) - y(t)}{h} + O(h), \;\; h > 0$$

de forma que tínhamos

$$y(t+h) = y(t) + hf(y(t),t) + O(h^2) \tag{8.8}$$

Assim $y(h) = y(0) + hf(y_0,t) + O(h^2) = y^{(1)} + O(h^2)$ e concluimos que o erro entre a solução exata $y(h)$ e sua aproximação pelo Método de Euler é da ordem de h^2.

No entanto, se fixarmos um instante de tempo $t = t_N$, o erro entre a solução exata $y(t_N)$ e sua aproximação y_N envolve o acúmulo de N passos, cada um com erro da ordem de h^2. Como o número de passos é inversamente proporcional ao tamanho de passo h, o erro total é da ordem de h. Observamos que

$$\begin{aligned} y(t_1) &= y(t_0) + hf(y(t_0),t_0) + ch^2 \\ &= y_0 + hf(y_0,t_0) + ch^2 = y_1 + ch^2 \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

onde ch^2 substitui $O(h^2)$ para alguma constante $c \neq 0$ e y_i é a aproximação pelo método de Euler para o valor exato $y(t_i)$. Subsequentemente, temos

$$\begin{aligned} y(t_2) &= y(t_1) + hf(y(t_1),t_1) + ch^2 \\ &= y_1 + ch^2 + ch^2 = y_1 + 2ch^2 \end{aligned}$$

Assim obtemos um expressão geral para o valor exato $y(t_N)$ em termos do valor aproximado y_N:

$$\begin{aligned} y(t_N) &= y(t_{N_1}) + hf(y(t_{N_1}),t_1) + ch^2 \\ &= y_N + (N-1)ch^2 + ch^2 = y_N + Nch^2. \end{aligned}$$

Como $N = (t_f - t_0)/h$, temos

$$y(t_N) = = y_N + \frac{t - t_0}{h} ch^2 = y_N + c_2 h,$$

onde $c_2 = (t - t_0)c$, ou seja, o erro entre o valor exato e o aproximado é de ordem h.

8.3.2 Ordem de precisão do Método de Euler Melhorado

Para obter a do erro de precisão do método de Euler Melhorado vamos seguir o mesmo caminho percorrido para obter a estimativa do método de Euler. Primeiramente, precisamos de um expressão análoga a (8.8), ou seja, precisamos demonstrar que o erro de cada passo é da ordem de h^3:

$$y(t+h) = y(t) + \frac{h}{2} f(y(t),t) + \frac{h}{2} f(y(t) + hf(t,y(t))),t+h) + O(h^3) \quad (8.9)$$

De fato, tomando a diferença do termo da esquerda o os termos da direita, temos:

$$\begin{aligned} & y(t+h) - \left(y(t) + \frac{h}{2} f(y(t),t) + \frac{h}{2} f(y(t) + hf(t,y(t))),t+h) \right) \\ & = y(t) + hy'(t) + \frac{h^2}{2} y''(t) + O(h^3) \\ & - \left(y(t) + \frac{h}{2} y'(t) + \frac{h}{2} f(y(t) + hf(t,y(t))),t+h) \right), \end{aligned}$$

onde usamos uma expansão em série de Taylor para $y(t+h)$ e a equação diferencial $y'(t) = f(y(t),t)$. Portanto,

$$\begin{aligned} & y(t+h) - \left(y(t) + \frac{h}{2} f(y(t),t) + \frac{h}{2} f(y(t) + hf(t,y(t))),t+h) \right) \\ & = \frac{h}{2} y'(t) + \frac{h^2}{2} y''(t) - \frac{h}{2} f(y(t) + hf(t,y(t))),t+h) + O(h^3). \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Agora, usamos a série de Taylor de $f(y(t)+hf(y(t),t),t+h)$ e, torno de (y,t):

$$\begin{aligned}
&y(t+h) - \left(y(t) + \frac{h}{2}f(y(t),t) + \frac{h}{2}f(y(t)+hf(t,y(t))),t+h)\right) \\
&= \frac{h}{2}y'(t) + \frac{h^2}{2}y''(t) + O(h^3) \\
&-\frac{h}{2}\left(f(y(t),t) + \frac{\partial f(y(t),t)}{\partial t}h + \frac{\partial f(t,y(t))}{\partial y}hf(t,y(t)) + O(h^2)\right).
\end{aligned}$$

Usando a equação diferencial $y'(t) = f(y(t),t)$ obtemos

$$y''(t) = \frac{f(y(t),t)}{\partial t} + \frac{f(y(t),t)}{\partial y}y'(t) = \frac{f(y(t),t)}{\partial t} + \frac{f(y(t),t)}{\partial y}f(y(t),t).$$

Logo,

$$\begin{aligned}
&y(t+h) - \left(y(t) + \frac{h}{2}f(y(t),t) + \frac{h}{2}f(y(t)+hf(t,y(t))),t+h)\right) \\
&= \frac{h}{2}y'(t) + \frac{h^2}{2}y''(t) + O(h^3) \\
&-\frac{h}{2}\left(f(y(t),t) + hy''(t) + O(h^2)\right) \\
&= \frac{h}{2}y'(t) + \frac{h^2}{2}y''(t) \\
&-\frac{h}{2}\left(y'(t) + hy''(t)\right) + O(h^3) = O(h^3)
\end{aligned}$$

Portanto, a expressão (8.9) é válida.

Para obter o erro acumulado em um ponto t_N usamos a expressão (8.9) e repetimos alguns passos feitos na seção anterior:

$$\begin{aligned}
y(t_1) &= y(t_0) + \frac{h}{2}f(y(t_0),t_0) + \frac{h}{2}f(y(t_0)+hf(y(t_0),t_0),t_0+h) + ch^3 \\
&= y_1 + ch^3
\end{aligned}$$

onde ch^3 substitui $O(h^3)$ para alguma constante $c \neq 0$ e y_i é a aproximação pelo método de Euler melhorado para o valor exato $y(t_i)$. Subsequentemente, temos

$$\begin{aligned}
y(t_2) &= y(t_1) + \frac{h}{2}f(y(t_1),t_1) + \frac{h}{2}f(y(t_1)+hf(y(t_1),t_1),t_1+h) + ch^3 \\
&= y_1 + ch^3 + ch^3 = y_1 + 2ch^3
\end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Assim obtemos um expressão geral para o valor exato $y(t_N)$ em termos do valor aproximado y_N:

$$y(t_N) = y_N + Nch^3.$$

Como $N = (t_f - t_0)/h$, temos

$$y(t_N) \quad = \quad = y_N + \frac{t - t_0}{h} ch^3 = y_N + c_2 h^2,$$

onde $c_2 = (t - t_0)c$, ou seja, o erro entre o valor exato e o aproximado é de ordem h^2.

8.4 Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta consistem em iterações do tipo:

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + w_1 k_1 + \ldots + w_n k_n$$

onde

$$\begin{aligned}
k_1 &= hf(y^{(k)}, t^{(k)}) \\
k_2 &= hf(y^{(k)} + \alpha_{2,1} k_1, t^{(k)} + \beta_2 h) \\
k_3 &= hf(y^{(k)} + \alpha_{3,1} k_1 + \alpha_{3,2} k_2, t^{(k)} + \beta_3 h) \\
&\vdots \\
k_n &= hf(y^{(k)} + \alpha_{n,1} k_1 + \alpha_{n,2} k_2 + \ldots \alpha_{n,n-1} k_{n-1}, t^{(k)} + \beta_n h)
\end{aligned}$$

Os coeficientes são escolhidos de forma que a expansão em Taylor de $y^{(k+1)}$ e $y^{(k)} + w_1 k_1 + \ldots + w_n k_n$ coincidam até ordem $n + 1$.

Exemplo 101. O método de Euler melhorado é um exemplo de Runge-Kutta de segunda ordem

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \frac{k_1 + k_2}{2}$$

onde $k_1 = hf(y^{(n)}, t^{(n)})$ e $k_2 = hf(y^{(n)} + k_1, t^{(n)} + h)$

8.4.1 Métodos de Runge-Kutta - Quarta ordem

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

onde

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(y^{(n)},t^{(n)}) \\ k_2 &= hf(y^{(n)}+k_1/2,t^{(n)}+h/2) \\ k_3 &= hf(y^{(n)}+k_2/2,t^{(n)}+h/2) \\ k_4 &= hf(y^{(n)}+k_3,t^{(n)}+h) \end{aligned}$$

Este método tem ordem de truncamento local de quarta ordem. Uma discussão heurística usando método de Simpson pode ajudar a compreender os estranhos coeficientes:

$$\begin{aligned} y(t^{(n+1)})-y(t^{(n)}) &= \int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} f(y(s),s)ds \\ &\approx \frac{h}{6}\left[f\left(y(t^{(n)}),t^{(n)}\right)+4f\left(y(t^{(n)}+h/2),t^{(n)}+h/2\right)\right. \\ &+ \left. f\left(y(t^{(n)}+h),t^{(n)}+h\right)\right] \\ &\approx \frac{k_1+4(\frac{k_2+k_3}{2})+k_4}{6} \end{aligned}$$

onde k_1 e k_4 representam as inclinações nos extremos e k_2 e k_3 são duas aproximações diferentes para a inclinação no meio do intervalo.

8.5 Métodos de passo múltiplo - Adams-Bashforth

O método de Adams-Bashforth consiste de um esquema recursivo do tipo:

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \sum_{j=0}^{k} w_j f(y^{(n-j)},t^{(n-j)})$$

Exemplo 102. Adams-Bashforth de segunda ordem

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \frac{h}{2}\left[3f\left(y^{(n)},t^{(n)}\right) - f\left(y^{(n-1)},t^{(n-1)}\right)\right]$$

Exemplo 103. Adams-Bashforth de terceira ordem

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \frac{h}{12}\left[23f\left(y^{(n)},t^{(n)}\right) - 16f\left(y^{(n-1)},t^{(n-1)}\right) + 5f\left(y^{(n-2)},t^{(n-2)}\right)\right]$$

Exemplo 104. Adams-Bashforth de quarta ordem

$$\begin{aligned} y^{(n+1)} = y^{(n)} + \frac{h}{24}&\left[55f\left(y^{(n)},t^{(n)}\right) - 59f\left(y^{(n-1)},t^{(n-1)}\right)\right. \\ &\left. + 37f\left(y^{(n-2)},t^{(n-2)}\right) - 9f\left(y^{(n-3)},t^{(n-3)}\right)\right] \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Os métodos de passo múltiplo evitam os múltiplos estágios do métodos de Runge-Kutta, mas exigem ser "iniciados"com suas condições iniciais.

8.6 Métodos de passo múltiplo - Adams-Moulton

O método de Adams-Moulton consiste de um esquema recursivo do tipo:

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \sum_{j=-1}^{k} w_j f(y^{(n-j)},t^{(n-j)})$$

Exemplo 105. Adams-Moulton de quarta ordem

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \frac{h}{24}\left[9f\left(y^{(n+1)},t^{(n+1)}\right) + 19f\left(y^{(n)},t^{(n)}\right) - 5f\left(y^{(n-1)},t^{(n-1)}\right) + f\left(y^{(n-2)},t^{(n-2)}\right)\right]$$

O método de Adams-Moulton é implícito, ou seja, exige que a cada passo, uma equação em $y^{(n+1)}$ seja resolvida.

8.7 Estabilidade

Consideremos o seguinte problema de teste:

$$\begin{cases} y' &= -\alpha y \\ y(0) &= 1 \end{cases}$$

cuja solução exata é dada por $y(t) = e^{-\alpha t}$.

Considere agora o método de Euler aplicado a este problema com passa h:

$$\begin{cases} y^{(k+1)} &= y^{(k)} - \alpha h y^{(k)} \\ y^{(1)} &= 1 \end{cases}$$

A solução exata do esquema de Euler é dada por

$$y^{(k+1)} = (1 - \alpha h)^k$$

e, portanto,

$$\tilde{y}(t) = y^{(k+1)} = (1 - \alpha h)^{t/h}$$

Fixamos um $\alpha > 0$, de forma que $y(t) \to 0$. Mas observamos que $\tilde{y}(t) \to 0$ somente quando $|1 - \alpha h| < 1$ e solução positivas somente quando $\alpha h < 1$.

Conclusão: Se o passo h for muito grande, o método pode se tornar instável, produzindo solução espúrias.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Exercícios

E 8.7.1. Resolva o problema 1 pelos diversos métodos e verifique heuristicamente a estabilidade para diversos valores de h.

Exercícios finais

E 8.7.2. Considere o seguinte modelo para o crescimento de uma colônia de bactérias:

$$\frac{dy}{dt} = \alpha y(A - y)$$

onde y indica a densidade de bactérias em unidades arbitrárias na colônia e α e A são constantes positivas. Pergunta-se:

a) Qual a solução quando a condição inicial $y(0)$ é igual a 0 ou A?

b) O que acontece quando a condição inicial $y(0)$ é um número entre 0 e A?

c) O que acontece quando a condição inicial $y(0)$ é um número negativo?

d) O que acontece quando a condição inicial $y(0)$ é um número positivo maior que A?

e) Se $A = 10$ e $\alpha = 1$ e $y(0) = 1$, use métodos numéricos para obter tempo necessário para que a população dobre?

f) Se $A = 10$ e $\alpha = 1$ e $y(0) = 4$, use métodos numéricos para obter tempo necessário para que a população dobre?

E 8.7.3. Considere o seguinte modelo para a evolução da velocidade de um objeto em queda (unidades no SI):

$$v' = g - \alpha v^2$$

Sabendo que $g = 9{,}8$ e $\alpha = 10^{-2}$ e $v(0) = 0$. Pede-se a velocidade ao tocar o solo, sabendo que a altura inicial era 100.

E 8.7.4. Considere o seguinte modelo para o oscilador não-linear de Van der Pol:

$$y''(t) - \alpha(A - y(t)^2)y'(t) + w_0^2 y(t) = 0$$

onde A, α e w_0 são constantes positivas.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

- Encontre a frequência e a amplitude de oscilações quando $w_0 = 1$, $\alpha = .1$ e $A = 10$. (Teste diversas condições iniciais)
- Estude a dependência da frequência e da amplitude com os parâmetros A, α e w_0. (Teste diversas condições iniciais)
- Que diferenças existem entre esse oscilador não-linear e o oscilador linear?

E 8.7.5. Considere o seguinte modelo para um oscilador não-linear:

$$\begin{aligned} y''(t) - \alpha(A - z(t))y'(t) + w_0^2 y(t) &= 0 \\ Cz'(t) + z(t) &= y(t)^2 \end{aligned}$$

onde A, α, w_0 e C são constantes positivas.

- Encontre a frequência e a amplitude de oscilações quando $w_0 = 1$, $\alpha = .1$, $A = 10$ e $C = 10$. (Teste diversas condições iniciais)
- Estude a dependência da frequência e da amplitude com os parâmetros A, α, w_0 e C. (Teste diversas condições iniciais)

E 8.7.6. Considere o seguinte modelo para o controle de temperatura em um processo químico:

$$\begin{aligned} CT'(t) + T(t) &= \kappa P(t) + T_{ext} \\ P'(t) &= \alpha(T_{set} - T(t)) \end{aligned}$$

onde C, α e κ são constantes positivas e $P(t)$ indica o potência do aquecedor. Sabendo que T_{set} é a temperatura desejada, interprete o funcionamento esse sistema de controle.

- Calcule a solução quando a temperatura externa $T_{ext} = 0$, $T_{set} = 1000$, $C = 10$, $\kappa = .1$ e $\alpha = .1$. Considere condições iniciais nulas.
- Quanto tempo demora o sistema para atingir a temperatura 900K?
- Refaça os dois primeiros itens com $\alpha = 0.2$ e $\alpha = 1$
- Faça testes para verificar a influência de T_{ext}, α e κ na temperatura final.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 8.7.7. Considere a equação do pêndulo dada por:

$$\frac{d^2\theta(t)}{dt^2} + \frac{g}{l}\sin(\theta(t)) = 0$$

onde g é o módulo da aceleração da gravidade e l é o comprimento da haste.

- Mostre analiticamente que a energia total do sistema dada por

  $$\frac{1}{2}\left(\frac{d\theta(t)}{dt}\right)^2 - \frac{g}{l}\cos(\theta(t))$$

  é mantida constante.

- Resolva numericamente esta equação para $g = 9{,}8m/s^2$ e $l = 1m$ e as seguintes condições iniciais:

  $\theta(0) = 0.5$ e $\theta'(0) = 0$.

  $\theta(0) = 1.0$ e $\theta'(0) = 0$.

  $\theta(0) = 1.5$ e $\theta'(0) = 0$.

  $\theta(0) = 2.0$ e $\theta'(0) = 0$.

  $\theta(0) = 2.5$ e $\theta'(0) = 0$.

  $\theta(0) = 3.0$ e $\theta'(0) = 0$.

Em todos os casos, verifique se o método numérico reproduz a lei de conservação de energia e calcule período e amplitude.

E 8.7.8. Considere o modelo simplificado de FitzHugh-Nagumo para o potencial elétrico sobre a membrana de um neurônio:

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dt} &= V - V^3/3 - W + I \\ \frac{dW}{dt} &= 0.08(V + 0.7 - 0.8W) \end{aligned}$$

onde I é a corrente de excitação.

- Encontre o único estado estacionário (V_0,W_0) com $I = 0$.

- Resolva numericamente o sistema com condições iniciais dadas por (V_0,W_0) e

  $I = 0$

  $I = 0.2$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

$I = 0.4$

$I = 0.8$

$I = e^{-t/200}$

E 8.7.9. Considere o problema de valor inicial dado por

$$\begin{aligned} \frac{du(t)}{dt} &= -u(t) + e^{-t} \\ u(0) &= 0 \end{aligned}$$

Resolva analiticamente este problema usando as técnicas elementares de equações diferenciais ordinárias. A seguir encontre aproximações numéricas usando os métodos de Euler, Euler modificado, Runge-Kutta Clássico e Adams-Bashforth de ordem 4 conforme pedido nos itens.

a) Construa uma tabela apresentando valores com 7 algarismos significativos para comparar a solução analítica com as aproximações numéricas produzidas pelos métodos sugeridos. Construa também uma tabela para o erro absoluto obtido por cada método numérico em relação à solução analítica. Nesta última tabela, expresse o erro com 2 algarismos significativos em formato científico. Dica: $format('e',8)$ para a segunda tabela.

	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5
Analítico					
Euler					
Euler modificado					
Runge-Kutta Clássico					
Adams-Bashforth ordem 4					

	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5
Euler					
Euler modificado					
Runge-Kutta Clássico					
Adams-Bashforth ordem 4					

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

b) Calcule o valor produzido por cada um desses método para $u(1)$ com passo $h = 0.1$, $h = 0.05$, $h = 0.01$, $h = 0.005$ e $h = 0.001$. Complete a tabela com os valores para o erro absoluto encontrado.

	0.1	0.05	0.01	0.005	0.001
Euler					
Euler modificado					
Runge-Kutta Clássico					
Adams-Bashforth ordem 4					

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Apêndice A

Rápida Introdução ao Scilab

A.1 Sobre o Scilab

Scilab é uma linguagem de programação associada com uma rica coleção de algoritmos numéricos que cobrem muitos aspectos de problemas de computação científica. Do ponto de vista de *software*, Scilab é uma linguagem interpretada. A linguagem Scilab permite a compilação dinâmica e lincagem com outras linguagens como Fortran e C. Do ponto de vista de licença, Scilab é um software gratuito no sentido que o usuário não paga por ele. Além disso, Scilab é um software de código aberto disponível sobre a licença Cecill [1]. Scilab esta disponível para Linux, Mac Os e Windows. Ajuda *online* esta disponível em português e muitas outras línguas. Do ponto de vista científico, Scilab começou focado em soluções computacionais para problemas de álgebra linear, mas, rapidamente, o número de aplicações se estendeu para muitas áreas da computação científica.

As informações deste apêndice foram adaptadas do tutorial "Introduction to Scilab" [2], veja-o para maiores informações. Além disso, recomendamos visitar o sítio oficial do Scilab:

`www.scilab.org`

O manual oficial do Scilab em português pode ser obtido em:

`http://help.scilab.org/docs/5.5.2/pt_BR/index.html`

A.1.1 Instalação e Execução

O Scilab pode ser executado normalmente nos sistemas operacionais Linux, Mac Os e Windows. Muitas distribuições de Linux (Linux Mint, Ubuntu,

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

etc.) têm o Scilab no seu sistema de pacotes (incluindo binário e documentação em várias línguas). Alternativamente, no sítio de internet oficial do Scilab pode-se obter mais versões de binários e documentação para instalação em sistemas Linux. Para a instalação em sistemas Mac Os e Windows, visite sítio de internet oficial do Scilab.

A.1.2 Usando o Scilab

O uso do Scilab pode ser feito de três formas básicas:

- usando o **console** de modo iterativo;
- usando a função `exec` para executar um código Scilab digitado em um arquivo externo;
- usando processamento *bash*.

Exemplo 106. Considere o seguinte pseudocódigo:

```
s = "Olá Mundo!". (Sem imprimir na tela o resultado.)
saída(s). (Imprime na tela.)
```

Implemente este pseudocódigo no Scilab: a) usando somente o console do Scilab; b) usando o editor do Scilab e executando o código com a função `exec`; c) usando processamento *bash*.

Solução. Seguem as soluções de cada item:

a) No console temos:

```
-->s = "Olá Mundo!";
-->disp(s)
```

b) Para abrir o editor do Scilab pode-se digitar no `prompt`:

```
-->editor()
```

ou, alternativamente:

```
-->scinotes
```

Então, digita-se no editor o código:

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
s = "Olá Mundo!"
disp(s)
```

salva-se em um arquivo de sua preferência (por exemplo, `~/foo.sce`) e executa-se o código clicando no botão "*play*" disponível na barra de botões do Scinotes.

c) Para executar o código em processamento *bash*, digita-se em um editor o código:

```
s = "Olá Mundo!"
disp(s)
```

salva-se em um arquivo de sua preferência (por exemplo, `~/foo.sce`) e executa-se em um console do sistema usando a linha de comando:

```
$ scilab -nw -f ~/foo.sce
```

Digite, então, `quit` para voltar ao prompt do sistema.

◊

A.2 Elementos da linguagem

Scilab é uma linguagem interpretada em que todas as variáveis são matrizes. Uma variável é criada quando um valor é atribuído a ela. Por exemplo:

```
-->x=1
 x  =
    1.
-->y = x * 2
 y  =
    2.
```

a variável `x` recebe o valor `double` 1 e, logo após, na segunda linha de comando, a variável `y` recebe o valor `double` 2. Observamos que o símbolo `=` significa o operador de atribuição não o de igualdade. O operador lógico de igualdade no Scilab é `==`.

Comentários e continuação de linha de comando são usados como no seguinte exemplo:

```
-->//Isto é um comentário
-->x = 1 ..
-->+ 2
 x  =
    3.
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

A.2.1 Operações matemáticas elementares

No Scilab, os operadores matemáticos elementares são os seguintes:

```
+ adição
- subtração
* multiplicação
/ divisão
^ potenciação (igual a **)
' transposto conjugado
```

A.2.2 Funções e constantes elementares

Várias funções e constantes elementares já estão pré-definidas no Scilab. Por exemplo:

```
-->cos(%pi) //cosseno de pi
 ans  =
  - 1.

-->exp(1) == %e //número de Euler
 ans  =
  T

-->log(1) //logarítmo natual de 1
 ans  =
    0.
```

Para mais informações sobre quais as funções e constantes pré-definidas no Scilab, consulte o manual, seções "Funções elementares" e o carácter especial "%".

A.2.3 Operadores lógicos

No Scilab, o valor lógico verdadeiro é escrito como `%T` e o valor lógico falso como `%F`. Temos os seguintes operadores lógicos disponíveis:

```
&  e lógico
|  ou lógico
~  negação
== igualdade
~= diferente
<  menor que
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
>  maior que
<= menor ou igual que
>= maior ou igual que
```

Exemplo 107. Se $x = 2$, então x é maior ou igual a 1 e menor que 3?

Solução. No Scilab, temos:

```
-->x=2;

-->(x >= 1) & (x < 3)
 ans  =

  T
```

◊

A.3 Matrizes

No Scilab, matriz é o tipo básico de dados, a qual é definida por seu número de linhas, colunas e tipo de dado (real, inteiro, lógico, etc.). Uma matriz $A = [a_{i,j}]_{i,j=1}^{m,n}$ no Scilab é definida usando-se a seguinte sintaxe:

```
A = [ a11 , a12 , ... , a1n ; ...; am1 , am2 , ... , amn ]
```

Exemplo 108. Defina a matriz:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix}$$

Solução. No Scilab, digitamos:

```
-->A = [1 , 2 , 3 ; 4 , 5 , 6]
 A  =

    1.    2.    3.
    4.    5.    6.
```

◊

A seguinte lista contém uma série de funções que geram matrizes particulares:

```
eye      matrix identidade
linspace vetor de elementos linearmente espaçados
ones     matriz cheia de uns
zeros    matriz nula
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

A.3.1 O operador ":"

O operador ":" cria um vetor linha de elementos. A sintaxe:

```
v = i:s:j
```

cria um vetor linha:

$$v = [i,\, i+s,\, i+2s, \ldots, i+ns]$$

onde n é o maior inteiro tal que $i + ns < j$.

Exemplo 109. Veja as seguintes linhas de comando:

```
-->v = 10:-2:3
 v  =

    10.    8.    6.    4.

-->u = 2:6
 u  =
    2.    3.    4.    5.    6.
```

A.3.2 Obtendo dados de uma matriz

A função `size` retorna o tamanho de uma matriz, por exemplo:

```
-->A = ones(3,2)
 A  =

    1.    1.
    1.    1.
    1.    1.

-->[nl, nc] = size(A)
 nc  =

    2.
 nl  =

    3.
```

informando que a matriz `A` tem três linhas e duas colunas.

Existem vários métodos para se acessar os elementos de uma matriz dada `A`:

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

- a matriz inteira acessa-se com a sintaxe:

  ```
  A
  ```

- o elemento da i-ésima linha e j-ésima coluna acessa-se usando a sintaxe:

  ```
  A(i,j)
  ```

- o bloco formado pelas linhas i_1, i_2 e pelas colunas j_1, j_2 obtém-se usando a sintaxe:

  ```
  A(i1:i2, j1:j2)
  ```

Exemplo 110. Veja as seguintes linhas de comando:

```
-->A = rand(3,4) //gera uma matriz randômica
 A  =

    0.2113249    0.3303271    0.8497452    0.0683740
    0.7560439    0.6653811    0.6857310    0.5608486
    0.0002211    0.6283918    0.8782165    0.6623569

-->A //mostra toda a matriz A
 ans  =

    0.2113249    0.3303271    0.8497452    0.0683740
    0.7560439    0.6653811    0.6857310    0.5608486
    0.0002211    0.6283918    0.8782165    0.6623569

-->A(2,3) //acessa o elemento a23
 ans  =

    0.6857310

-->A(2:3,2:4) //acessa um bloco de A
 ans  =

    0.6653811    0.6857310    0.5608486
    0.6283918    0.8782165    0.6623569
```

Definida uma matriz A no Scilab, as seguintes sintaxes são bastante úteis:

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
A(:,:)   toda a matriz
A(i:j,k) os elementos das linhas i até j (inclusive) da k-ésima coluna
A(i,j:k) os elementos da i-ésina linha das colunas j até k (inclusive)
A(i,:)   a i-ésima linha da matriz
A(:,j)   a j-ésima coluna da matriz
A(i,$)   o elemento da i-ésima linha e da última coluna
A($,j)   o elemento da última linha e da j-ésima coluna
```

Exemplo 111. Veja as seguintes linhas de comando:

```
-->B = rand(4,4)
 B  =

    0.2113249    0.6653811    0.8782165    0.7263507
    0.7560439    0.6283918    0.0683740    0.1985144
    0.0002211    0.8497452    0.5608486    0.5442573
    0.3303271    0.6857310    0.6623569    0.2320748

-->aux = B(:,2); B(:,2) = B(:,3); B(:,3) = aux
 B  =

    0.2113249    0.8782165    0.6653811    0.7263507
    0.7560439    0.0683740    0.6283918    0.1985144
    0.0002211    0.5608486    0.8497452    0.5442573
    0.3303271    0.6623569    0.6857310    0.2320748
```

A.3.3 Operações matriciais e elemento-a-elemento

As operações matriciais elementares seguem a mesma sintaxe que as operações elementares de números. Agora, no Scilab, também podemos fazer operações elemento-a-elemento colocando um ponto "." antes da operação desejada.

Aqui, temos as sintaxes análogas entre operações matriciais e operações elemento-a-elemento:

```
+ adição                .+ adição elemento-a-elemento
- subtração             .- subtração elemento-a-elemento
* multiplicação         .* multiplicação elemento-a-elemento
                        ./ divisão elemento-a-elemento
^ potenciação           .^ potenciação elemento-a-elemento
' transposta conjugada .' transposta (não conjugada)
```

Exemplo 112. Veja as seguintes linhas de comando:

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
-->A = ones (2 ,2)
 A  =

    1.    1.
    1.    1.

-->B = 2 * ones (2 ,2)
 B  =

    2.    2.
    2.    2.

-->A * B
 ans  =

    4.    4.
    4.    4.

-->A .* B
 ans  =

    2.    2.
    2.    2.
```

A.4 Estruturas de ramificação e repetição

O Scilab contém estruturas de repetição e ramificação padrões de linguagens estruturadas.

A.4.1 A instrução de ramificação "if"

A instrução "if" permite executar um pedaço do código somente se uma dada condição for satisfeita.

Exemplo 113. Veja o seguinte código Scilab:

```
i = 2
if ( i == 1 ) then
    disp ( " Hello ! " )
elseif ( i == 2 ) then
    disp ( " Goodbye ! " )
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
elseif ( i == 3 ) then
    disp ( " Tchau ! " )
else
    disp ( " Au Revoir ! " )
end
```

Qual é a saída apresentada no console do Scilab? Porquê?

A.4.2 A instrução de repetição "for"

A instrução `for` permite que um pedaço de código seja executado repetidamente.

Exemplo 114. Veja o seguinte código:

```
for i = 1:5
    disp(i)
end
```

O que é mostrado no console do Scilab?

Exemplo 115. Veja o seguinte código:

```
for j = 1:2:8
    disp(j)
end
```

O que é mostrado no console do Scilab?

Exemplo 116. Veja o seguinte código:

```
for k = 10:-3:1
    disp(k)
end
```

O que é mostrado no console do Scilab?

Exemplo 117. Veja o seguinte código:

```
for i = 1:3
    for j = 1:3
        disp([i,j])
    end
end
```

O que é mostrado no console do Scilab?

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

A.4.3 A instrução de repetição "while"

A instrução `while` permite que um pedaço de código seja executado repetidamente até que uma dada condição seja satisfeita.

Exemplo 118. Veja o seguinte código Scilab:

```
s = 0
i = 1
while ( i <= 10 )
   s = s + i
   i = i + 1
end
```

Qual é o valor de `s` ao final da execução? Porquê?

A.5 Funções

Além das muitas funções já pré-definidas no Scilab, o usuário podemos definir nossas próprias funções. Para tanto, existem duas instruções no Scilab:

- `deff`
- `function`

A instrução `deff` é apropriada para definirmos funções com poucas computações. Quando a função exige um grande quantidade de código para ser definida, a melhor opção é usar a instrução `function`. Veja os seguintes exemplos:

Exemplo 119. O seguinte código:

```
-->deff('y = f(x)', 'y = x + sin(x)')
```

define, no Scilab, a função $f(x) = x + \text{sen } x$.

Observe que $f(\pi) = \pi$. Confirme isso computando:

```
-->f(%pi)
```

no Scilab.

Alternativamente, definimos a mesma função com o código:

```
function [y] = f(x)
   y = x + sin(x)
endfunction
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Verifique!

Exemplo 120. O seguinte código Scilab:

```
function [z] = h(x,y)
   if (x < y) then
      z = y - x
   else
      z = x - y
   end
endfunction
```

define a função:

$$h(x,y) = \begin{cases} y - x & , x < y \\ x - y & , x \geq y \end{cases}$$

Exemplo 121. O seguinte código:

```
function [y] = J(x)
   y(1,1) = 2*x(1)
   y(1,2) = 2*x(2)

   y(2,1) = -x(2)*sin(x(1)*x(2))
   y(2,2) = -x(1)*sin(x(1)*x(2))
endfunction
```

define a matriz jacobiana $J(x_1,x_2) := \frac{\partial(f_1,f_2)}{\partial(x_1,x_2)}$ da função:

$$\boldsymbol{f}(x_1,x_2) = (x_1^2 + x_2^2,\ \cos(x_1 x_2)).$$

A.6 Gráficos

Para criar um esboço do gráfico de uma função de uma variável real $y = f(x)$, podemos usar a função `plot`. Esta função faz uma representação gráfica de pontos (x_i, y_i) fornecidos. O Scilab oferece uma série de opções para esta função de forma que o usuário pode ajustar várias questões de visualização. Consulte sobre a função `plot` no manual do Scilab.

Exemplo 122. Veja as seguintes linhas de código:

```
-->deff('y = f(x)','y = x .^ 3 + 1')
-->x = linspace(-2, 2, 100);
-->plot(x, f(x)); xgrid
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Resposta dos Exercícios

Recomendamos ao leitor o uso criterioso das respostas aqui apresentadas. Devido a ainda muito constante atualização do livro, as respostas podem conter imprecisões e erros.

E 2.1.1. a) 4; b) 9; c) b^2; d) 7; e) 170; f) 7,125; g) 3,28

E 2.1.5. $(101{,}1)_2$

E 2.1.6. $(11{,}1C)_{16}$

E 2.1.7. 50; 18

E 2.1.8. 10,5; $(1010{,}1)_2$

E 2.3.2. a) 1,7889; b) 1788,9; c) 0,0017889; d) 0,0045966; e) $2{,}1755 \times 10^{-10}$; f) $2{,}1755 \times 10^{10}$

E 2.3.6. a) $\delta_{\text{abs}} = 3{,}46 \times 10^{-7}$, $\delta_{\text{rel}} = 1{,}10 \times 10^{-7}$; b) $\delta_{\text{abs}} = 1{,}43 \times 10^{-4}$, $\delta_{\text{rel}} = 1{,}00 \times 10^{-3}$

E 2.6.1. 2%

E 2.6.2. 3,2% pela aproximação ou 3,4% pela segundo método ($0{,}96758 \leq I \leq 1{,}0342$).

E 2.6.4. a) 0,0294; b) $2.44e-3$; c) $2.50e-4$; d) $1.09 \cdot 10^{-7}$; e) -10^{-12}; f) -10^{-12}; g) -10^{-12}

E 2.7.1. Quando μ é pequeno, $e^{1/mu}$ é um número grande. A primeira expressão produz um "overflow" (número maior que o máximo representável) quando μ é pequeno. A segunda expressão, no entanto, reproduz o limite 1 quando $\mu \to 0+$.

E 2.7.2. a) $\frac{1}{2} + \frac{x^2}{4!} + O(x^4)$; b) $x/2 + O(x^2)$; c) $5 \cdot 10^{-4}x + O(x^2)$; d) $\frac{\sqrt{2}}{4}y + O(y^2) = \frac{\sqrt{2}}{4}x + O(x^2)$

E 2.7.5. $4{,}12451228 \times 10^{-16}$ J; 0,002%; $0{,}26654956 \times 10^{-14}$ J; 0,002%; $4{,}98497440 \times 10^{-13}$ J; 0,057%; $1{,}74927914 \times 10^{-12}$ J; 0,522%.

E 2.7.6. Em ambos casos, temos a seguinte estrutura:

$$\begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [A] \\ [B] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

De forma que

$$\begin{bmatrix} [A] \\ [B] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \begin{bmatrix} S_{22} & -S_{12} \\ -S_{21} & S_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}$$

Portanto

$$\begin{aligned} [A] &= \frac{S_{22}v_1 - S_{12}v_2}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \\ [B] &= \frac{-S_{21}v_1 + S_{11}v_2}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \end{aligned}$$

Usando derivação logarítmica, temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{[A]}\frac{\partial [A]}{\partial S_{11}} &= -\frac{S_{22}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \\ \frac{1}{[A]}\frac{\partial [A]}{\partial S_{12}} &= -\frac{v_2}{S_{22}v_1 - S_{12}v_2} + \frac{S_{21}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} = -\frac{[A]}{[B]} \cdot \frac{S_{22}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \\ \frac{1}{[A]}\frac{\partial [A]}{\partial S_{21}} &= \frac{S_{12}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \\ \frac{1}{[A]}\frac{\partial [A]}{\partial S_{22}} &= \frac{v_1}{S_{22}v_1 - S_{12}v_2} - \frac{S_{11}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} = \frac{[A]}{[B]} \cdot \frac{S_{12}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{1}{[B]}\frac{\partial [B]}{\partial S_{11}} &= \frac{v_2}{-S_{21}v_1 + S_{11}v_2} - \frac{S_{22}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} = \frac{[B]}{[A]}\frac{S_{21}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \\ \frac{1}{[B]}\frac{\partial [B]}{\partial S_{12}} &= \frac{S_{21}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \\ \frac{1}{[B]}\frac{\partial [B]}{\partial S_{21}} &= -\frac{v_1}{-S_{21}v_1 + S_{11}v_2} + \frac{S_{21}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} = -\frac{[B]}{[A]}\frac{S_{11}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \\ \frac{1}{[B]}\frac{\partial [B]}{\partial S_{22}} &= -\frac{S_{11}}{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}} \end{aligned}$$

E o erro associado às medidas pode ser aproximado por

$$\begin{aligned} \frac{1}{[A]}\delta_{[A]} &= \left|\frac{1}{[A]}\frac{\partial [A]}{\partial S_{11}}\right|\delta_{S_{11}} + \left|\frac{1}{[A]}\frac{\partial [A]}{\partial S_{12}}\right|\delta_{S_{12}} + \left|\frac{1}{[A]}\frac{\partial [A]}{\partial S_{21}}\right|\delta_{S_{21}} + \left|\frac{1}{[A]}\frac{\partial [A]}{\partial S_{22}}\right|\delta_{S_{22}} \\ &= \frac{1}{|\det S|}\left[S_{22}\delta_{S_{11}} + \frac{[A]}{[B]}S_{22}\delta_{S_{12}} + S_{12}\delta_{S_{21}} + \frac{[A]}{[B]}S_{12}\delta_{S_{22}}\right] \end{aligned}$$

Analogamente, temos:

$$\frac{1}{[B]}\delta_{[B]} = \frac{1}{|\det S|}\left[\frac{[B]}{[A]}S_{21}\delta_{S_{11}} + S_{21}\delta_{S_{11}} + \frac{[B]}{[A]}S_{11}\delta_{S_{21}} + S_{11}\delta_{S_{22}}\right]$$

onde não se indicou $|S_{ij}|$ nem $|[.]|$ pois são todos positivos.
Fazemos agora a aplicação numérica:
Caso do par 1-2:

$$\det S = \begin{vmatrix} 270 & 30 \\ 140 & 20 \end{vmatrix} = 1200$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{[A]}\delta_{[A]} &= \frac{1}{1200}\left[20 \times 270 \times 2\% + 20 \times 30 \times 2\% + 30 \times 140 \times 2\% + 30 \times 20 \times 2\%\right] \\ &= \frac{216}{1200} = 0.18 = 18\% \\ \frac{1}{[B]}\delta_{[B]} &= \frac{1}{1200}\left[140 \times 270 \times 2\% + 140 \times 30 \times 2\% + 270 \times 140 \times 2\% + 270 \times 20 \times 2\%\right] \\ &= \frac{426}{1200} = 0.355 = 35.5\% \end{aligned}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Caso do par 1-3:

$$\det S = \begin{vmatrix} 270 & 30 \\ 15 & 200 \end{vmatrix} = 53550$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{[A]}\delta_{[A]} &= \frac{1}{53550}\left[200 \times 270 \times 2\% + 200 \times 30 \times 2\% + 30 \times 15 \times 10\% + 30 \times 200 \times 10\%\right] \\ &= \frac{1804{,}6}{52550} \approx 0.0337 = 3.37\% \\ \frac{1}{[B]}\delta_{[B]} &= \frac{1}{53550}\left[15 \times 270 \times 2\% + 15 \times 30 \times 2\% + 270 \times 15 \times 10\% + 270 \times 200 \times 10\%\right] \\ &= \frac{5895}{53550} \approx 0.11 = 11\% \end{aligned}$$

Conclusão, apesar de o sensor 3 apresentar uma incerteza cinco vezes maior na sensibilidade, a escolha do sensor 3 para fazer par ao sensor 1 parece mais adequada.

E 3.2.1. 1,390054; 1,8913954; 2,4895673; 3,1641544; 3,8965468

E 3.2.2. A primeira raiz se encontra no intervalo $(0{,}4, 0{,}5)$. A segunda raiz no intervalo $(1{,}7, 1{,}8)$. A terceira raiz se encontra no intervalo $(2{,}5, 2{,}6)$.

E 3.2.4. $k\theta = \frac{lP}{2}\cos(\theta)$ com $\theta \in (0, \pi/2)$; 1,030.

E 3.2.5. $k \approx 0{,}161228$

E 3.2.6. 19; 23; 26; 0,567143; 1,745528; 3,385630

E 3.2.8. a) 0,623; b) 0,559; c) 0,500; d) 0,300; e) $-0{,}3$; f) -30; g) -30

E 3.3.1. 0,7391

E 3.3.7. $x > a$ com $a \approx 0{,}4193648$.

E 3.3.10. 0.0431266

E 3.4.1.

a) Primeiramente, deve-se observar que a função $\mathrm{tg}\,(x)$ não está definida quando x é um múltiplo ímpar de $\frac{\pi}{2}$, pelo que devemos cuidado nas singularidades. Traçamos o gráfico da função $f(x) = \mathrm{tg}\,(x) - 2x^2$ no `Scilab` usando os seguintes comandos:

```
-->deff('y=f(x)','y=tan(x)-2*x^2')
-->plot([0:.01:1.3],f)
```

Observamos facilmente uma raiz no intervalo $(0{,}5, 0{,}6)$ e outra no intervalo $(1{,}2, 1{,}3)$. Como a função $f(x)$ é contínua fora dos pontos de singularidade da tangente, é fácil verificar que existe pelo menos uma solução nos intervalos dados pelo teorema do valor intermediário:

$$\begin{aligned} f(0{,}5) &\approx 0{,}046302 > 0 \\ f(0{,}6) &\approx -0{,}035863 < 0 \\ f(1{,}2) &\approx -0{,}30784e-1 < 0 \\ f(1{,}3) &\approx 0{,}22210e-1 > 0 \end{aligned}$$

Para provar a unicidade da solução em cada intervalo, precisamos mostra que a função é monótona, ou seja, a derivada não muda de sinal em cada intervalo:

$$f'(x) = \sec^2(x) - 4x = \frac{1}{\cos^2(x)} - 4x \leq \frac{1}{\cos^2(0{,}6)} - 4 * 0{,}5 < 0, \quad x \in [0{,}5, 0{,}6]$$

$$f'(x) = \sec^2(x) - 4x = \frac{1}{\cos^2(x)} - 4x \geq \frac{1}{\cos^2(1{,}2)} - 4 * 1{,}3 > 0, \quad x \in [1{,}2, 1{,}3]$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

b) Já isolamos as raízes em intervalos de comprimento 10^{-1} e a precisão requerida exige que as isolemos em intervalos de comprimento 2×10^{-8}. Como cada passo da bisseção, confina a raiz em um intervalo com comprimento igual à metade do comprimento do intervalo anterior, temos a seguinte condição para o número de passos N_p:

$$\frac{10^{-1}}{2_p^N} \leq 2 \times 10^{-8}$$

isso é equivalente a

$$N_p \geq \log_2 \frac{10^{-1}}{2 \times 10^{-8}} = \log_2 \frac{10^7}{2} = 7 \log_2 10 - 1 = \frac{7}{\log_1 02} - 1 \approx 22.22$$

Como N_p é inteiro, o menor N_p que satisfaz a condição é 23.

As raízes obtidas são 0.55970415 e 1.2703426.

c) Para recalcular as raízes pelo método de Newton, basta executar a interação

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{f(x^{(n)})}{f'(x^{(n)})}$$

Em relação à observação, o erro se deveu à falta de cuidado em compreender o problema antes de tentar resolvê-lo, em especial, à falta de observar que a função é descontínua em múltiplos ímpares de $\frac{\pi}{2}$. Nestes pontos, a função $f(x)$ troca de sinal, mas não passa por zero.

E 3.4.2. 0,65291864

E 3.4.3.0.0198679; 0.533890; 0.735412; 1.13237; 1.38851

E 3.4.5.- 99.99970, - 0.3376513; -1.314006

E 3.4.8.$x_0 > 1$.

E 3.5.5.$z_1 \approx 0.3252768$, $z_2 \approx 1.5153738$, $z_3 \approx 2.497846$, $z_4 \approx 3.5002901$, $z_j \approx j - 1/2 - (-1)^j \frac{e^{-2j+1}}{\pi}, \quad j > 4$

E 3.5.6.150W, 133W, 87W, 55W, 6.5W

E 3.5.7.a) 42s e 8min2s, b) 14min56s.

E 3.5.8.118940992

E 3.5.9.7.7cm

E 3.5.10.4.32cm

E 3.5.11.(0.652919,0.426303)

E 3.5.12.7.19% ao mês

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 3.5.13. 4.54% ao mês.

E 3.5.14. 500K, 700K em $t = 3\ln(2)$, 26min, 4h27min.

E 3.5.15. $(\pm 1.1101388, -.7675919)$, $(\pm 1.5602111, 0.4342585)$

E 3.5.16. 1.5318075

E 3.5.17. Aproximadamente 2500 reais por hora.

E 3.5.18. a) 332.74K b), 359.33K

E 3.5.19. 1.72285751 ,4.76770758, 7.88704085

E 4.1.1. Escrevemos o sistema na forma matricial e resolvemos:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 10 & -48 \\ 0 & 10 & 1 & 25 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 9 & -48 \\ 0 & 10 & 1 & 25 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 10 & 1 & 25 \\ 0 & -1 & 9 & -48 \end{array}\right] \sim$$

$$\sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 10 & 1 & 25 \\ 0 & 0 & 9.1 & -45.5 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 10 & 1 & 25 \\ 0 & 0 & 1 & -5 \end{array}\right] \sim$$

$$\sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 5 \\ 0 & 10 & 0 & 30 \\ 0 & 0 & 1 & -5 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & -5 \end{array}\right] \sim$$

$$\sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & -5 \end{array}\right]$$

Portanto $x = 2$, $y = 3$, $z = -5$

E 4.1.5.

a) $x = [4 \;\; 3 \;\; 2]^T$

b) O sistema é equivalente a

$$\begin{array}{lcllcll} \varepsilon x_1 & + & \varepsilon x_2 & + & (1+\varepsilon)x_3 & = & 2 \\ \varepsilon x_1 & + & (1+\varepsilon)x_2 & + & \varepsilon x_3 & = & 3 \\ (1+\varepsilon)x_1 & + & \varepsilon x_2 & + & \varepsilon x_3 & = & 4 \end{array}$$

Somando as três equações temos

$$(1+3\varepsilon)(x_1+x_2+x_3) = 9 \Longrightarrow x_1+x_2+x_3 = \frac{9}{1+3\varepsilon}$$

Subtraímos $\varepsilon(x_1+x_2+x_3)$ da cada equação do sistema original e temos:

$$x_3 = 2 - \tfrac{9\varepsilon}{1+3\varepsilon}$$

$$x_2 = 3 - \tfrac{9\varepsilon}{1+3\varepsilon}$$

$$x_1 = 4 - \tfrac{9\varepsilon}{1+3\varepsilon}$$

Assim temos:

$$x_\varepsilon = [4 \;\; 3 \;\; 2]^T - \frac{9\varepsilon}{1+3\varepsilon}[1 \;\; 1 \;\; 1]^T$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 4.1.6. $x = [1.6890368 \quad 1.6890368 \quad 1.5823257 \quad 1.2667776 \quad 0.6333888]^T$

E 4.1.7.

$$\begin{bmatrix} 1 & 1/2 & -1/2 \\ 1/3 & -1/2 & 1/6 \\ -1/3 & 0 & 1/3 \end{bmatrix}$$

E 4.2.1. $\lambda = \frac{71\times30}{41} \approx 51.95122$, para $\lambda = 51$: $k_1 = k_\infty = 350.4$, $k_2 = 262.1$. Para $\lambda = 52$: $k_1 = k_\infty = 6888$, $k_2 = 5163$.

E 4.2.2. $k_1(A) = 36$, $k_2(A) = 18{,}26$, $K_\infty(A) = 20{,}8$.

E 4.2.3. $k_1 = k_\infty = 6888, k_2 = \sqrt{26656567}$ e $k_1 = 180, k_2 = 128{,}40972$ e $k_\infty = 210$

E 4.2.4. $\frac{18}{\varepsilon}+3$. Quando $\varepsilon \to 0+$, a matriz converge para uma matriz singular e o número de condicionamento diverge para $+\infty$.

E 4.2.5. As soluções são $[-0.0000990 \quad 0.0000098]^T$ e $[0.0098029 \quad 0.0990294]^T$. A grande variação na solução em função de pequena variação nos dados é devido ao mau condicionamento da matriz ($k_1 \approx 1186274.3$).

Exemplo de implementação:

```
A=[1e5 -1e4+1e-2; -1e4+1e-2 1000.1]
b1=[-10 1]'
b2=[-9.999 1.01]'
A\b1
A\b2
```

E 4.2.6. 0,695; 0,292; 0,188; 0,0237; 0,0123; 0,00967

Exemplo de implementação:

```
J=[1:1:10]
x=sin(J/10)
y=J/10
z=y-y.^3/6
e=abs(x-y)./x
f=abs(x-z)./x
norm(e,1)
norm(e,2)
norm(e,'inf')
norm(f,1)
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
norm(f,2)
norm(f,'inf')
```

E 4.4.1.

```
epsilon=1e-3;

A=[1 -1 0 0 0; -1 2 -1 0 0; 0 -1 (2+epsilon) -1 0; 0 0 -1 2 -1; 0 0 0 1 -1]

v=[1 1 1 1 1]'
xgauss=gauss([A v])

function x=q_Jacobi()
    x0=[0 0 0 0 0]'

    i=0
    controle=0
    while controle<3 & i<1000
    i=i+1

    x(1)=1+x0(2)
    x(2)=(1+x0(3)+x0(1))/2
    x(3)=(1+x0(2)+x0(4))/(2+epsilon)
    x(4)=(1+x0(3)+x0(5))/2
    x(5)=x0(4)-1

    delta=norm(x-x0,2)
    if delta<1e-6 then
        controle=controle+1
    else
        controle=0
    end
    mprintf('i=%d, x1=%f, x5=%f, tol=%.12f\n',i,x(1),x(5),delta)
    x0=x;
    end

endfunction

function x=q_Gauss_Seidel()
    x0=[0 0 0 0 0]'
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
    i=0
    controle=0
    while controle<3 & i<15000
    i=i+1

    x(1)=1+x0(2)
    x(2)=(1+x0(3)+x(1))/2
    x(3)=(1+x(2)+x0(4))/(2+epsilon)
    x(4)=(1+x(3)+x0(5))/2
    x(5)=x(4)-1

    delta=norm(x-x0,2)
    if delta<1e-2 then
        controle=controle+1
    else
        controle=0
    end
    mprintf('i=%d, x1=%f, x5=%f, tol=%.12f\n',i,x(1),x(5),delta)
    x0=x;
    end

endfunction
```

E 4.4.4. 0.324295, 0.324295, 0.317115, 0.305943, 0.291539, 0.274169, 0.253971, 0.230846, 0.203551, 0.165301, 0.082650

Exemplos de rotinas:

```
function x=jacobi()
    x0=zeros(11,1)
    k=0;
    controle=0;
    while controle<3 & k<1000
        k=k+1
        x(1)=x0(2)
        for j=2:10
        x(j)=(cos(j/10)+x0(j-1)+x0(j+1))/5
        end
        x(11)=x0(10)/2


        delta=norm(x-x0) //norma 2
```

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

```
        if delta<1e-5 then
            controle=controle+1
        else
            controle=0;
        end
        mprintf('k=%d, x=[%f,%f,%f], tol=%.12f\n',k,x(1),x(2),x(3),delta)
        x0=x;
    end


endfunction

function x=gs()
    x0=zeros(11,1)
    k=0;
    controle=0;
    while controle<3 & k<1000
        k=k+1
        x(1)=x0(2)
        for j=2:10
        x(j)=(cos(j/10)+x(j-1)+x0(j+1))/5
        end
        x(11)=x0(10)/2

        delta=norm(x-x0) //norma 2
        if delta<1e-5 then
            controle=controle+1
        else
            controle=0;
        end
        mprintf('k=%d, x=[%f,%f,%f], tol=%.12f\n',k,x(1),x(2),x(3),delta)
        x0=x;
    end
endfunction
```

E 4.4.6. Permute as linhas 1 e 2.

E 4.5.1. $\lambda = 86.1785$ associado ao autovetor dado por $v_1 = [0.65968 \quad 0.66834 \quad 0.34372]^T$.

E 4.5.3. 158,726

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 4.5.5. a)$V_5 = 98.44V$ b) $V_5 = 103.4V$

O problema com cinco incógnitas pode ser escrito na forma matricial conforme a seguir:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{R_1} & -\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}+\frac{1}{R_5}\right) & \frac{1}{R_2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{R_2} & -\left(\frac{1}{R_2}+\frac{1}{R_3}+\frac{1}{R_6}\right) & \frac{1}{R_3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{R_3} & -\left(\frac{1}{R_3}+\frac{1}{R_4}+\frac{1}{R_7}\right) & \frac{1}{R_4} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{R_4} & -\left(\frac{1}{R_4}+\frac{1}{R_8}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ v_4 \\ V_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Este problema pode ser implementado no `Scilab` (para o item a) com o seguinte código:

```
R1=2, R2=2, R3=2, R4=2, R5=100, R6=100, R7=100, R8=50, V=127

A=[1      0                  0                   0                  0;
   1/R1  -(1/R1+1/R2+1/R5)   1/R2                0                  0;
   0      1/R2               -(1/R2+1/R3+1/R6)   1/R3               0;
   0      0                  1/R3               -(1/R3+1/R4+1/R7)   1/R4;
   0      0                  0                   1/R4              -(1/R4+1/R8)]
v=[V; 0; 0; 0; 0]
y=A\v
```

O problema com quatro incógnitas pode ser escrito na forma matricial conforme a seguir:

$$\begin{bmatrix} -\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}+\frac{1}{R_5}\right) & \frac{1}{R_2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{R_2} & -\left(\frac{1}{R_2}+\frac{1}{R_3}+\frac{1}{R_6}\right) & \frac{1}{R_3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{R_3} & -\left(\frac{1}{R_3}+\frac{1}{R_4}+\frac{1}{R_7}\right) & \frac{1}{R_4} \\ 0 & 0 & \frac{1}{R_4} & -\left(\frac{1}{R_4}+\frac{1}{R_8}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_2 \\ V_3 \\ v_4 \\ V_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{V}{R1} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Cuja implementação pode ser feita conforme

```
A=[  -(1/R1+1/R2+1/R5)     1/R2                  0                    0;
       1/R2                -(1/R2+1/R3+1/R6)     1/R3                 0;
       0                    1/R3                -(1/R3+1/R4+1/R7)     1/R4;
       0                    0                     1/R4                -(1/R4+1/R8)]

v=[-V/R1; 0; 0; 0]
y=A\v
```

E 4.5.6. Dica: $P(-1) = -3$, $P(1) = -1$ e $P(2) = 9$ produzem três equações lineares para os coeficientes a, b e c. Resp: a) $P(x) = 3x^2 + x - 5$, b) $A \approx 2.49$ e $B \approx -1.29$ c)$A_1 \approx 1.2872058$, $A_2 \approx -4.3033034$, $B_1 \approx 2.051533$ e $B_2 \approx -0.9046921$.

E 6.2.1. $5x^3 + 2x - 3$

E 6.4.1. $\int_0^1 P(x)dx = \frac{f(0)+f(1)}{2}$, $\frac{1}{12}\max_{x\in[0,1]}|f''(x)|$

E 6.6.1. $y = -0{,}0407898x^2 + 2{,}6613293x + 1{,}9364598$

x_i	y_i	$ax_i^2 + bx_i + c$	$ax_i^2 + bx_i + c - y_i$
0,01	1,99	1,963069	-0,0269310
1,02	4,55	4,6085779	0,0585779
2,04	7,2	7,1958206	-0,0041794
2,95	9,51	9,4324077	-0,0775923
3,55	10,82	10,870125	0,0501249

E 6.6.2. $a = 25{,}638625$, $b = 9{,}8591874$, $c = 4{,}9751219$ e $a = 31{,}475524$, $b = 65{,}691531$, $c = -272{,}84382$, $d = 208{,}23621$.

E 7.1.3.

a) $f'(0) = \frac{-3f(0)+4f(h)-f(2h)}{2h} + O(h^2)$

b) $f'(0) = \frac{3f(0)-4f(-h)+f(-2h)}{2h} + O(h^2)$

c) $f'(0) = \frac{1}{h_1+h_2} l\left[-\frac{h_2}{h_1}f(-h_1) + \left(\frac{h_2}{h_1} - \frac{h_1}{h_2}\right)f(0) + \frac{h_1}{h_2}f(h_2)\right]$

d) $f''(0) = \frac{f(0)-2f(h)+f(2h)}{h^2} + O(h)$

e) $f''(0) = \frac{f(0)-2f(-h)+f(-2h)}{h^2} + O(h)$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 7.1.4.

$Caso$	a	b	c	d
$v_i = 1$	1.72	1.56	1.64	1.86
$v_i = 4.5$	2.46	1.90	2.18	1.14

E 7.2.1.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 10 \end{bmatrix}$$

Solução: [5, 9.25, 11.5, 11.75, 10]

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \\ u_7 \\ u_8 \\ u_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 10 \end{bmatrix}$$

Solução: $[5, 7.375, 9.25, 10.625, 11.5, 11.875, 11.75, 1.125, 10]$

E 7.2.2. 120. 133.56 146.22 157.83 168.22 177.21 184.65 190.38 194.28 196.26 196.26 194.26 190.28 184.38 176.65 167.21 156.22 143.83 130.22 115.56 100.

E 7.2.3. 391.13 391.13 390.24 388.29 385.12 380.56 374.44 366.61 356.95 345.38 331.82 316.27 298.73 279.27 257.99 234.99 210.45 184.5 157.34 129.11 100.

E 7.2.4. 0., 6.57, 12.14, 16.73, 20.4, 23.24, 25.38, 26.93 , 28, 28.7, 29.06, 29.15, 28.95, 28.46, 27.62 , 26.36, 24.59, 22.18, 19.02, 14.98, 10.

E 7.2.5. u(0)=31.62, u(1)=31.50, u(1.9)=18.17

E 7.2.6. u(1)=1.900362, u(2.5)=1.943681, u(4)=1.456517

E 7.3.1.

	exato	Ponto médio	Trapézio	Simpson
$\int_0^1 e^{-x}dx$	$1-e^{-1} \approx 0.6321206$	$e^{-1/2} \approx 0.6065307$	$\frac{1+e^{-1}}{2} \approx 0.6839397$	$\frac{1+4e^{-1/2}+e^{-1}}{6} \approx 0.6323337$
$\int_0^1 x^2dx$	$1/3 \approx 0.3333333$	0.25	0.5	0.3333333
$\int_0^1 x^3dx$	$1/4 = 0.25$	0.125	0.5	0.25
$\int_0^1 xe^{-x^2}dx$	$\frac{1}{2}\left(1-e^{-1}\right) \approx 0.3160603$	0.3894004	0.1839397	0.3209135
$\int_0^1 \frac{1}{x^2+1}dx$	$\tan^{-1}(1) \approx 0.7853982$	0.8	0.75	0.7833333
$\int_0^1 \frac{x}{x^2+1}dx$	$\frac{1}{2}\ln(2) \approx 0.3465736$	0.4	0.25	0.35
$\int_0^1 \frac{1}{x+1}dx$	$\ln(2) \approx 0.6931472$	0.6666667	0.75	0.6944444

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 7.3.2. Resp: 8, 10 e 8.666667.

E 7.3.3.

$$I_{Simpson} = \frac{1}{3} I_{Trap} + \frac{2}{3} I_{PM}$$

E 7.3.4.

n	Ponto médio	Trapézios	Simpson
3	0.1056606	0.7503919	0.5005225
5	0.1726140	0.3964724	0.2784992
7	0.1973663	0.3062023	0.2393551
9	0.2084204	0.2721145	0.2306618

E 7.3.5.

$a) I(h) = 4.41041 \cdot 10^{-1} - 8.49372 \cdot 10^{-12} h - 1.22104 \cdot 10^{-2} h^2 - 1.22376 \cdot 10^{-7} h^3 + 8.14294 \cdot 10^{-3} h^4$

$b) I(h) = 7.85398 \cdot 10^{-1} - 1.46294 \cdot 10^{-11} h - 4.16667 \cdot 10^{-2} h^2 - 2.16110 \cdot 10^{-7} h^3 + 4.65117 \cdot 10^{-6} h^4$

$c) I(h) = 1.58730 \cdot 10^{-3} - 9.68958 \cdot 10^{-10} h + 2.03315 \cdot 10^{-7} h^2 - 1.38695 \cdot 10^{-5} h^3 + 2.97262 \cdot 10^{-4} h^4$

$d) I(h) = 4.61917 \cdot 10^{-1} + 3.83229 \cdot 10^{-12} h + 2.52721 \cdot 10^{-2} h^2 + 5.48935 \cdot 10^{-8} h^3 + 5.25326 \cdot 10^{-4} h^4$

E 7.3.6.

1.5707963	2.0943951		
1.8961189	2.0045598	1.9985707	
1.9742316	2.0002692	1.9999831	2.0000055

E 7.3.7. 0.7468337,2.4606311, 1.6595275.

E 7.3.9. $R(6,6) = -10.772065$, $R(7,7) = 5.2677002$, $R(8,8) = 6.1884951$, $R(9,9) = 6.0554327$, $R(10,10) = 6.0574643$. O valor desta integral com oito dígitos corretos é aproximado por 6.0574613.

E 7.3.10. $w_1 = 1/6$, $w_2 = 2/3$, $w_3 = 1/6$. O esquema construído é o de Simpson e a ordem de exatidão é 3.

E 7.3.11. 3

E 7.3.12. 5

E 7.3.13. $\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{3}{2} f(1/3) - 2f(1/2) + \frac{3}{2} f(2/3)$ com ordem 3.

E 7.3.15. 5, 4, 3

E 7.3.16. $\int_{-1}^1 f(x)dx = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 7.3.17. $w_1 = w_3 = 1$ e $w_2 = 0$ com ordem 3.

E 7.3.21. -0.2310491, -0.2452073, - 0.2478649.

E 7.3.23. a)-0.2472261, -0.2416451, -0.2404596, -0.2400968, -0.2399563, -0.2398928. b)-0.2393727, -0.2397994, -0.2398104, -0.2398115, -0.2398117, -0.2398117.

E 7.3.24.

n	b	c	d	e	f
2	2.205508	3.5733599	3.6191866	3.6185185	3.618146
4	2.5973554	3.6107456	3.6181465	3.6180970	3.6180970
6	2.7732372	3.6153069	3.6181044	3.6180970	3.6180970
8	2.880694	3.6166953	3.6180989	3.6180970	3.6180970

Solução do item e: Como

$$\cos(x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!}$$

temos

$$\frac{1-\cos(x)}{\sqrt{x}} = -\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n-1/2}}{(2n)!}, \quad x \geq 0$$

Logo, podemos integrar

$$\begin{aligned} I &= 4 + 2\int_0^1 \frac{\cos(x)-1}{\sqrt{|x|}}dx = 4 - 2\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n \int_0^1 \frac{x^{2n-1/2}}{(2n)!}dx \\ &= 4 - 2\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n \frac{1}{(2n)!(2n+1/2)} \end{aligned}$$

Solução do item f)

$$2\int_0^1 \left(x^{-1/2} - \frac{x^{3/2}}{2} + \frac{x^{7/2}}{24}\right)dx = 2\left(2 - \frac{1}{5} + \frac{1}{54}\right) = \frac{977}{270}$$

$$2\int_0^1 \frac{\cos(x) - P_4(x)}{\sqrt{x}}dx = \sqrt{2}\int_{-1}^1 \frac{\cos\left(\frac{1+u}{2}\right) - P_4\left(\frac{1+u}{2}\right)}{\sqrt{1+u}}du$$

E 7.3.28. 4.1138

E 7.3.29. a)19.2, 22.1, 23.3 b)513.67K

E 8.1.1. 0.4496 com $h = .1$ e 0.4660 com $h = .01$. A solução exata vale $y(1) = \frac{1+2e^{-1}+e^{-2}}{4} = \left(\frac{1+e^{-1}}{2}\right)^2 \approx 0.4678$

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

E 8.1.2. $y(2) \approx 0.430202$ e $z(2) = 0.617294$ com $h = 0.2$, $y(2) \approx 0.435506$ e $z(2) = 0.645776$ com $h = 0.02$, $y(2) \approx 0.435805$ e $z(2) = 0.648638$ com $h = 0.002$ e $y(2) \approx 0.435832$ e $z(2) = 0.648925$ com $h = 0.0002$.

E 8.1.3. $y(2) \approx 1.161793$ com $h = 0.1$, $y(2) \approx 1.139573$ com $h = 0.01$, $y(2) \approx 1.137448$ com $h = 0.001$, $y(2) \approx 1.137237$ com $h = 0.0001$, $y(2) \approx 1.137216$ com $h = 0.00001$

E 8.2.1. $y(1) \approx 1.317078$ quando $h = 0{,}1$ e $y(1) \approx 1.317045$.

E 8.2.2.

t	Exato	Euler	Euler Melhorado	Erro Euler	Erro Euler Melhorado
0.0	1.	1.	1.	0.	0.
0.1	0.826213	0.8	0.828	0.026213	0.001787
0.2	0.693094	0.656	0.695597	0.037094	0.002502
0.3	0.588333	0.547366	0.591057	0.040967	0.002724
0.4	0.504121	0.462669	0.506835	0.041453	0.002714
0.5	0.435267	0.394996	0.437861	0.040271	0.002594
0.6	0.378181	0.339894	0.380609	0.038287	0.002428
0.7	0.330305	0.294352	0.332551	0.035953	0.002246
0.8	0.289764	0.256252	0.291828	0.033512	0.002064
0.9	0.255154	0.224061	0.257043	0.031093	0.001889
1.0	0.225400	0.196634	0.227126	0.028766	0.001726

No Scilab, esta tabela pode ser produzida com o código:

```
deff('dy=f(y,t)','dy=-y-y^2')
sol_Euler=Euler(f,0,1,10,1)'
sol_Euler_mod=Euler_mod(f,0,1,10,1)'
deff('y=y_exata(t)','y=1/(2*exp(t)-1)')
t=[0:.1:1]'
sol_exata=feval(t,y_exata)
tabela=[t sol_exata sol_Euler sol_Euler_mod abs(sol_exata-sol_Euler) abs(sol_exata-sol_Euler_mod)]
```

E 8.7.2. Os valores exatos para os itens e e f são: $\frac{1}{10}\ln\left(\frac{9}{4}\right)$ e $\frac{1}{10}\ln(6)$

E 8.7.3. O valor exato é $\sqrt{\frac{g}{\alpha}\left[1-e^{-200\alpha}\right]}$ em $t = \frac{1}{\sqrt{g\alpha}}\tanh^{-1}\left(\sqrt{1-e^{-200\alpha}}\right)$

E 8.7.9.

	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5
Analítico	0.3032653	0.3678794	0.3346952	0.2706706	0.2052125
Euler	0.3315955	0.3969266	0.3563684	0.2844209	0.2128243
Euler modificado	0.3025634	0.3671929	0.3342207	0.2704083	0.2051058
Runge-Kutta Clássico	0.3032649	0.3678790	0.3346949	0.2706703	0.2052124
Adams-Bashforth ordem 4	0.3032421	0.3678319	0.3346486	0.2706329	0.2051848

	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5
Euler	2.8D-02	2.9D-02	2.2D-02	1.4D-02	7.6D-03
Euler modificado	7.0D-04	6.9D-04	4.7D-04	2.6D-04	1.1D-04
Runge-Kutta Clássico	4.6D-07	4.7D-07	3.5D-07	2.2D-07	1.2D-07
Adams-Bashforth ordem 4	2.3D-05	4.8D-05	4.7D-05	3.8D-05	2.8D-05

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

	0.1	0.05	0.01	0.005	0.001
Euler	2.9D-02	5.6D-03	2.8D-03	5.5D-04	2.8D-04
Euler modificado	6.9D-04	2.5D-05	6.2D-06	2.5D-07	6.1D-08
Runge-Kutta Clássico	4.7D-07	6.9D-10	4.3D-11	6.8D-14	4.4D-15
Adams-Bashforth ordem 4	4.8D-05	9.0D-08	5.7D-09	9.2D-12	5.8D-13

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Referências Bibliográficas

[1] Cecill and free sofware. `http://www.cecill.info`. Acessado em 30 de julho de 2015.

[2] M. Baudin. Introduction to scilab. `http://forge.scilab.org/index.php/p/docintrotoscilab/`. Acessado em 30 de julho de 2015.

[3] R.L. Burden and J.D. Faires. *Análise Numérica*. Cengage Learning, 8 edition, 2013.

[4] J. P. Demailly. *Analyse Numérique et Équations Differentielles*. EDP Sciences, Grenoble, nouvelle Édition edition, 2006.

[5] Walter Gautschi and Gabriele Inglese. Lower bounds for the condition number of vandermonde matrices. *Numerische Mathematik*, 52(3):241–250, 1987/1988.

[6] L.F. Guidi. Notas da disciplina cálculo numérico. `http://www.mat.ufrgs.br/~guidi/grad/MAT01169/calculo_numerico.pdf`. Acessado em julho de 2016.

[7] R. Rannacher. Einführung in die numerische mathematik (numerik 0). `http://numerik.uni-hd.de/~lehre/notes/num0/numerik0.pdf`. Acessado em 10.08.2014.

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: `livro_colaborativo@googlegroups.com`

Índice Remissivo

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com

Licença CC-BY-SA-3.0. Contato: livro_colaborativo@googlegroups.com