

Capítulo 1

Revisão de Polinômios

Definição 1 *Um polinômio p é uma função com domínio e imagem em um conjunto \mathbb{C} ou \mathbb{R} dado na forma:*

$$\begin{aligned} p: \mathbb{C} &\rightarrow \mathbb{C} \\ x &\mapsto p(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_{n-1}x + a_0 \end{aligned}$$

O número inteiro n é dito grau do polinômio.

Teorema 1 *Se $p(x)$ é um polinômio de grau n , então para qualquer α existe um polinômio $q(x)$ único tal que: $p(x) = (x - \alpha)q(x) + p(\alpha)$*

O Teorema 1 nos diz que, se dividirmos $p(x)$ por $(x - \alpha)$ então encontramos como quociente um polinômio de grau $n - 1$, se $n > 1$, e o resto é o valor do polinômio calculado em α .

Exemplo

Considere o polinômio $p(x) = 3x^5 + 4x^4 - 2x^3 - x^2 + 3x - 4$ de grau 5. Para calcularmos o valor do polinômio para $x = 2$, $p(2)$, podemos fazer as seguintes contas:

$$p(2) = 3 \times 2^5 + 4 \times 2^4 - 2 \times 2^3 - 2^2 + 3 \times 2 - 4$$

o que implica em executarmos n adições e $\sum_{j=1}^n j = \frac{(n+1)n}{2}$ multiplicações. Portanto, o procedimento executa $\Theta(n)$ adições e $\Theta(n^2)$ multiplicações, o que nos leva a concluir que a complexidade computacional do procedimento acima é da ordem $\Theta(n^2)$ operações computacionais elementares. Será que este é o procedimento mais eficiente?

Entretanto, observamos que:

$$\begin{aligned}
 p(x) &= 3x^5 + 4x^4 - 2x^3 - x^2 + 3x - 4 \\
 &= (3x^4 + 4x^3 - 2x^2 - x + 3)x - 4 \\
 &= ((3x^3 + 4x^2 - 2x - 1)x + 3)x - 4 \\
 &= (((3x^2 + 4x - 2)x - 1)x + 3)x - 4 \\
 &= (((((3x + 4)x - 2)x - 1)x + 3)x - 4
 \end{aligned}$$

o que resulta no cálculo de $p(2)$ com apenas n adições e n multiplicações. Este segundo procedimento é muito mais eficiente que o anterior, tem uma complexidade computacional de $\Theta(n)$ operações.

O esquema de cálculo de $p(x)$ acima pode ser utilizado para dividirmos $p(x)$ por $(x - \alpha)$ e daí calculamos $q(x) = b_0x^4 + b_1x^3 + b_2x^2 + b_3x + b_4$ e $p(\alpha)$.

Esquema de Horner/Briot-Ruffini

O esquema para calcular o quociente é ilustrado na tabela abaixo, onde estamos buscando o quociente $q(x)$ da divisão do polinômio $p(x) = 3x^5 + 4x^4 - 2x^3 - x^2 + 3x - 4$ por $(x - \alpha)$, com $\alpha = 2$.

	3	4	-2	-1	3	-4
$\alpha = 2$		6	20	36	70	146
	3	10	18	35	73	142
	b_0	b_1	b_2	b_3	b_4	$R = p(2)$

A partir da tabela acima, obtemos o quociente através dos coeficientes da linha mais abaixo, ou seja, $q(x) = 3x^4 + 10x^3 + 18x^2 + 35x + 73$ e também o resto $p(2) = 142$. Portanto, $p(x) = (x - 2)q(x) + 142$.

Na forma mais geral, o método Briot-Ruffini pode ser expresso através das operações indicada na tabela a seguir:

	a_0	a_1	a_2	a_3	\dots	a_{n-1}	a_n
α		$b_0\alpha$	$b_1\alpha$	$b_2\alpha$	\dots	$b_{n-2}\alpha$	$b_{n-1}\alpha$
	a_0	$a_1 + b_0\alpha$	$a_2 + b_1\alpha$	$a_3 + b_2\alpha$	\vdots	$a_{n-1} + b_{n-2}\alpha$	$a_n + b_{n-1}\alpha$
	b_0	b_1	b_2	b_3		b_{n-1}	$R = p(\alpha)$

Corolário 1 Se $p(x)$ é um polinômio de grau $n > 1$ e $p(\alpha) = 0$ então existe

um polinômio único de grau $n - 1$, tal que $p(x) = (x - \alpha)q(x)$. Neste caso, $q(x)$ é chamado de polinômio reduzido.

1.1 Enumeração de Raízes

1.1.1 Enumeração das Raízes de Uma Equação Polinomial

Enumerar as raízes de um polinômio $p(x)$ consiste em dizermos quantas raízes o polinômio possui e de que tipo elas são. No que segue são apresentados alguns teoremas e outros resultados teóricos que podem nos auxiliar na tarefa de enumeração.

Teorema 2 *O número de raízes positivas de uma equação polinomial $p(x)$ com coeficientes reais, nunca é maior que o número de trocas de sinal T na sequência de seus coeficientes não nulos, e se é menor, então é sempre por um número par.*

Exemplo

Como exemplo, tome o polinômio $p(x) = x^3 + 2x^2 - 3x - 5$, o qual apresenta a sequência de sinais $(+, +, -, -)$. Logo, segundo o Teorema 2, $T' = 1$ e pode-se afirmar com exatidão que $p(x)$ tem uma raiz positiva já que ele não pode ter um número negativo de raízes.

Observação: A mesma regra acima, dada pelo Teorema 2, pode ser aplicada para a enumeração das raízes reais e negativas de $p(x)$, calculando-se $p(-x)$, pois as raízes positivas:

$$p(-x) = -x^3 + 2x^2 + 3x - 5$$

se referem às raízes negativas de $p(-x)$. Notando que a sequência de sinais de $p(-x)$ é $(-, +, +, -)$, concluímos que $T' = 2$ e daí deduzimos que $p(x)$ pode ter duas ou zero raízes negativas. Tomando como base as deduções de que $p(x)$ tem uma raiz positiva e duas ou nenhuma raiz negativa, podemos deduzir que:

- Se $p(x)$ tiver duas raízes negativas, então não terá nenhuma raiz complexa. Se, contudo, não tiver raízes negativas, então terá duas complexas.
- É bom lembrar que, se um polinômio tem todos os coeficientes reais e se houver uma raiz complexa, então sua conjugada, também será raiz do polinômio.

Exemplo

Seja $p(x) = x^4 - x^3 + x^2 - x + 1$ um polinômio de quarto grau. Temos que $T = 4$ e, portanto, $p(x)$ tem quatro, duas ou não tem raízes positivas. Procedendo à análise de $p(-x) = x^4 + x^3 + x^2 + x + 1$, observamos que $T' = 0$ e daí verificamos que $p(x)$ não tem raízes negativas. Logo $p(x)$ pode ter quatro raízes positivas, ou duas raízes positivas e duas complexas, ou nenhuma positiva e quatro complexas. Há apenas três possibilidades quanto aos tipos das raízes.

1.1.2 Enumeração das Raízes Complexas

Nesta seção damos continuidade a formas e métodos de se enumerar raízes, onde serão enunciados resultados teóricos e procedimentos de enumeração.

Teorema 3 (*Regra de du Gua*) *Dada a equação polinomial $p(x) = 0$ de grau n sem raízes nulas e se para algum k , $1 \leq k \leq n$ tivermos $a_k^2 \leq a_{k+1}a_{k-1}$ então $p(x)$ terá raízes complexas.*

O Teorema 3 nos dá condições suficientes para existência de raízes complexas. Note que se as condições do teorema não puderem ser aplicadas, o polinômio pode ter raízes complexas. A regra da Lacuna abaixo enunciada permite a conclusão sobre a existência de raízes complexas

Teorema 4 (*Regra da Lacuna*)

- Se os coeficientes de $p(x)$ forem todos reais e para algum k , $1 \leq k \leq n$ tivermos $a_k = 0$ e $a_{k+1}a_{k-1} > 0$, então $p(x) = 0$ terá raízes complexas.
- Se os coeficientes forem todos reais e existirem dois ou mais coeficientes nulos sucessivos, então $p(x) = 0$ terá raízes complexas.

Exemplo

Vamos agora exemplificar a aplicação dos teoremas enunciados. Inicialmente, tomemos o polinômio $p(x) = 2x^5 + 3x^4 + x^3 + 2x^2 - 5x + 3$, para o qual verificamos que $T = 2$, e daí descobrimos que $p(x) = 0$ tem duas raízes ou zero raízes positivas. A partir de $p(-x) = -2x^5 + 3x^4 - x^3 + 2x^2 + 5x + 3$, calculamos que $T' = 3$, e daí deduzimos que $p(x) = 0$ tem três raízes ou uma raiz real negativa. Na tabela abaixo listamos todas as possíveis combinações de tipos de raízes.

Reais Positivas	Reais Negativas	Complexas	Total
2	3	0	5
2	1	2	5
0	3	2	5
0	1	4	5

Pela regra de "du Gua" (ver Teorema 3), temos que $a_2^2 \leq a_3 a_1 \Rightarrow 1 \leq 3 \times 2 = 6$. Daí chegamos à conclusão que $p(x) = 0$ tem raízes complexas e, por conseguinte, podemos eliminar a primeira alternativa do quadro anterior, restando apenas três possibilidades para as raízes.

Exemplo

Repetindo os passos anteriores, tomemos agora o polinômio de sexto grau $p(x) = 2x^6 - 3x^5 - 2x^3 + x^2 - x + 1$. A partir do fato que $T = 4$, concluímos que $p(x) = 0$ tem quatro, ou duas raízes, ou zero raízes positivas. Através do polinômio $p(-x) = 2x^6 + 3x^5 + 2x^3 + x^2 + x + 1$, temos que $T' = 0$, portanto, $p(x)$ não tem raízes reais negativas. Pela Regra da Lacuna temos que $p(x) = 0$ tem raízes complexas pois: $a_2 = 0$ e $a_1 a_3 > 0$. Os possíveis arranjos de tipos e números de raízes é dado no quadro abaixo:

Reais Positivas	Reais Negativas	Complexas	Total
4	0	2	6
2	0	4	6
0	0	6	6

Definição 2 Seja $f(x) = 0$ uma equação onde $f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ é uma função qualquer. Se $f(\bar{x}) = 0$, então dizemos que \bar{x} é uma raiz de f .

Definição 3 Se \bar{x} é um zero de $f(x)$ então a multiplicidade m de \bar{x} é o ínfimo de todos os números k , tais que:

$$\lim_{x \rightarrow \bar{x}} \frac{|f(x)|}{|x - \bar{x}|^k} < \infty$$

Exemplo

Consideremos a função $f(x) = x^{\frac{1}{2}}$, uma raiz de $x^{\frac{1}{2}} = 0$ é $\bar{x} = 0$. Esta raiz tem multiplicidade $\frac{1}{2}$, pois

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{|x^{\frac{1}{2}}|}{|x|^{\frac{1}{2}}} < \infty \text{ mas } \lim_{x \rightarrow 0} \frac{|x^{\frac{1}{2}}|}{|x|^a} = \infty \text{ para } a < \frac{1}{2}.$$

Teorema 5 *Se \bar{x} é um zero de f e se para algum inteiro m , $f(x)$ é m vezes continuamente diferenciável, então a multiplicidade de \bar{x} é pelo menos m vezes se, e somente se,*

$$f(\bar{x}) = f'(\bar{x}) = f''(\bar{x}) = \dots = f^{m-1}(\bar{x}) = 0$$

A multiplicidade é exatamente m se $f^m(\bar{x}) \neq 0$

Teorema 6 *Seja $p(x)$ um polinômio de grau $n > 1$. A multiplicidade de um zero α de $p(x)$ é m se, e somente se,*

$$\begin{cases} p(\alpha) = p'(\alpha) = p''(\alpha) = \dots = p^{m-1}(\alpha) = 0 \\ p^m(\alpha) \neq 0. \end{cases}$$

Teorema 7 *Seja $p(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_{n-1}x + a_n$, um polinômio de grau n . Então existem números distintos $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_s$ (que podem ser complexos) e inteiros m_1, m_2, \dots, m_s tal que para uma constante c única temos:*

$$p(x) = c(x - \alpha_1)^{m_1} \cdot (x - \alpha_2)^{m_2} \dots (x - \alpha_s)^{m_s}$$

$$\sum_{j=1}^s m_j = n.$$

O teorema acima é decorrência do teorema fundamental da Álgebra, que diz que todo polinômio com coeficientes complexos admite pelo menos uma raiz complexa. Nem todo o polinômio real admite uma raiz real, por exemplo $x^2 + 1$ só admite raízes complexas.

Teorema 8 *Se os coeficientes de $p(x)$ são reais e μ é a multiplicidade de uma raiz α então perto de α o polinômio $p(x)$ deve ter uma das formas da Figura 1.1.*

Observações:

- A enumeração de raízes reais ou complexas pode ser feita aproximadamente pelo método gráfico a ser visto posteriormente.
- A existência de um máximo local negativo, ou mínimo local positivo indica a existência nas proximidades de raízes complexas.

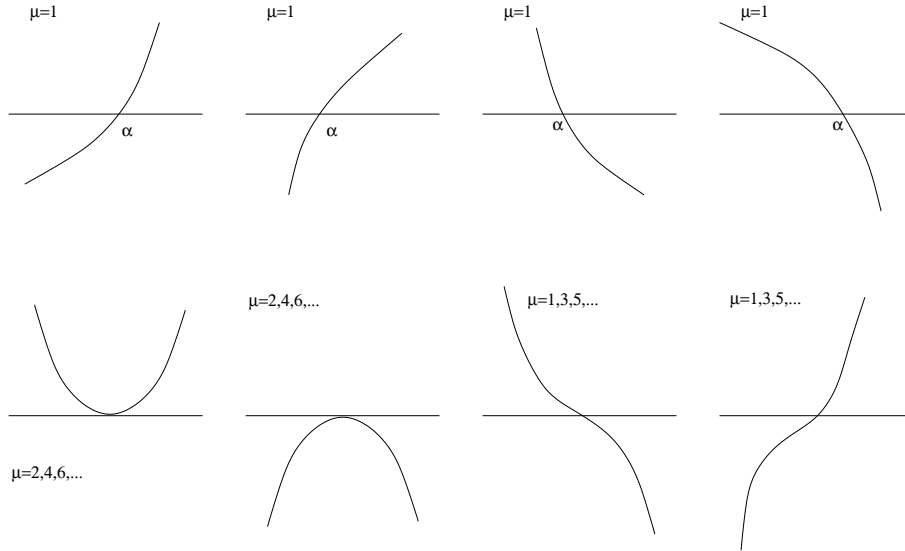


Figura 1.1: Multiplicidade de raízes

1.2 Localização das Raízes

1.2.1 Localização das Raízes Reais de Uma Equação Polinomial

Dada a equação polinomial $p(x) = 0$ podemos ter uma idéia mais ou menos precisa sobre quantos e de que tipo são as raízes de equação polinomial. Este tópico foi objeto de estudo na seção anterior. É preciso também saber onde elas estão localizadas, o que será o foco na presente seção. Serão apresentadas definições e teoremas que permitem realizar a localização das raízes.

Definição 4 *Localizar as raízes de $p(x) = 0$ é determinar um intervalo que contenha todas as raízes reais de $p(x)$. Localizar as raízes complexas é determinar os raios interno e externo que contenham as raízes complexas de $p(x) = 0$.*

A Figura 1.2 ilustra o conceito de localização de raízes reais e complexas.

Teorema 9 (Laguerre) *Dado o polinômio $p(x)$ de coeficientes reais e dado um número α , obtemos $p(x) = (x - \alpha)q(x) + R$. Se os coeficientes de $q(x)$*

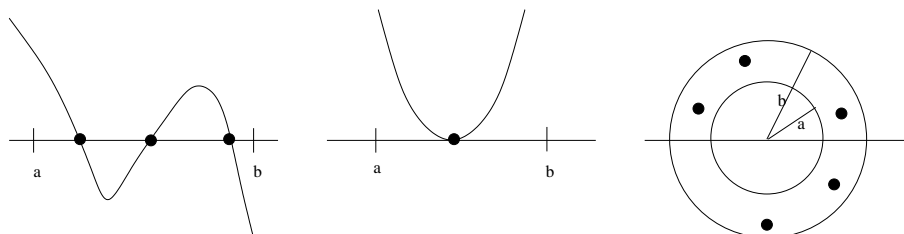


Figura 1.2: Localização de raízes

e R forem todos positivos ou nulos, então teremos que todas as raízes reais positivas x_j verificam $x_j < \alpha$.

Cota de Laguerre-Thibault

Dado $p(x) = 0$ de coeficientes reais, faça a deflação de $p(x)$ por $x - 1$, $x - 2$, $x - 3 \dots$, até $x - m$, onde $q(x)$ tenha todos os coeficientes positivos ou nulos, assim como $R(x) > 0$ tal m é chamado de cota superior das raízes reais de $p(x) = 0$. Para determinar a cota inferior basta fazer o mesmo procedimento para $p(-x)$ e assim determina-se a cota inferior.

Exemplo

Tomemos como exemplo o polinômio $p(x) = x^5 + x^4 - 9x^3 - x^2 + 20x - 12$ e considere a tarefa de localizarmos as raízes de $p(x) = 0$.

	1	1	-9	-1	20	-12
1	1	2	-7	-8	12	
	1	2	-7	-8	-12	0

	1	1	-9	-1	20	-12
2	2	6	-6	-14	12	
	1	3	-3	-7	6	0

	1	1	-9	-1	20	-12
3	3	12	9	24	132	
	1	4	3	8	44	120

Logo temos que todas as raízes positivas de $p(x) = 0$ são menores que 3.

Para pesquisar a localização das raízes negativas utiliza-se o mesmo procedimento, mas desta vez este é aplicado ao polinômio obtido ao multiplicar-se $p(-x) = -x^5 + x^4 + 9x^3 - x^2 - 20x - 12$ por -1 .

	1	-1	-9	1	20	12
1	1	0	-9	-8	12	
	1	0	-9	-8	12	24

	1	-1	-9	1	20	12
2	2	2	-14	-26	-12	
	1	1	-7	-13	-6	0

	1	-1	-9	1	20	12
3	3	6	-9	-24	-12	
	1	2	-3	-8	-4	0

	1	-1	-9	1	20	12
4	4	12	12	52	288	
	1	3	3	13	72	300

Portanto, as raízes pertencem ao intervalo $[-4, 3]$.

Teorema 10 (*Cota de Vene*) Para toda a raiz positiva α de $p(x) = 0$ onde $a_0 \neq 0$, verifica-se que:

$$0 \leq \alpha \leq 1 + \frac{M}{a_0 + a_1 + \dots + a_p}$$

onde M é o valor absoluto do menor dos coeficientes negativos e a_p é o ultimo coeficiente positivo antes do primeiro coeficiente negativo.

Exemplo

Vamos ilustrar a Cota de Vene com o polinômio $p(x) = x^5 + x^4 - 9x^3 - x^2 + 20x - 12$. Note que $M = |-12| = 12$ e $a_p = 1$. Logo, $0 \leq \alpha \leq 1 + \frac{|-12|}{1+1} = 1 + \frac{12}{2} = 7$.

1.3 Localização das Raízes Complexas de Uma Equação Polinomial

Teorema 11 (*Cota de Kojima*) Dado o polinômio

$$p(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_{n-1}x + a_n$$

toda a raiz α , real ou complexa, verifica que

$$|\alpha| \leq q_1 + q_2$$

onde q_1 e q_2 são os valores maiores de:

$$\left\{ \left| \frac{a_i}{a_0} \right|^{\frac{1}{i}} \right\}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Exemplo

Seja o polinômio $p(x) = x^5 + x^4 - 9x^3 - x^2 + 20x - 12$, onde $a_0 = 1$, $a_1 = 1$, $a_2 = -9$, $a_3 = -1$, $a_4 = 20$, e $a_5 = -12$. Podemos então verificar que a série de fatores é:

$$\left\{ 1^{\frac{1}{1}}, 9^{\frac{1}{2}}, 1^{\frac{1}{3}}, 20^{\frac{1}{4}}, 12^{\frac{1}{5}} \right\} = \{1, 3, 1, 2.114743537, 1.643751829\}.$$

Daí verificamos que $q_1 = 3$ e $q_2 = 2.114742527$. Logo, temos que toda raiz satisfaz $|\alpha| \leq 5.114742527$, o que nos dá o raio externo do anel que contém as raízes de $p(x)$.

Para determinar o raio interno do anel, devemos calcular $p(\frac{1}{x}) = -12x^5 + 20x^4 - x^3 - 9x^2 + x + 1$ e aplicar o mesmo procedimento, pois as raízes de $p(\frac{1}{x})$ são os inversos das de $p(x)$. Temos então que:

$$\left\{ \left(\frac{20}{12} \right)^{\frac{1}{1}}, \left(\frac{1}{12} \right)^{\frac{1}{2}}, \left(\frac{9}{12} \right)^{\frac{1}{3}}, \left(\frac{1}{12} \right)^{\frac{1}{4}}, \left(\frac{1}{12} \right)^{\frac{1}{5}} \right\} =$$

$$\{1.666, 0.288675239, 0.908560296, 0.537284, 0.608364342\}.$$

Daí verificamos que $q_1 = 1.666$ e $q_2 = 0.908560296$. $c = 2.575226902$ e daí a cota inteira é $\frac{1}{c} = 0.388315288 \Rightarrow 0.388315288 < |\alpha| < 5.114742527$.

Teorema 12 (*Cota de Cauchy*) Dado um polinômio real $p(x)$, então toda raiz α real ou complexa, de $p(x) = 0$ satisfaz:

$$|\alpha| < |\beta|$$

1.4. SEPARAÇÃO DAS RAÍZES DE UMA EQUAÇÃO POLINOMIAL 11

sendo $\beta = \lim_{i \rightarrow \infty} x_i$ com $x_0 = 0$ e

$$x_i = \left(\left| \frac{a_1}{a_0} \right| x_{i-1}^{n-1} + \left| \frac{a_2}{a_0} \right| x_{i-1}^{n-2} + \dots + \left| \frac{a_{n-1}}{a_0} \right| x_{i-1} + \left| \frac{a_n}{a_0} \right| \right)^{\frac{1}{n}}.$$

Exemplo

Tomemos o polinômio $p(x) = x^5 + x^4 - 9x^3 - x^2 + 20x - 12$. Então $x_0 = 0$ e $a_0 = 1$, o que nos leva a produzir a série:

$$x_{k+1} = [x_k^4 + 9x_k^3 + x_k^2 + 20x_k + 12]^{\frac{1}{5}}$$

Podemos então verificar que

$$\begin{aligned} x_1 &= \sqrt[5]{12} = 1.643751829 \\ x_2 &= 2.485458195 \\ &\vdots \\ x_{10} &= 3.805140857 \end{aligned}$$

Como resultado, podemos afirmar que não há nenhuma raiz fora do círculo centrado em zero e de raio 4.0.

1.4 Separação das Raízes de Uma Equação Polinomial

Definição 5 Separar as raízes de uma equação polinomial é o processo de encontrar uma sequência de subintervalos distintos, tais que cada subintervalo contenha exatamente uma raiz real e cada raiz real esteja num subintervalo.

Teorema 13 (Bolzano) Se f for uma função contínua em $[a, b]$ e trocar de sinal nos extremos desse intervalo, então existe pelo menos uma raiz real de f em $[a, b]$.

Teorema 14 (Budan) Seja $p^k(a)$ o valor da derivada de ordem k de $p(x)$ calculada para $x = a$. Seja v_a o número de variações de sinal da sequência:

$$p(a), p'(a), p''(a), \dots, p^{(n+1)}(a)$$

tomadas nesta ordem. Então o número de raízes de $p(x) = 0$ no intervalo (a, b) é igual ou menor que $|v_a - v_b|$ por um múltiplo de 2.

Exemplo

Seja $p(x) = x^3 - 2x^2 - x + 2$ um polinômio de grau 3. Pela regra de Descartes temos duas variações de sinal e daí segue que existem duas raízes, ou não temos raízes positivas. Vamos agora calcular a forma analítica das derivadas de $p(x)$:

$$\begin{aligned} p'(x) &= 3x^2 - 4x - 1 \\ p''(x) &= 6x - 4 \\ p'''(x) &= 6 \end{aligned}$$

Calculando a cota de Laguerre-Thibault, conforme tabelas que seguem abaixo, podemos deduzir que as raízes positivas são menores que 3 (cota superior igual a 3).

	1	-2	-1	2
1		1	-1	-2
	1	-1	-2	0

	1	-2	-1	2
2		2	0	-2
	1	0	-1	0

	1	-2	-1	2
3		3	3	6
	1	1	12	8

Aplicando o Teorema de Budan, temos que $v_0 = 2$ e $v_3 = 0$, conforme tabelas abaixo, logo há duas ou nenhuma raiz real em $[0, 3]$.

$$\begin{array}{rcl|lcl} p(0) & = & 2 & p(3) & = & 8 \\ p'(0) & = & -1 & p'(3) & = & 10 \\ p''(0) & = & -4 & p''(3) & = & 14 \\ p'''(0) & = & 6 & p'''(3) & = & 6 \end{array}$$

Exemplo

Considere agora o polinômio:

$$p(x) = x^4 - 4x^3 + 6x^2 + 4x + 1$$

de grau 4. O número de variações de sinal de $p(x)$ é 4, donde podemos ter quatro, duas ou nenhuma raiz positiva. Vamos então calcular a Cota de Laguerre-Thibault, conforme desenvolvimento abaixo.

1.4. SEPARAÇÃO DAS RAÍZES DE UMA EQUAÇÃO POLINOMIAL 13

	1	-4	6	4	1
1		1	-3	3	7
	1	-3	3	7	8

	1	-4	6	4	1
2		2	-2	8	24
	1	-2	4	12	25

	1	-4	6	4	1
3		3	-3	3	21
	1	-1	3	7	22

	1	-4	6	4	1
4		4	0	24	56
	1	0	6	28	57

Uma vez que a Cota de Laguerre-Thibault é 4, podemos aplicar o Teorema de Budan calculando v_0 e v_4 , mas antes disso temos que obter as derivadas de $p(x)$:

$$\begin{aligned} p'(x) &= 4x^3 - 12x^2 + 12x + 4 \\ p''(x) &= 12x^2 - 24x + 12 \\ p'''(x) &= 24x - 24 \\ p''''(x) &= 24 \end{aligned}$$

Daí calculamos os valores das derivadas nos pontos $x = 0$ e $x = 4$, obtendo os resultados do quadro abaixo.

$$\begin{array}{lcl} p(0) & = & 1 \\ p'(0) & = & 4 \\ p''(0) & = & 12 \\ p'''(0) & = & -24 \\ p''''(0) & = & 24 \end{array} \left| \begin{array}{lcl} p(4) & = & 81 \\ p'(4) & = & 108 \\ p''(4) & = & 108 \\ p'''(4) & = & 72 \\ p''''(4) & = & 24 \end{array} \right.$$

Portanto, deduzimos que $v_0 = 2$ e $v_4 = 0$. O teorema então nos diz que o número de raízes em $(0, 4)$ é menor ou igual a $|v_0 - v_4| = 2$ por um múltiplo de 2. Portanto, deve haver duas ou nenhuma raiz no intervalo $(0, 4)$.

Capítulo 2

Integração Numérica

Ao contrário da diferenciação, a integral de uma função $f(x)$ não necessariamente possui uma solução analítica. Por exemplo, a integral limitada $F(x) = \int_a^b e^{-x^2} dx$ da função $f(x) = e^{-x^2}$ não possui solução analítica. Então, como podemos encontrar $F(x)$? Uma solução aproximada (arbitrariamente aproximada para o caso de uma máquina de precisão ilimitada) pode ser obtida por meio de métodos numéricos. Este métodos serão objeto de estudo no presente capítulo.

2.1 O Problema da Integração Numérica

Os métodos para o cálculo de integrais definidas $F(x) = \int_a^b f(x) dx$ são agrupadas em quatro tipos:

Método Analítico Este método consiste em se encontrar a solução analítica de $F(x)$, por exemplo $F(x) = \int \frac{1}{x} dx = \ln x + c$. Por outro lado, $F(x) = \int e^{-x^2} dx$ não pode ser escrita como uma combinação finita de outras funções algébricas, logarítmicas ou exponenciais. No caso de $F(x) = \int_0^x \frac{1}{1+t^2} dx$, podemos obter $F(x)$ através de várias etapas mas estas podem levar a erros e, além disso, o resultado pode envolver algumas funções que serão avaliadas numericamente que, por sua vez, poderiam acarretar erros numéricos. Há também ferramentas computacionais inspiradas em algoritmos de Inteligência Artificial (IA) que encontram as primitivas de várias funções, tais como as ferramentas encontradas em pacotes de software como Mathematica, Maple e Matlab.

Método Mecânico Tais métodos fazem uso de instrumentos que calcu-

lam a área delimitada por uma curva qualquer, todavia são limitados quanto ao número de dimensões e têm aplicações restritas.

Método Gráfico Toma como base o desenho de $y = f(x)$ no intervalo $[a, b]$ que gera uma seqüência de iterandos no gráfico até que se obtenha o resultado. Estes métodos são pouco empregados uma vez que não são automáticos e portanto não podem ser aplicados em sistemas computacionais.

Método Numérico ou Algorítmico Os métodos numéricos podem ser empregados em geral e tem grande apelo prático uma vez que podem ser embutidos em ambientes computacionais.

2.2 Objetivo da Integração Numérica

O método numérico para calcular a integral de $f(x)$ utiliza exclusivamente as operações aritméticas necessárias ao cálculo de $f(x)$, o que pode ser conveniente, assim dispensando o cômputo das derivadas de f . Usualmente vamos calcular a integral de $f(x)$ de a até b , ou seja, $F(x) = \int_a^b f(x)dx$, onde $-\infty < a < b < +\infty$.

2.2.1 Filosofias Básicas

Para calcular o valor aproximado da integral definida vamos utilizar uma combinação linear de valores da função $f(x)$ em certos pontos x_j , $a \leq x_j \leq b$, chamados de nós e certos valores w_j que constituem os pesos. Mais formalmente, vamos aproximar $F(x)$ com a expressão:

$$\int_a^b f(x)dx \cong w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2) + \dots + w_{n+1} f(x_{n+1}) = \sum_{j=1}^{n+1} w_j f(x_j) \quad (2.1)$$

De acordo com os valores dos pesos e com a escolha de nós, temos no lado direito de ?? o que chamamos de *Regra de Integração*. A determinação dos pesos e dos nós é feita de acordo com várias filosofias que se agrupam em duas subdivisões:

Fixas A escolha de nós não depende do comportamento específico da função a ser integrada, mas apenas da regra a ser utilizada.

Adaptativa A escolha dos pontos $\{x_j\}$ depende do comportamento da função, de modo que a densidade seja maior onde a função $f(x)$ varia com menos “suavidade”.

Tanto na filosofia fixa como na adaptativa, empregamos vários tipos de regras. As mais importantes são:

Fórmulas de Newton-Cotes Determinamos os pontos $x_j = x_0 + jh$ que são igualmente espaçados de uma distância h . Os pesos w_j são obtidos a partir de um polinômio de grau m que interpola f nos pontos $(x_j, f(x_j))$. Portanto, a regra obtida é exata para qualquer polinômio de grau menor ou igual a m .

Fórmulas de Gauss Determinamos os pontos x_j e os pesos w_j de modo que a regra seja exata para qualquer polinômio de grau $p = 2n + 1$, onde n é o número de pontos a serem tomado no intervalo $[a, b]$. Os pontos x_j assim obtidos não são igualmente espaçados.

Fórmulas baseadas nos métodos de extrapolação do limite As fórmulas Newtonianas podem apresentar uma convergência lenta. Uma forma de se aumentar a velocidade de convergência é aplicar uma fórmula de Newton-Cotes para $h = h_j$, $h_{j+1} < h_j$, obtendo-se uma sequência de aproximações da integral $\int_a^b f(x)dx$.

As integrais a serem calculadas podem ser próprias ou impróprias, convergentes ou não. As integrais impróprias são aquelas nas quais o intervalo de integração ou integrando são ilimitados. Tais integrais são definidas como um limite de integrais próprias, como está a seguir:

1. $\int_a^\infty f(x)dx = \lim_{x \rightarrow \infty} \int_a^x f(x)dx$, quando o limite existe
2. $\int_{-\infty}^b f(x)dx = \lim_{x \rightarrow -\infty} \int_x^b f(x)dx$
3. No caso de integrando não limitado, f é definida no intervalo (a, b) que é ilimitada numa vizinhança de a , então: $\int_a^b f(x)dx = \lim_{r \rightarrow a^+} \int_r^b f(x)dx$, quando o limite existe.

Além dos problemas anteriores, podemos ter integrais próprias, convergentes, porém mal comportadas. Isto ocorre quando a função não tem um comportamento polinomial, apresenta picos ou oscilações frequentes. A Figura 2.1 ilustra as questões relativas a funções próprias e impróprias.

2.3 Fórmulas Newtonianas

2.3.1 Considerações Iniciais

As fórmulas Newtonianas são de aplicação mais simples quando temos a expressão de f ou quando obtemos uma tabela de pontos dados experimentalmente. As fórmulas dadas pela interpolação de f por polinômios de grau 1, 2 ou m podem ser aplicadas no intervalo $[a, b]$ constituindo regras simples, ou em subdivisões $[x_j, x_{j+1}]$ do intervalo $[a, b]$ formando regras compostas.

As fórmulas Newtonianas podem ser:

Fechadas Quando o integrando f é calculado em $x_0 = a$ e $x_m = b$ sendo que a função f deve ser definida nestes pontos.

Abertas Quando o integrando não é avaliado em ambas as extremidades do intervalo $[a, b]$ e sim em pontos próximos, assim $x_{m-r} = a$ e $x_{m+r} = b$ e $0 < r \leq m$ são utilizados quando há descontinuidade nos extremos.

Com termos de correção O integrando é avaliado em pontos x_j fora do intervalo $[a, b]$ para fornecer uma correção ao valor calculado por uma regra fechada.

2.3.2 Regras dos Retângulos

Seja o intervalo finito $[a, b]$ no eixo x , que é particionado em n subintervalos $[x_j, x_{j+1}]$, $j = 1, \dots, n$, onde $x_1 = a$, $x_{n+1} = b$, e $h_j = x_{j+1} - x_j$. Seja f uma função contínua, cuja integral não é conhecida. Nosso objetivo é calcular $F(x) = \int_a^b f(x)dx$ pelo cálculo das áreas de retângulos. Este procedimento pode ser ilustrado na Figura 2.2 ilustra três tipos de regras, a qual exemplifica três tipos de regras. Na Figura 2.2(a), a área de cada retângulo é dada por $A = f(x_j)h_j$, na Figura 2.2(b) a área é dada por $A = f(x_{j+1})h_j$, e por fim na Figura 2.2(c) a área é dada por $A = \frac{f(x_j)+f(x_{j+1})}{2}h_j$. Em qualquer das escolhas, a soma das áreas dos retângulos será uma aproximação de $\int_a^b f(x)dx$ que denotaremos por $I(f)$:

$$I(f) \cong \int_a^b f(x)dx$$

Considerando um intervalo de integração $[a, b]$ subdividido em n subintervalos, teremos:

$$I(f) = \sum_{j=1}^n I_j$$

$$I_j = \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x) dx \cong I_j(h_j)$$

onde I_j é área do j -ésimo retângulo, sendo dada por uma das três fórmulas acima.

Duas regras para integração são:

Regra Simples Uma fórmula simples para aproximação de $I(f)$ é utilizar apenas um retângulo, o que resulta nas expressões abaixo:

$$I(f) = f(a)(b - a)$$

$$I(f) = f(b)(b - a)$$

$$I(f) = \frac{f(a) + f(b)}{2}(b - a)$$

Regra Composta O intervalo $[a, b]$ é subdividido em n sub-intervalos.

Pela regra dos retângulos, a integral será indicada por $R(h_j)$ e as regras de integração são:

$$R(h_j) = \sum_{j=1}^n f(x_j)h_j$$

$$R(h_j) = \sum_{j=1}^n f(x_{j+1})h_j$$

$$R(h_j) = \sum_{j=1}^n f\left(\frac{x_j + x_{j+1}}{2}\right)h_j$$

variando conforme o tipo de retângulo, onde $x_{j+1} = x_j + h_j$. No caso em que $h_j = h$ é uma constante, então temos:

$$R(h_j) = h \sum_{j=1}^n f(x_j)$$

$$R(h_j) = h \sum_{j=1}^n f(x_{j+1})$$

$$R(h_j) = h \sum_{j=1}^n f\left(\frac{x_j + x_{j+1}}{2}\right)$$

e consequentemente $x_{j+1} = x_j + h$.

2.3.3 Regra dos Trapézios

Se aproximarmos f por um polinômio de grau 1 ao invés de zero, como no caso dos retângulos, temos que:

$$\begin{aligned} f^*(x) &= \left[\frac{f(a) - f(b)}{a - b} \right] x + \frac{af(b) - bf(a)}{a - b} \\ &= \frac{f(a)x - bf(a)}{a - b} + \frac{af(b) - f(b)x}{a - b} \\ &= f(a) \frac{x - b}{a - b} + f(b) \frac{a - x}{a - b} \end{aligned}$$

que pode ser colocado na forma:

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

Utilizando a aproximação linear $f^*(x)$ de $f(x)$, podemos verificar que:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_a^b f^*(x) dx \\ &= \int_a^b f(a) \frac{x - b}{a - b} dx + \int_a^b f(b) \frac{x - a}{b - a} dx \\ &= \frac{f(a)}{a - b} \int_a^b (x - b) dx + \frac{f(b)}{b - a} \int_a^b (x - a) dx \\ &= \frac{f(a)}{a - b} \left[\frac{(x - b)^2}{2} \right]_a^b + \frac{f(b)}{b - a} \left[\frac{(x - a)^2}{2} \right]_a^b \\ &= \frac{f(a)}{a - b} \left[-\frac{(a - b)^2}{2} \right] + \frac{f(b)}{b - a} \frac{(b - a)^2}{2} \\ &= \frac{-f(a)(a - b)}{2} + \frac{f(b)(b - a)}{2} \\ &= \frac{-f(a)(a - b) + f(b)(b - a)}{2} \\ &= \frac{b - a}{2} [f(a) + f(b)] \end{aligned}$$

Ou seja:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b - a}{2} [f(a) + f(b)]$$

que corresponde à *regra simples do trapézio*, conforme ilustração na Figura 2.3.

Se subdividirmos o intervalo $[a, b]$ em n subintervalos e em cada um deles aproximarmos f por uma reta teremos a regra dos trapézios composta. Indicando por $T(h_j)$ a aproximação de $I(f)$ pela regra composta dos trapézios, teremos:

$$\begin{aligned} T(h_j) &= \sum_{j=1}^n T_j(h_j) \\ &= \sum_{j=1}^n \frac{f(x_j) + f(x_{j+1})}{2} h_j \end{aligned}$$

onde $h_j = x_{j+1} - x_j$, $j = 1, \dots, n$. Se $h_j = h$, para todo j , podemos simplificar a expressão, obtendo:

$$T(h) = h \left[\frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \frac{f(x_2) + f(x_3)}{2} + \dots + \frac{f(x_n) + f(x_{n+1})}{2} \right]$$

ou ainda,

$$T(h) = \frac{h}{2} [f(x_1) + 2f(x_2) + 2f(x_3) + \dots + 2f(x_n) + f(x_{n+1})]$$

2.3.4 Regra de Simpson

Se aproximarmos f por um polinômio de grau 2, uma parábola, teremos a chamada *Regra de Simpson*. Porém, para interpolarmos f por uma parábola precisamos de 3 pontos para construirmos a fórmula da regra simples. Sejam a e b dois pontos dados e y_m , o ponto médio dado por $y_m = \frac{a+b}{2}$. Pelo polinômio de Lagrange temos que:

$$\begin{aligned} f(x) &\cong f^*(x) \\ &= f(a) \frac{(x-b)(x-y_m)}{(a-b)(a-y_m)} + f(y_m) \frac{(x-a)(x-b)}{(y_m-a)(y_m-b)} + f(b) \frac{(x-a)(x-y_m)}{(b-a)(b-y_m)} \end{aligned}$$

Podemos obter $f^*(x)$ através do polinômio de Gregory-Newton, usando as diferenças finitas:

$$f^*(x) = f(a) + (x-a) \frac{\Delta f(a)}{h} + (x-a)(x-y_m) \frac{\Delta^2 f(a)}{2h^2}$$

onde,

$$\begin{aligned}\Delta f(a) &= f(y_m) - f(a) \\ \Delta^2 f(a) &= f(b) - 2f(y_m) - f(a)\end{aligned}$$

Fazendo uma mudança de variável:

$$\begin{aligned}x(\alpha) &= a + \alpha h, \alpha \in [0, 2] \\ \frac{dx}{d\alpha} &= h \Rightarrow dx = h d\alpha \\ x - a &= a + \alpha h - a \Rightarrow x - a = \alpha h\end{aligned}$$

De acordo com esta mudança de variável, temos que $x(0) = a$, $x(1) = y_m$, e $x(2) = b$ para $h = \frac{b-a}{2}$. Daí deduzimos que:

$$\begin{aligned}(x - a)(x - y_m) &= \alpha h \left[a + \alpha h - \frac{(a + a + 2h)}{2} \right] \\ &= \alpha h \left[\frac{2a + 2\alpha h - 2a - 2h}{2} \right] \\ &= \alpha h [\alpha - 1] h = \alpha(\alpha - 1)h^2\end{aligned}$$

Podemos então obter a integral aproximada:

$$\begin{aligned}\int_a^b f^*(x) dx &= \int_0^2 \left[f(a) + \alpha h \frac{\Delta f(a)}{h} + \frac{\alpha(\alpha - 1)h^2 \Delta^2 f(a)}{2h^2} \right] h d\alpha \\ &= \int_0^2 \left[f(a) + \alpha \Delta f(a) + \frac{\alpha(\alpha - 1) \Delta^2 f(a)}{2} \right] h d\alpha \\ &= h \left\{ [f(a)\alpha]_0^2 + \Delta f(a) \left[\frac{\alpha^2}{2} \right]_0^2 + \frac{\Delta^2 f(a)}{2} \left[\frac{\alpha^3}{3} - \frac{\alpha^2}{2} \right]_0^2 \right\} \\ &= h \left[2f(a) + 2(f(y_m) - f(a)) + \frac{1}{3}(f(b) - 2f(y_m) + f(a)) \right]\end{aligned}$$

Portanto

$$\int_a^b f^*(x) dx = \frac{h}{3} [f(a) + 4f(y_m) + f(b)],$$

onde: $y_m = \frac{a+b}{2}$ e $h = \frac{b-a}{2}$.

A aproximação quadrática $f^*(x)$ de $f(x)$ no intervalo $[a, b]$, com ponto médio em y_m , é ilustrada na Figura 2.5.

Regra Composta de Simpson

Seguindo a mesma técnica de integração da regra composta dos trapézios, mas desta vez utilizando o integrador de Simpson, obtemos a Regra Composta de Simpson:

$$\begin{aligned} S(h_j) &= \sum_{j=1}^n s_j(h) \\ &= \sum_{j=1}^n \frac{h_j}{3} [f(x_j) + 4f(y_j) + f(x_{j+1})] \end{aligned}$$

onde $y_j = \frac{x_j + x_{j+1}}{2}$ e $h_j = \frac{x_{j+1} - x_j}{2}$, $j = 1, \dots, n$.

Expandindo a expressão de Simpson e assumindo que $h_j = h$ para todo j , podemos expressá-la na forma:

$$\begin{aligned} S(h) &= \frac{h}{3} [f(x_1) + 4f(y_1) + 2f(x_2) + 4f(y_2) + 2f(x_3) + \dots \\ &\quad + 2f(x_n) + 4f(y_n) + f(x_{n+1})]. \end{aligned}$$

2.3.5 Fórmula Geral das Regras Newtonianas

Podemos generalizar os procedimentos anteriores e aproximar f por um polinômio de grau m . Lembre que na regra dos retângulos utilizamos um polinômio interpolador de grau 0, na regra dos trapézios um polinômio de grau 1, e por último um polinômio de grau 2 na regra de Simpson. Ao adotarmos um polinômio de grau m , precisamos determinar $m + 1$ pontos no intervalo $[a, b]$ para a aplicação da regra simples. Seja:

- $h > 0$ a distância entre os nós;
- $x_0 = a$ o nó inicial;
- $x_k = x_0 + hk$, $k = 0, \dots, m$, os demais nós; e
- $f_k = f(x_k)$ o valor da função nos diferentes nós

Com base nestas definições, a fórmula de interpolação de Newton nos dá:

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{k=0}^m \binom{u}{k} \Delta^k f_0 + R_{m+1}^*, \text{ onde} \\ u &= \frac{x - x_0}{h} \\ \binom{u}{k} &= \frac{u(u-1)(u-2)\dots(u-k+1)}{k!} \\ R_{m+1} &= \frac{h}{(m+1)!} u(u-1)\dots(u-m) f^{(m+1)}(\eta), x_0 < \eta < x_m \end{aligned}$$

Integrando f e trocando a integral \int com a somatória \sum , temos:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= h \sum_{k=0}^m a_k \Delta^k f_0 + R_{m+1}, \text{ onde} \\ a_k &= \int_{\alpha}^{\beta} \binom{u}{k} du; \quad \alpha = \frac{a - x_0}{h} \text{ e } \beta = \frac{b - x_0}{h} \\ R_{m+1} &= h^{m+1} \int_{\alpha}^{\beta} \binom{u}{m+1} f^{(m+1)}(\eta(u)) du \end{aligned}$$

2.3.6 Exemplo 1

Tomemos como tarefa o cálculo de $\int_0^1 e^{-x^2} dx$, com $n = 4$ e $n = 8$ através da Regra dos Trapézios.

Caso i, $n = 4$: Nesta situação os parâmetros e nós são como segue:

$$\begin{aligned} h &= \frac{b - a}{4} = 0.25 \\ x_1 &= 0 \\ x_2 &= 0.25 \\ x_3 &= 0.5 \\ x_4 &= 0.75 \\ x_5 &= 1.0 \end{aligned}$$

Usando a expressão:

$$T(h) = \frac{h}{2} [f(x_1) + 2f(x_2) + 2f(x_3) + \dots + 2f(x_n) + f(x_{n+1})]$$

e substituindo os valores acima, obtemos:

$$\begin{aligned} T(h) &= 0.125[1 + 2 \times 0.9394130632 + 2 \times 0.778800783 \\ &\quad + 2 \times 0.589788 + 0.367879441] \\ &= 0.742984098 \end{aligned}$$

Caso ii, $n = 8$: Nesta situação os parâmetros e nós são como segue:

$$\begin{aligned} h &= 0.125 \\ x_1 &= 0 \\ x_2 &= 0.125 \\ x_3 &= 0.25 \\ x_4 &= 0.375 \\ x_5 &= 0.5 \\ x_6 &= 0.625 \\ x_7 &= 0.75 \\ x_8 &= 0.875 \\ x_9 &= 1.0 \end{aligned}$$

Usando a expressão:

$$T(h) = \frac{h}{2}[f(x_1) + 2f(x_2) + 2f(x_3) + \dots + 2f(x_n) + f(x_{n+1})]$$

obtemos:

$$\begin{aligned} T(0.125) &= \frac{0.125}{2}[f(x_1) + 2f(x_2) + 2f(x_3) + \dots + 2f(x_8) + f(x_9)] \\ &= 0.745865615 \end{aligned}$$

Comparando os dois resultados, vimos que podemos confiar em dois dígitos de cada resultado, então:

$$\int_0^1 e^{-x^2} \cong 0.74$$

2.3.7 Exemplo 2

Calcular $f(x)$ sendo f a função tabelada a seguir, usando a regra de Simpson:

x_j	1.9	2.0	2.1	2.2	2.3
f_j	3.41773	3.76220	4.14431	4.56791	5.03722

Usando a regra de Simpson, temos:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \frac{h}{3}[f(x_1) + 4f(x_2) + 2f(x_3) + 4f(x_4) + \dots + 4f(x_n) + f(x_{n+1})] \\ h &= 0.1 \\ n &= 4\end{aligned}$$

Substituindo os valores acima, obtemos:

$$\begin{aligned}S(f) &= \frac{0.1}{3}[3.41773 + 4 \times 3.76220 + 2 \times 4.14431 + 4 \times 4.56791 + 5.03722] \\ &= 1.68880\end{aligned}$$

2.3.8 Exemplo 3

Calcular $\int_1^2 x \ln x dx$, usando a regra de Simpson, para $n = 1$ e $n = 2$.

Caso i, $n = 1$: Nesta situação, os parâmetros são conforme segue:

$$\begin{aligned}h &= \frac{1}{2} \\ S(1) &= \frac{h}{3}[f(1) + 4f(1.5) + f(2)] \\ &= \frac{1}{6}[0 + 2.432790649 + 1.386294361] \\ &= 0.636514163\end{aligned}$$

Caso ii, $n = 2$: Nesta situação, os parâmetros são conforme segue:

$$\begin{aligned}h &= \frac{1}{4} \\ S(0.25) &= \frac{h}{3}[f(1) + 4f(1.25) + 2f(1.5) + 4f(1.75) + f(2)] \\ &= \frac{0.25}{3}[0 + 1.115717756 + 1.126395324 + 3.917310515 + 1.386294361] \\ &= 0.628809829\end{aligned}$$

2.4 Estimativas de Erros

Para transformar a expressão abaixo numa igualdade:

$$\int_a^b f(x)dx \cong \sum_{j=1}^{n+1} w_j f(x_j)$$

consideraremos o erro que estamos cometendo. Embora o erro não possa ser calculado exatamente, em muitos casos ele pode ser estimado com boa precisão. O processo de integração numérica constitui um problema bem condicionado em princípio. É claro que, ao aproximarmos f por um polinômio p^* , estamos cometendo um erro mas se observarmos a Figura 2.6 veremos que a soma dos erros se anula à medida que n aumenta.

Adotaremos a notação abaixo para erros.

- E_{TTC} irá para indicar o erro de truncamento da regra dos trapézios composta.
- E_{TTS} indicará o erro de truncamento da regra dos trapézios simples.

2.4.1 Erro de Truncamento na Regra dos Trapézios Simples

Levando os erros em consideração, a integral pode ser colocada na forma:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{(b-a)}{2}[f(a) + f(b)] + E_{TTS}$$

Teorema 15 Se $f(x)$ é duas vezes diferenciável em $[a, b]$, então o erro de truncamento E_{TTS} é dado por:

$$E_{TTS} = -\frac{h^3}{12}f''(\xi), \text{ onde } \xi \in [a, b]$$

Exemplo de Aplicação

Calcular a integral $I = \int_1^2 \frac{e^{-x}}{x} dx$ pela regra dos trapézios simples.

$$\begin{aligned} I &= T(1) \\ &= \frac{1}{2}[f(1) + f(2)] \\ &= 0.5(3.678794412 \times 10^{-1} + 6.76676416 \times 10^{-2}) \\ &= 0.5(4.355470828 \times 10^{-1}) \\ &= 2.1777735414 \times 10^{-1} \end{aligned}$$

O valor exato para 12 casas decimais é $2.170483423687 \times 10^{-1}$ e, portanto, o erro absoluto é:

$$|2.1777735414 \times 10^{-1} - 2.170483423687 \times 10^{-1}| = 4.729 \times 10^{-2}$$

Comparando o erro absoluto com o erro indicado pelo Teorema 15, precisamos inicialmente calcular as derivadas:

$$\begin{aligned} f'(x) &= -\frac{e^{-x}}{x^2} - \frac{e^{-x}}{x} \\ &= -\left(\frac{1}{x} + \frac{1}{x^2}\right) e^{-x} \\ f''(x) &= \frac{e^{-x}}{x} + \frac{e^{-x}}{2} + 2\frac{e^{-x}}{x^3} + \frac{e^{-x}}{x^2} \\ &= \left(\frac{1}{x} + \frac{2}{x^2} + \frac{2}{x^3}\right) e^{-x} \end{aligned}$$

Fazendo $\xi = 1$, $\xi \in [1, 2]$ temos que:

$$f''(\xi) = 5e^{-1} = 1.839$$

logo, o erro de truncamento previsto pelo teorema é $|\frac{1}{12} \cdot f''(\xi)| = 0.15325$. Portanto, confirma-se que o erro absoluto é menor que o previsto.

2.5 Erro de Truncamento na Regra dos Trapézios Composta

Teorema 16 *Se f é duas vezes continuamente diferenciável em $[a, b]$, então o erro de truncamento da fórmula composta dos trapézios, para n subintervalos, é dado por:*

$$E_{TTC} = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi), \quad \xi \in [a, b]$$

Prova. Seja agora $h = \frac{b-a}{n}$ e $n = \frac{b-a}{h}$. Para cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, 2, \dots, n$, temos:

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx &= \frac{h}{2}[f(x_i) + f(x_{i-1})] + E_{TTi}, \text{ onde} \\ E_{TTi} &= -\frac{h^3}{12}f''(\xi_i), \quad \xi_i \in [x_{i-1}, x_i] \end{aligned}$$

2.5. ERRO DE TRUNCAMENTO NA REGRA DOS TRAPÉZIOS COMPOSTA 29

Uma vez que:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_3} f(x)dx + \dots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx$$

e pela regra composta, temos que:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)] + \sum_{i=1}^n E_{TTi}$$

mas,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n E_{TTi} &= \sum_{i=1}^n -\frac{h^3}{12} f''(\xi_i), \quad \xi_i \in [x_{i-1}, x_i] \\ &= -\frac{h^3}{12} \sum_{i=1}^n f''(\xi_i) \\ &= -\frac{(b-a)^3}{12n^3} \sum_{i=1}^n f''(\xi_i) \end{aligned}$$

Como $f''(x)$ é contínua, $f''(x)$ assume todos os valores entre seus máximos e mínimos em $[a, b]$. Portanto, existe algum $\xi \in [a, b]$ tal que:

$$f''(\xi) = \frac{\sum_{i=1}^n f''(\xi_i)}{n}$$

Logo,

$$\begin{aligned} E_{TTC} &= -\frac{(b-a)^3}{12n^3} n f''(\xi) \\ &= -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi) \\ &= -\frac{h^2}{12} (b-a) f''(\xi) \end{aligned}$$

■

Exemplo de Aplicação

Considerando o exemplo anterior, vamos calcular $\int_1^2 \frac{e^{-x}}{x} dx$, com $n = 2, 4, \dots, 256$. Os resultados destes cálculos, juntamente com o erro absoluto e os limites de erro calculados são listados na tabela abaixo.

h	n	Valor calculado	Erro absoluto	Limite de erros
1	1	0.2177735413	4.729×10^{-2}	1.53×10^{-1}
5.0×10^{-1}	2	0.1832634907	1.280×10^{-2}	3.83×10^{-2}
2.5×10^{-1}	4	0.1737575538	3.270×10^{-3}	9.58×10^{-3}
1.25×10^{-1}	8	0.1715074075	8.240×10^{-4}	2.40×10^{-3}
6.25×10^{-2}	16	0.1706897700	2.060×10^{-4}	5.60×10^{-4}
\vdots				
3.906×10^{-3}	256	0.1704847700	8.070×10^{-7}	2.34×10^{-6}

Podemos observar que cada vez que o número de intervalos n é dobrado, o erro absoluto é reduzido por um fator de aproximadamente 4, o que está de acordo com o resultado do teorema.

2.6 Estimação Numérica do Erro de Truncamento da Regra dos Trapézios

O que fazer quando $f''(x)$ não estiver disponível? Duas possibilidades são:

1. Calcular $f''(x)$ numericamente
2. Calcular $T(h)$ e $T(\frac{h}{2})$ e comparar os resultados

No caso (i), a segunda derivada $f''(x)$ é calculada numericamente pela série de Taylor se f é suficientemente diferenciável:

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2)$$

Logo, um limite de $|f''(x)|$ pode ser calculado por:

$$\max_{1 \leq j \leq n} \frac{f(x_{j+1}) - 2f(x_j) + f(x_{j-1}))}{h^2}$$

O limite acima pode ser útil no caso da integração para pontos tabelados igualmente espaçados de h .

No caso (ii), podemos utilizar o Teorema 16:

$$\begin{aligned} I - T(h) &= -\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\xi_1), \quad \xi_1 \in [a, b] \\ I - T\left(\frac{h}{2}\right) &= -\frac{(b-a)}{12} \frac{h^2}{4} f''(\xi_2), \quad \xi_2 \in [a, b] \end{aligned}$$

2.6. ESTIMAÇÃO NUMÉRICA DO ERRO DE TRUNCAMENTO DA REGRA DOS TRAPÉZIOS 31

Assumindo que $f''(\xi_1) = f''(\xi_2)$, temos que:

$$\begin{aligned} 4[I - T(\frac{h}{2})] &\cong I - T(h) \\ 4I - 4T(\frac{h}{2}) &\cong I - T(h) \\ 3I - 3T(\frac{h}{2}) &\cong T(\frac{h}{2}) - T(h) \\ I - T(\frac{h}{2}) &\cong \frac{T(\frac{h}{2}) - T(h)}{3} \end{aligned}$$

Chegamos à conclusão de que o erro de truncamento, ao calcularmos $T(\frac{h}{2})$ é, aproximadamente, a terça parte entre as duas aproximações $T(\frac{h}{2})$ e $T(h)$. Este método é particularmente vantajoso, pois, ao calcularmos $T(\frac{h}{2})$ podemos reutilizar os valores de f usados para calcular $T(h)$. Ou seja,

$$\begin{aligned} T(h) &= h \left[\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + f(a+2h) + \dots + f(a+(n-1)h) + \frac{f(b)}{2} \right] \\ T(\frac{h}{2}) &= \frac{h}{2} \left[\frac{1}{2}f(a) + f(a+\frac{h}{2}) + f(a+h) + f(a+\frac{3h}{2}) + f(a+2h) \right. \\ &\quad \left. + \dots + f(a+(n-1)h) + f(a+(n-\frac{1}{2})h) + \frac{f(b)}{2} \right] \end{aligned}$$

Portanto,

$$T(\frac{h}{2}) = \frac{1}{2}T(h) + \frac{h}{2} \sum_{j=1}^n f(a + (j - \frac{1}{2})h)$$

logo o número de avaliações é reduzido pela metade.

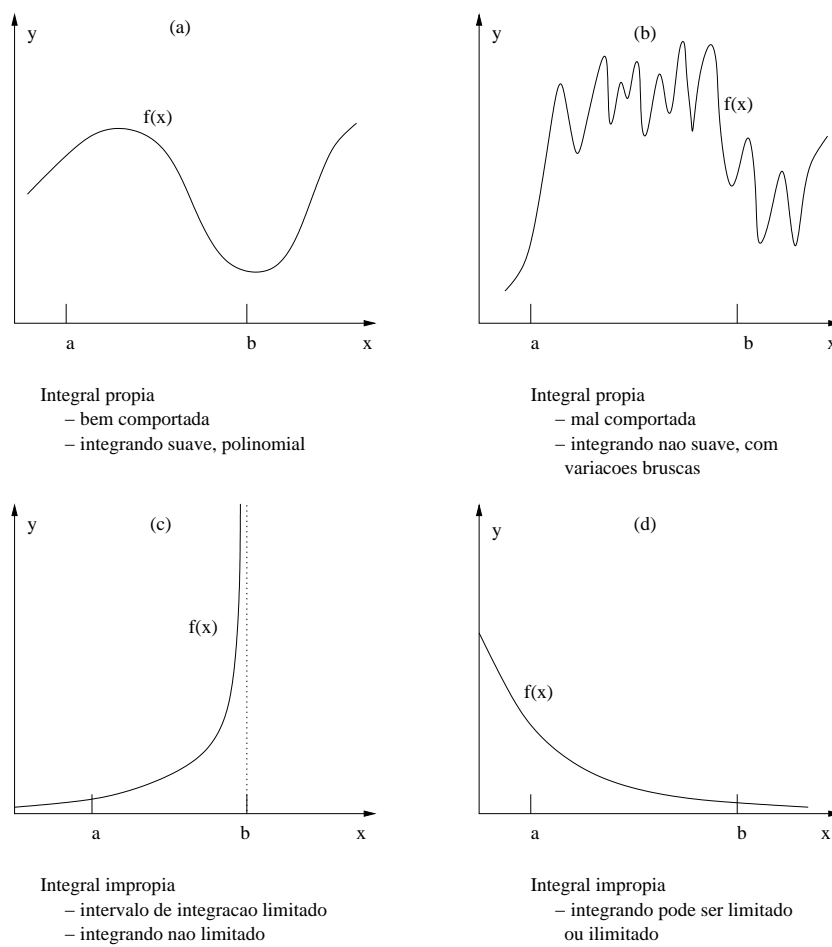


Figura 2.1: Comportamento de integrais

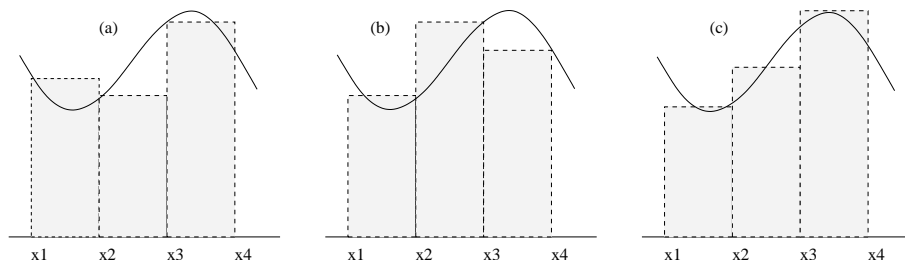


Figura 2.2: Regras dos retângulos

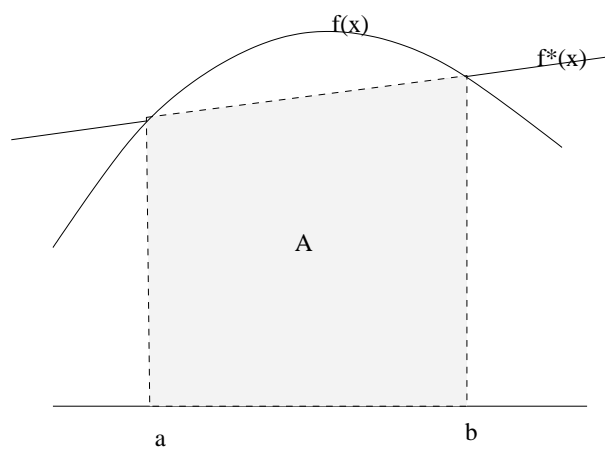


Figura 2.3: Regra simples do trapézio

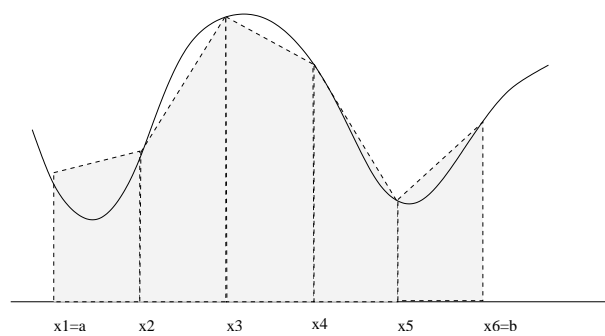


Figura 2.4: Regra composta do trapézio

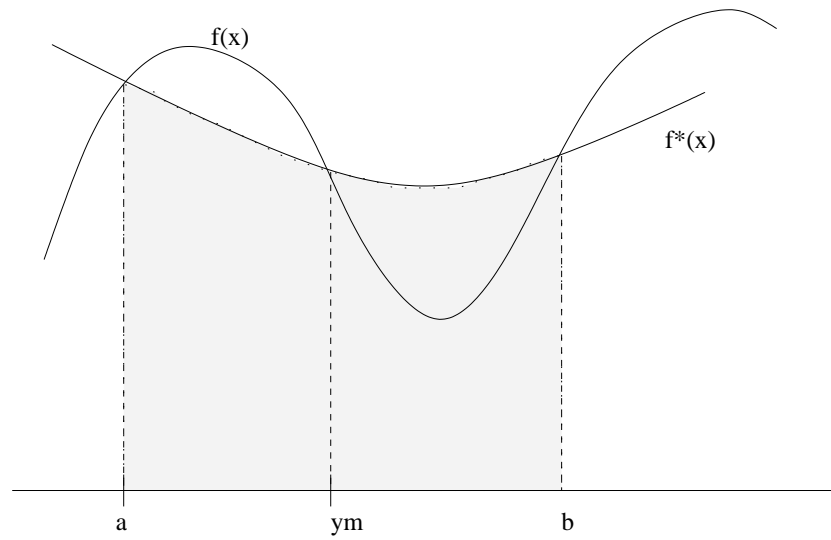


Figura 2.5: Regra de Simpsom

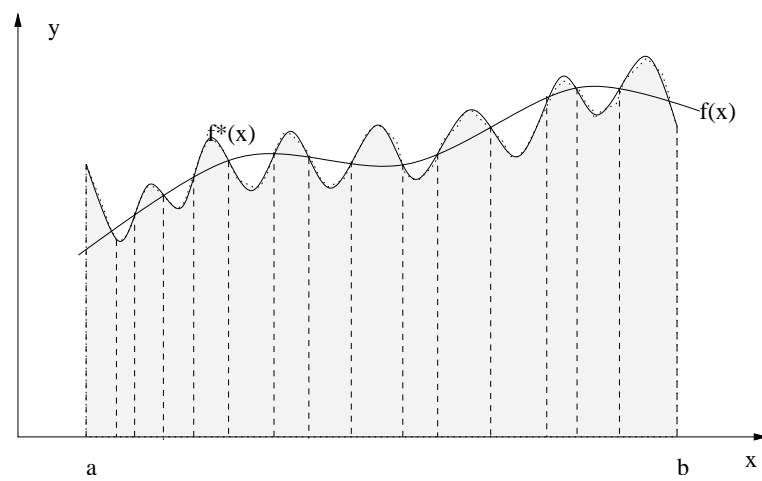


Figura 2.6: Cancelamento de erros

Capítulo 3

Resolução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

Fenômenos físicos frequentemente envolvem relações entre uma variável independente x e uma variável dependente y , que não é fácil ou mesmo possível de ser escrita como uma função da variável dependente: $y = f(x)$. Por outro lado, podemos estabelecer a relação entre y e x através de seus valores e as derivadas da função desconhecida $y'(x)$. Em circuitos elétricos, por exemplo, desejamos encontrar a voltagem como uma função do tempo, $v(t)$, que pode ser escrita como uma relação das derivadas de v no tempo e as propriedades do circuito. Uma relação escrita como uma função da variável independente x , da variável dependente y e suas derivadas $y'(x)$, $y''(x)$, ... é dita uma equação diferencial. Uma relação que envolve derivadas até ordem n é dita equação diferencial ordinária e assume a forma:

$$F(x, y(x), y'(x), \dots, y^{(n)}(x)) = 0$$

Neste capítulo faremos uma breve introdução ao problema de encontrar a solução de equações diferenciais ordinárias e também de sistemas equações diferenciais ordinárias. No caso da variável independente ser o tempo t , o sistema de equações diferenciais ordinárias toma a forma:

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= f_1(x_1, \dots, x_n) \\ \dot{x}_2 &= f_2(x_1, \dots, x_n) \\ &\vdots \\ \dot{x}_n &= f_n(x_1, \dots, x_n)\end{aligned}$$

Mais especificamente, estaremos interessados no problema de encontrar a trajetória $x(t)$, $t \in [0, T]$, sendo dado o estado inicial $x(0) \in \mathbb{R}^n$, onde $x(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))$.

3.1 Introdução a Modelagem com Equações Diferenciais

Nesta seção será feita a modelagem da dinâmica do de um veículo com um pêndulo invertido acoplado, conforme mostra a Figura 3.1. Serão obtidas as equações diferenciais que regem o movimento do veículo e do pêndulo em resposta a forças externas e a ação da gravidade.

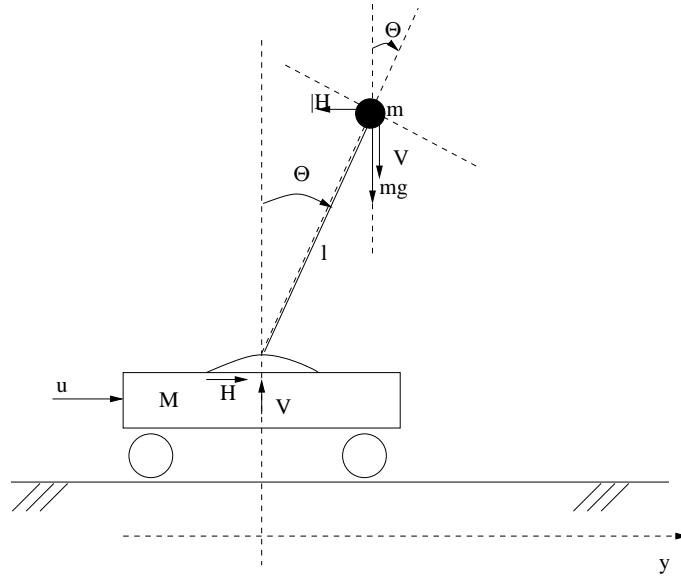


Figura 3.1: Veículo com pêndulo invertido

Objetivando tornar o desenvolvimento mais simples, assumimos que o carro e o pêndulo se movem no mesmo plano, e que podemos desprezar a fricção, a massa da haste, e a força do vento. O problema clássico de controle consiste em encontrar uma lei de controle que mantenha o pêndulo na posição vertical, o qual se encontra deslocado da posição a qual pode estar se movimento para baixo. Utiliza-se a força horizontal para trazer o pêndulo de volta à posição vertical. Sejam H e V respectivamente, as forças vertical

3.1. INTRODUÇÃO A MODELAGEM COM EQUAÇÕES DIFERENCIAIS 37

e horizontal exercidas pelo carro no pêndulo conforme a figura. Aplicação da lei de Newton dos movimentos lineares, obtemos:

$$M \frac{d^2}{dt^2} y = u - H \quad (3.1)$$

$$H = m \frac{d^2}{dt^2} (y + l \sin \theta) \quad (3.2)$$

$$mg - V = m \frac{d^2}{dt^2} (l \cos \theta) \quad (3.3)$$

onde $y + l \sin \theta$ é a posição horizontal da massa do pêndulo e $l \cos \theta$ é a posição vertical da massa. Reescrevendo as equações acima, podemos colocá-las na forma abaixo:

$$M\ddot{y} = u - H \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} H &= m\ddot{y} + ml \frac{d^2}{dt^2} (\sin \theta) \\ &= m\ddot{y} + ml \frac{d}{dt} (\cos \theta) \\ &= m\ddot{y} + ml \cos \ddot{\theta} - ml \sin \theta (\dot{\theta})^2 \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} mg - V &= m \frac{d}{dt} - l \sin \theta \dot{\theta} \\ &= ml (-\cos \theta \dot{\theta} \dot{\theta} - \sin \theta \ddot{\theta}) \\ &= ml [-\sin \theta \ddot{\theta} - \cos \theta (\dot{\theta})^2] \end{aligned} \quad (3.6)$$

Aplicando a Lei de Newton ao movimento rotacional do pêndulo, obtemos:

$$ml^2 \ddot{\theta} = lmg \sin \theta + Vl \sin \theta - Hl \cos \theta \quad (3.7)$$

De (3.7) obtemos:

$$V = \frac{ml^2 \ddot{\theta} - lmg \sin \theta + Hl \cos \theta}{l \sin \theta} \quad (3.8)$$

Substituindo (3.1) em (3.8) obtemos:

$$V = \frac{ml^2 \ddot{\theta} - lmg \sin \theta + l \cos \theta u - Ml \cos \theta \ddot{y}}{l \sin \theta} \quad (3.9)$$

Substituindo (3.9) em (3.6), obtemos:

$$mg + \frac{ml^2 \ddot{\theta} - lmg \sin \theta + l \cos \theta u - Ml \cos \theta \ddot{y}}{l \sin \theta} = ml [-\sin \theta \ddot{\theta} - \cos \theta (\dot{\theta})^2]$$

$$\begin{aligned}
& -lmg \sin \theta + ml^2 \ddot{\theta} - lmg \sin \theta \\
& + l \cos \theta u - Ml \cos \theta \ddot{y} = ml^2 \sin^2 \theta \ddot{\theta} + ml^2 \cos \theta \sin \theta (\dot{\theta})^2
\end{aligned}$$

que por sua vez nos leva a:

$$\begin{aligned}
(ml^2 - ml^2 \sin^2 \theta) \ddot{\theta} &= ml^2 \cos \theta \sin \theta (\dot{\theta})^2 + 2mlg \sin \theta \\
&\quad - l \cos \theta u + Ml \cos \theta \ddot{y}
\end{aligned} \tag{3.10}$$

Substituindo (3.1) em (3.5), obtemos:

$$\begin{aligned}
u - M\ddot{y} &= m\ddot{y} + ml \cos \theta \ddot{\theta} - ml \sin \theta (\dot{\theta})^2 \\
(M + m)\ddot{y} &= ml \sin \theta (\dot{\theta})^2 - ml \cos \theta \ddot{\theta} + u
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Podemos expressar o sistema de equações diferenciais de uma forma mais compacta. Primeiramente, podemos colocar (3.10) na forma:

$$\alpha_1 \ddot{\theta} = \alpha_2 + \alpha_3 \ddot{y} + \alpha_4 u \tag{3.12}$$

onde:

$$\begin{cases} \alpha_1 = ml^2(1 - \sin^2 \theta) \\ \alpha_2 = ml^2 \cos \theta \sin \theta (\dot{\theta})^2 + 2mlg \sin \theta \\ \alpha_3 = Ml \cos \theta \\ \alpha_4 = -l \cos \theta \end{cases} \tag{3.13}$$

Depois, expressamos (3.11) como:

$$\beta_1 \ddot{y} = \beta_2 + \beta_3 \ddot{\theta} + \beta_4 u \tag{3.14}$$

onde:

$$\begin{cases} \beta_1 = (M + m) \\ \beta_2 = ml \sin \theta (\dot{\theta})^2 \\ \beta_3 = -ml \cos \theta \\ \beta_4 = 1 \end{cases} \tag{3.15}$$

Agora podemos substituir (3.15) na equação (3.12) de maneira a se obter:

$$\begin{aligned}
\alpha_1 \ddot{\theta} &= \alpha_2 + \alpha_3 \frac{(\beta_2 + \beta_3 \ddot{\theta} + \beta_4 u)}{\beta_1} + \alpha_4 u \\
\alpha_1 \ddot{\theta} - \frac{\alpha_3 \beta_3}{\beta_1} \ddot{\theta} &= \alpha_2 + \frac{\alpha_3 \beta_1}{\beta_1} + \frac{\alpha_4 \beta_1 + \alpha_3 \beta_4}{\beta_1} u
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Assim, podemos substituir (3.16) em (3.14) e escrevê-las na forma:

$$\begin{aligned}
\ddot{\theta} &= \frac{\beta_1}{\alpha_1 \beta_1 - \alpha_3 \beta_3} \left[\alpha_2 + \frac{\alpha_3 \beta_1}{\beta_1} + \frac{\alpha_4 \beta_1 + \alpha_3 \beta_4}{\beta_1} u \right] \\
\ddot{y} &= \frac{\beta_2}{\beta_1} \left[\alpha_2 + \frac{\alpha_3 \beta_1}{\beta_1} \right] + \left[\frac{\beta_4}{\beta_1} + \frac{\beta_3 (\alpha_4 \beta_1 + \alpha_3 \beta_4)}{\beta_1 (\alpha_1 \beta_1 - \alpha_3 \beta_3)} \right] u
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Isto significa que as derivadas segundas de θ e y foram definidas na forma compacta:

$$\begin{aligned}\ddot{\theta} &= f(\theta, \dot{\theta}, u) \\ \ddot{y} &= g(\theta, \dot{\theta}, u)\end{aligned}\quad (3.18)$$

onde f e g foram definidas conforme (3.17). Por meio de mudança de variáveis, vamos agora expressar o sistema de equações diferenciais em um sistema de equações envolvendo variáveis de estado e suas derivadas de primeira ordem no tempo. Sejam x_1 , x_2 , \dot{x}_1 e \dot{x}_2 as novas variáveis de estado, cujas relações com θ e y são:

$$\begin{cases} x_1 = \theta \\ x_2 = \dot{\theta} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \dot{x}_1 = \dot{\theta} = x_2 \\ \dot{x}_2 = \ddot{\theta} = f(x_1, x_2, u) \end{cases} \quad (3.19)$$

Procedendo da mesma forma para a variáveis y , resulta em:

$$\begin{cases} x_3 = y \\ x_4 = \dot{y} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \dot{x}_3 = \dot{y} = x_4 \\ \dot{x}_4 = \ddot{y} = g(x_1, x_2, u) \end{cases} \quad (3.20)$$

Agregando as equações (3.19) e (3.20) geramos o sistema de equações:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = f(x_1, x_2, u) \\ \dot{x}_3 = x_4 \\ \dot{x}_4 = g(x_1, x_2, x_3, x_4, u) \end{cases} \quad (3.21)$$

que pode ser expresso de uma forma ainda mais compacta:

$$\dot{x} = F(x, u) \quad (3.22)$$

onde $x = (x_1, \dots, x_4)$ e $F(x, u) = (x_2, f(x_1, x_2, u), x_4, g(x_1, x_2, x_3, x_4, u))$. Problemas como o descrito acima tem as relações entre as variáveis descritas em termos de equações diferenciais, ou seja, equações que envolvem um função desconhecida e algumas de suas derivadas. Uma equação que envolve derivadas até ordem n é chamada de equação diferencial ordinária (ODE). No caso da ODE especificada em (3.22), a função desconhecida é a função $x(t)$.

3.2 Exemplos de Equações Diferenciais

Exemplo

Uma lista de equações diferenciais exemplo segue abaixo:

a) $\frac{dy}{dx} = y + x^2$

b) $\frac{dy}{dx} = y^2$

c) $\frac{dy}{dx} = 2x + 3$

d) $e^x \frac{dy}{dx} + 7xy = x^2 + 1$

e) $\frac{dy}{dx} = y + 1$

f) $\frac{d^2y}{dx^2} + 3\frac{dy}{dx} - 17y = 0$

g) $xyy'' + xy' = 0$

h) $e^x y'' + 2y' + 3xy = x + 3$

As equações dadas em (a) e (e) são equações diferenciais de primeira ordem e lineares. Já as equações (f) e (h) são equações diferenciais de segunda ordem e lineares, enquanto que a equação (g) é uma equação diferencial de segunda ordem e não-linear.

Exemplo

Considere a equação diferencial linear de primeira ordem:

$$\frac{dy}{dx} = 2x + 3$$

que pode ser escrita como $y' = f(x)$ sendo $f(x) = 2x + 3$ uma função contínua para $a < x < b$. A solução da equação é dada por:

$$\begin{aligned} y &= \int f(x)dx + c \\ &= \int (2x + 3)dx \\ &= x^2 + 3x + c \end{aligned}$$

3.3 Problema de Valor Inicial

O problema de valor inicial consiste em encontrar uma solução para a equação diferencial

$$y^{(n)}(x) = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}) \quad (3.23)$$

sendo as condições iniciais dadas por:

$$\begin{aligned} y(a) &= \xi_1 \\ y'(a) &= \xi_2 \\ &\vdots \\ y^{(n-1)}(a) &= \xi_n \end{aligned}$$

No que segue desenvolveremos métodos numéricos para resolver of problema (3.23).

3.4 Sistemas de Equações Diferenciais

Um sistema de equações diferenciais de primeira ordem tem a seguinte forma:

$$\begin{cases} y_1'(x) = f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ y_2'(x) = f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \vdots \\ y_n'(x) = f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \end{cases} \quad (3.24)$$

Quando o problema acima tem solução, então ele tem, em geral, várias soluções, ou seja, uma família de soluções. Com as condições iniciais abaixo, temos o problema do valor inicial:

$$\begin{cases} y_1(x) = y(x) \\ y_2(x) = y'(x) \\ \vdots \\ y_n(x) = y^{n-1}(x) \end{cases}$$

Note que a equação diferencial do problema de valor inicial, (3.23), pode ser colocada na forma de um sistema de equações diferenciais de primeira ordem, conforme modelo dado por (3.24). Para tanto, basta proceder como

segue:

$$\begin{aligned}
 y^{(n)} = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}) &\Leftrightarrow \begin{cases} y^{(n)}(x) = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}) \\ y_1 = y \\ y_2 = y' \\ \vdots \\ y_n = y^{(n-1)} \end{cases} \\
 &\Leftrightarrow \begin{cases} y'_1 = y' \\ y'_2 = y'' \\ \vdots \\ y'_n = y^{(n)} \end{cases} \\
 &\Leftrightarrow \begin{cases} y'_1 = y_2 \\ y'_2 = y'_3 \\ \vdots \\ y'_n = f(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \end{cases} \quad (3.25)
 \end{aligned}$$

Exemplo

Considere o problema de valor inicial dado por:

$$y'''(x) = xy' + e^x y(x) + x^2 + 1, \quad 0 \leq x < 1 \quad (3.26)$$

tal que $y(0) = 1$, $y'(0) = 0$, e $y''(0) = -1$. Podemos então transformar (3.26) em um sistema de equações de primeira ordem, fazendo:

$$\begin{cases} y_1 = y \\ y_2 = y' \\ y_3 = y'' \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y'_1 = y_2 \\ y'_2 = y_3 \\ y'_3 = xy_2 + e^x y_1 + x^2 + 1 \\ y_0(0) = 1, \quad y_1(0) = 0, \quad y_3(0) = -1 \end{cases} \quad (3.27)$$

3.5 Equações de Diferenças

Uma equação de diferenças de ordem n é uma sequência de equações da forma:

$$\begin{aligned}
 g_k(y_{k+n}, y_{k+n-1}, \dots, y_k) &= 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots \\
 y_j &= \xi_j, \quad j = 0, 1, 2, \dots, n-1
 \end{aligned} \quad (3.28)$$

Os g_k são funções de $n+1$ variáveis e os valores ξ_j são dados específicos. Uma solução de tal equação é uma sequência $(y_0, y_1, \dots, y_{n-1}, y_n, y_{n+1}, \dots)$ que satisfaz as equações (3.28).

Uma forma especial das equações (3.28) é:

$$\begin{aligned}\alpha_n y_{k+n} + \alpha_{n-1} y_{k+n-1} + \dots + \alpha_1 y_k &= 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots \\ y_j &= \xi_j, \quad j = 0, 1, 2, \dots, n-1\end{aligned}\quad (3.29)$$

Em (3.29), os g_k independem de k e são funções lineares homogêneas de todas as variáveis, e por esta razão são chamadas de equações de diferenças lineares homogêneas, com coeficientes constantes.

Exemplos

Abaixo listamos três exemplos de equações de diferenças lineares:

- a) $y_{k+2} - 5y_{k+1} + 6y_k = 0$, $y_0 = 0$, $y_1 = 1$
- b) $y_{k+1} - y_k = 0$ e $y_0 = 0$
- c) $y_{k+3} - 2y_{k+2} - y_{k+1} + 2y_k = 0$, $y_0 = 0$, $y_1 = -3$, e $y_2 = 1$

3.6 Métodos de Solução Elementares

Estudaremos agora métodos que aproximam uma equação diferencial por uma equação de diferenças. Determinar numericamente uma solução de uma equação diferencial é encontrar os valores (y_1, y_2, \dots, y_n) através de uma aproximação da equação de diferenças. Tal aproximação introduz um erro de truncamento e um erro de arredondamento.

3.7 Método de Euler

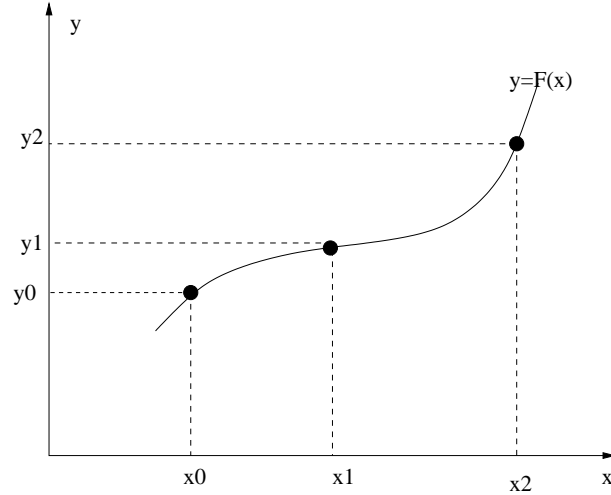
Vamos resolver a ODE de primeira ordem da forma $y' = f(x, y)$ sujeita à condição inicial $y(x_0) = y_0$. Primeiramente, vamos analisar o problema graficamente. Suponhamos que $y = F(x)$ e que a solução analítica seja a curva mostrada no gráfico da figura abaixo.

Para fazer uma estimativa de y_1 , em torno do ponto (x_0, y_0) vamos considerar que:

$$\frac{dy}{dx}|_{(x_0, y_0)} = f(x_0, y_0)$$

que pode ser aproximado em torno de (x_0, y_0) por:

$$\frac{y - y_0}{x - x_0} \cong f(x_0, y_0)$$

Figura 3.2: Ilustração de uma primitiva $F(x)$

Observando que, se $h = x_1 - x_0$ tender a zero, a ordenada do ponto Q (\bar{y}) tende a y_1 e daí:

$$\begin{aligned}\bar{y} &= y_0 + hf(x_0, y_0) \\ y_1 &\cong y_0 + hf(x_0, y_0)\end{aligned}\tag{3.30}$$

Generalizando, temos a seguinte equação a diferenças, que é a expressão de Euler:

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k)\tag{3.31}$$

Outro enfoque consiste em considerar a aproximação:

$$y'(x) \cong \frac{[y(x+h) - y(h)]}{h}\tag{3.32}$$

Introduzindo a notação

$$x_k = a + kh, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

de modo que $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$. Fazendo y_k representar uma aproximação para $y(x_k)$ onde $y(x)$ é a solução de $y' = f(x, y(x))$, então (3.32) sugere que:

$$y'(x_k) = \frac{[y_{k+1} - y_k]}{h}$$

Portanto,

$$y_{k+1} - y_k = hy'(x_k) \Rightarrow y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k)\tag{3.33}$$

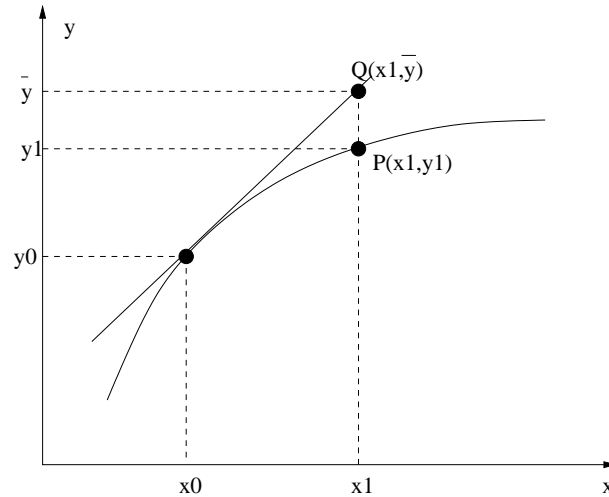


Figura 3.3: Método de Euler

que é novamente a expressão do método de Euler.

3.7.1 Exemplo

Resolver a equação diferencial $y' = 2x + 3$, para $x = \{1.0, 1.1, 1.2, 1.3\}$, tendo como condições iniciais $y = 1$ quando $x = 1$.

Temos que $f(x, y) = 2x + 3$, $x_0 = 1$, $y_0 = 1$, $h = 0.1$.

Passo 0 Temos, pelas condições iniciais que:

$$\begin{aligned} y_0 &= 1 \\ x_0 &= 1 \end{aligned}$$

Passo 1 Calculamos y_1 para $x_1 = 1.1$ conforme segue:

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + hf(x_0, y_0) \\ &= 1 + 0.1(2 \times 1 + 3) \\ &= 1.5 \\ x_1 &= x_0 + h \\ x_0 &= 1.0y_0 = 1.0 \\ x_1 &= 1.1y_1 = 1.5 \end{aligned}$$

Passo 2 Calculamos y_2 para $x_2 = 1.2$ conforme segue:

$$\begin{aligned}y_2 &= y_1 + hf(x_1, y_1) \\&= 1.5 + 0.1(2 \times 1.1 + 3) \\&= 2.02 \\x_2 &= 1.2\end{aligned}$$

Passo 3 Calculamos y_3 para $x_3 = 1.3$ conforme segue:

$$\begin{aligned}y_3 &= y_2 + hf(x_2, y_2) \\&= 2.56 \\x_3 &= 1.3\end{aligned}$$

3.7.2 O Algoritmo de Euler

Algoritmo de Euler (f, a, b, ξ, h)

```

 $x \rightarrow a$ 
 $y \rightarrow \xi$ 
Enquanto  $x \leq b$ 
     $y \rightarrow y + hf(x, y)$ 
     $x \rightarrow x + h$ 
    Saida( $x, y$ )
Fim enquanto

```

3.8 Método de Euler para Sistemas de Equações

Aqui vamos estender o método de Euler desenvolvido na seção para resolver numericamente sistemas de equações diferenciais.. Vejamos inicialmente um sistema de duas equações:

$$\begin{cases} y' = f(t, y, z) \\ z' = g(t, y, z) \end{cases}$$

Fazendo $h_0 = t_1 - t_0$, temos:

$$\begin{cases} y(t_1) &= y_1 \\ &= y_0 + h_0 f(t_0, y_0, z_0) \\ z(t_1) &= z_1 \\ &= z_0 + h_0 g(t_0, y_0, z_0) \end{cases}$$

Generalizando para um passo h qualquer, temos:

$$\begin{cases} y_{k+1} &= y_k + hf(t_k, y_k, z_k) \\ z_{k+1} &= z_k + hg(t_k, y_k, z_k) \end{cases}$$

Para um conjunto de n equações o método assume a forma:

$$\begin{cases} y_1^{k+1} &= y_1^k + hf_1(x(k), y_1^k, y_2^k, \dots, y_n^k) \\ y_2^{k+1} &= y_2^k + hf_2(x(k), y_1^k, y_2^k, \dots, y_n^k) \\ &\vdots \\ y_n^{k+1} &= y_n^k + hf_n(x(k), y_1^k, y_2^k, \dots, y_n^k) \end{cases} \quad (3.34)$$

Logo, as equações (3.34) nos dão um processo iterativo para calcular a solução numérica aproximada de $y(x)$ a partir de um conjunto de condições iniciais. Isto significa que a trajetória $\{(x_k, y^k) : k = 0, 1, 2, \dots\}$, conforme (3.34), produz uma solução aproximada para $y(x)$.

3.9 Métodos Baseados na Série de Taylor

Tomemos como ponte de partida a equação diferencial ordinária:

$$\begin{aligned} y' &= f(x, y(x)) \\ y(x_0) &= y_0 \end{aligned}$$

Seja $y = F(x)$ a solução, ou seja, $F'(x) = f(x, y)$ com $F(x_0) = y_0$. Assumiremos que F é diferenciável até ordem n . Expandindo $F(x)$ na série de Taylor em torno de x_0 , temos:

$$\begin{aligned} F(x) &= F(x_0) + \frac{x - x_0}{1!} F'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!} F''(x_0) + \dots \\ &\quad + \frac{(x - x_0)^n}{n!} F^{(n)}(x_0) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Sabemos que:

$$\begin{aligned} F(x_0) &= y_0 \\ F'(x_0) &= f(x_0, y_0) \\ &= y_0' \end{aligned}$$

Entretanto precisamos ainda determinar $y_0'', y_0''', \dots, y_0^{(n)}$. Não conhecemos estas derivadas pois $F(x)$ não é conhecida. Se f for suficientemente derivável,

elas podem ser determinadas considerando-se a derivada total em relação a x , pois f é função implícita de y . Isto nos leva aos desenvolvimento abaixo:

$$\begin{aligned}
 y' &= f(x, y(x)) \\
 y'' &= f'(x, y(x)) \\
 &= \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} + \frac{\partial f}{\partial x} \\
 &= f_y(x, y(x)) \cdot f(x, y(x)) + f_x(x, y(x)) \\
 &= f_y f + f_x \\
 y''' &= \frac{\partial f_y f}{\partial y} \cdot \frac{dy}{dx} + \frac{\partial f_y f}{\partial x} + \frac{\partial f_x}{\partial x} \cdot \frac{dy}{dx} \cdot \frac{\partial f_x}{\partial x} \\
 &= f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_x f_y + f_y^2 f
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

3.9.1 Exemplo

Considere a ODE $y' = x + y^2$ e a condição inicial $y(0) = 1$. Conforme desenvolvimento acima, sabemos que

$$y'' = f_x + f_y f = 1 + 2y'y.$$

Observando que $f_x = 1$, $f_y = 2y$, $f_{xx} = 0$ e $f_{xy} = 0$, podemos verificar que:

$$\begin{aligned}
 y''' &= f_{yy}f^2 + f_x f_y + f_y^2 f \\
 &= 2(x + y^2)^2 + 1 \cdot (2y) + (2y)^2(x + y^2) \\
 &= 2(x + 2xy^2 + y^4) + 2y + 4y^2x + 4y^4 \\
 &= 2x + 4xy^2 + 2y^4 + 2y + 4y^2x + 4x^4 \\
 &= 6y^4 + 2y + 4xy^2 + 4y^2x + 2x
 \end{aligned}$$

Assim temos:

$$\begin{aligned} y'(0) &= 0 + y_0^2 = y_0^2 \\ &= 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y''(0) &= 1 + 2yy' \\ &= 1 + 2y_0y'_0 \\ &= 1 + 2 \cdot 1 \cdot 1 \\ &= 3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y'''(0) &= 6y^4 + 2y + 4xy^2 + 4y^2x + 2x \\ &= 6y_0^4 + 2y_0 \\ &= 6 \cdot 1 + 2 \cdot 1 \\ &= 8 \end{aligned}$$

Isto nos leva a solução aproximada:

$$y(x) = 1 + x + \frac{3}{2}x^2 + \frac{8}{6}x^3 + E_T$$

Onde E_T denota o erro cometido.

3.10 Método de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta são obtidos pela série de Taylor em que se omite os termos de mais alta ordem na expansão. Se cancelarmos os termos que contém potências de h de ordem maior que p , obtemos um método de ordem p . O método de Euler estudado anteriormente é de primeira ordem. Para desenvolvermos os métodos, vamos expandir y_{k+1} em vez de $F(x)$ como descrito na equação (3.35), ou seja:

$$y_{k+1} = y(x_k) + hy'(x_k) + \frac{h^2}{2}y''(x_k) + \frac{h^3}{6}y'''(x_k) \quad (3.37)$$

3.10.1 Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem

Assumindo que $y(x)$ é três vezes continuamente diferenciável, então o teorema de Taylor nos dá:

$$y_{k+1} = y(x_k) + hy'(x_k) + \frac{h^2}{2}y''(x_k) + \frac{h^3}{6}y'''(\xi_k) \quad (3.38)$$

para algum $\xi_k \in [x_k, x_{k+1}]$. Usando a notação

$$y'(x_k) = f(x_k, y(x_k))$$

vemos que

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + hf(x_k, y(x_k)) + \frac{h^2}{2} \left[\frac{df(x, y(x))}{dx} \right] + O(h^3) \quad (3.39)$$

Para calcular $\frac{df(x, y(x))}{dx}$ poderíamos usar uma das formular de (3.36), mas teríamos o problema das derivadas parciais, então usamos uma aproximação dada pela derivação do polinômio interpolador de grau um, ou seja:

$$p(x) = f(x_1) \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} + f(x_2) \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$$

então:

$$p'(x) = f(x_1) \frac{1}{x_1 - x_2} + f(x_2) \frac{1}{x_2 - x_1}$$

daí temos com $h = x_2 - x_1$ que:

$$\frac{df(x, y(x))}{dx} = \frac{1}{h} [f(x + h, y(x + h)) - f(x, y(x))] + O(h) \quad (3.40)$$

Escrevendo a equação (3.40) para $x = x_k$ e substituindo em (3.39), temos:

$$\begin{aligned} y(x_{k+1}) &= y(x_k) + hf(x_k, y(x_k)) \\ &\quad + \frac{h^2}{2} \left[\frac{f(x_{k+1}, y(x_{k+1})) - f(x_k, y(x_k))}{h} \right] + O(h^3) \\ &\cong y(x_k) + \frac{h^2}{2} [f(x_{k+1}, y(x_{k+1})) - f(x_k, y(x_k))] \\ &= y(x_k) + \frac{h^2}{2} [f(x_{k+1}, y_{k+1}) - f(x_k, y(x_k))] \end{aligned} \quad (3.41)$$

Todavia, a fórmula (3.41) não pode ser utilizada para calcular y_1, y_2, \dots por causa do termo $y_{k+1} = y(x_{k+1})$ no lado direito da igualdade. As fórmulas do tipo (3.41) são chamadas fórmulas implícitas. Substituindo y_{k+1} em $f(x_{k+1}, y_{k+1})$ pela expressão do método de Euler, temos:

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}, y_{k+1}) &= f(x_{k+1}, y(x_k) + hy'(x_k) + O(h^2)) \\ &= f(x_{k+1}, y(x_k) + hf(x_k, y(x_k)) + O(h^2)) + O(h^2) \end{aligned} \quad (3.42)$$

A substituição de (3.42) em (3.41), nos leva a:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}[f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_k + hf(x_k, y_k))] + O(h^3) \quad (3.43)$$

que é conhecida como fórmula de Runge-Kutta de segunda ordem.

Para uma equação diferencial do tipo $y' = f(x, y)$, com condição inicial $y(x_0) = y_0$, O método Runge-Kutta de segunda-ordem pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + h \\ y_{k+1} &= y_k + \frac{k_1 + k_2}{2}, \end{aligned}$$

onde:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_k, y_k) \\ k_2 &= hf(x_{k+1}, y_k + k_1) \end{aligned}$$