Formulário de Cálculo Numérico

Ano letivo 2022/2023

Interpolação e Aproximação Polinomial

Polinómio de Lagrange

$$p_n(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x) + \ldots + y_n L_n(x),$$

onde

$$L_i(x) = \varphi_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})...(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)...(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})...(x_i-x_n)} \quad , \quad i = 0,1,...,n.$$

Polinómio de Newton com diferenças divididas

$$\begin{aligned} p_n(x) &= f_0 + (x-x_0)f[x_0,x_1] + (x-x_0)(x-x_1)f[x_0,x_1,x_2] + \ldots \\ &\ldots + (x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{n-1})f[x_0,x_1,\ldots,x_n] \end{aligned}$$

Erro de interpolação

$$f(x^*) - p_n(x^*) = (x^*-x_0)(x^*-x_1)\ldots(x^*-x_n)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad , \quad \xi \in]\min(x_0,x_1,\ldots,x_n), \max(x_0,x_1,\ldots,x_n)[.$$

Interpolação por splines polinomais cúbicos :
Expressão do spline polinomial cúbico, interpolador de f em $x_0, x_1, \ldots, x_n$ no intervalo $[x_i, x_{i+1}]$:

$$S_i(x) = -\frac{(x-x_{i+1})^3}{6h_i}m_i + \frac{(x-x_i)^3}{6h_i}m_{i+1} + \left(f_i - \frac{h_i^2}{6}m_i\right)\frac{x_{i+1}-x}{h_i} + \left(f_{i+1} - \frac{h_i^2}{6}m_{i+1}\right)\frac{x-x_i}{h_i},$$

onde $h_i = x_{i+1} - x_i, \quad i = 0,1,\ldots,n-1$ e $m_i = S''(x_i), \quad i = 0,1,\ldots,n.$

Sistema de equações para a determinação do spline cúbico interpolador de f nos pontos $x_0, x_1, \ldots, x_n$:

$$h_{i-1}m_{i-1} + 2(h_{i-1}+h_i)m_i + h_i m_{i+1} = 6\left(\frac{f_{i+1}-f_i}{h_i} - \frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}}\right), \ i = 1,\ldots,n-1. \qquad \textbf{[E]}$$

Sistema de equações para a determinação do spline cúbico completo
Adicionar às equações **[E]** as equações:

$$2h_0 m_0 + h_0 m_1 = 6\left(\frac{f_1 - f_0}{h_0} - f_0'\right),$$

$$h_{n-1}m_{n-1} + 2h_{n-1}m_n = 6\left(f_n' - \frac{f_n - f_{n-1}}{h_{n-1}}\right).$$

Sistema de equações para a determinação do spline cúbico natural
Adicionar às equaçõess **[E]** as equações $m_0 = m_n = 0$.

Método dos mínimos quadrados

Função polinomial que melhor aproxima os dados $\{(x_0, y_0), \ldots, (x_n, y_n)\}$ em relação à base $\{1, x, \ldots, x^m\}$:

$$p(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \ldots + \alpha_m x^m.$$

Os coeficientes $\alpha_0, \alpha_1, \ldots\ , \alpha_m$ são a solução do sistema de equações lineares

$$\begin{cases} \alpha_0 \displaystyle\sum_{i=0}^{n} (1) + \alpha_1 \sum_{i=0}^{n} (x_i) + \ldots + \alpha_m \sum_{i=0}^{n} (x_i{}^m) = \sum_{i=0}^{n} (y_i) \\ \alpha_0 \sum_{i=0}^{n} (x_i) + \alpha_1 \sum_{i=0}^{n} \left(x_i{}^2\right) + \ldots + \alpha_m \sum_{i=0}^{n} \left(x_i{}^{m+1}\right) = \sum_{i=0}^{n} (x_i y_i) \\ \vdots \\ \alpha_0 \displaystyle\sum_{i=0}^{n} (x_i{}^m) + \alpha_1 \sum_{i=0}^{n} \left(x_i{}^{m+1}\right) + \ldots + \alpha_m \sum_{i=0}^{n} \left(x_i{}^{2m}\right) = \sum_{i=0}^{n} (x_i{}^m y_i) \end{cases}$$

Integração Numérica

Fórmulas de Newton-Cotes (fechadas) :

n	Fórmula de integração		Erro de quadratura
0	$\displaystyle\int_{a=x_0}^{b=x_1} f(x)\mathrm{d}x \approx hf\left(\frac{x_0+x_1}{2}\right)$	(Regra do ponto médio)	$\dfrac{h^3}{24} f''(\xi), \quad \xi \in]x_0, x_1[.$
1	$\displaystyle\int_{a=x_0}^{b=x_1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{2}(f_0 + f_1)$	(Regra dos trapézios)	$-\dfrac{h^3}{12} f''(\xi), \quad \xi \in]x_0, x_1[.$
2	$\displaystyle\int_{a=x_0}^{b=x_2} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2)$	(Regra de Simpson)	$-\dfrac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in]x_0, x_2[.$

Método de integração de Gauss :

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \ = \ \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2} y + \frac{a+b}{2}\right) \mathrm{d}y$$

Seja $f \in \mathrm{C}^{(2\mathrm{n})}([-1, 1])$.

Então, para a regra simples de Gauss com n pontos e considerando $I = \int_{-1}^{1} f(x)\, dx$, tem-se :

$$I - \bar{I} = \frac{2^{2n+1}\ (n!)^4}{(2n+1)\ [(2n)!]^3}\ f^{(2n)}(\theta), \text{ com } \theta \in [-1, 1]$$

1) Regra de Gauss com 2 pontos

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

2) Regra de Gauss com 3 pontos

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

Resolução de Equações Não Lineares

1) Método do ponto fixo :
Teorema : Seja $\varphi \in \mathrm{C}([a,b])$ e $\varphi : [a,b] \to [a,b]$.
Supondo que φ' existe em $]a,b[$ e $\left|\varphi'(x)\right| \leq k < 1$, $x \in]a,b[$, a sucessão definida por

$$\begin{cases} x_0 \in [a,b] \\ x_n = \varphi(x_{n-1}) \quad n = 1,2,\ldots \end{cases}$$

converge para o único ponto fixo, α, da função φ no intervalo $[a,b]$.

Corolário : Se φ satisfaz as condições do teorema anterior, então

$$|\alpha - x_n| \leq \frac{k^n}{1-k} |x_0 - x_1| \qquad \text{e} \qquad |\alpha - x_n| \leq \frac{k}{1-k} |x_n - x_{n-1}|, \quad \text{para } n \geq 1.$$

2) Método de Newton
A sucessão x_n gerada pelo método de Newton é definida por:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0,1,2,\ldots.$$

Corolário : Seja x_n a sucessão gerada pelo método de Newton e convergente para α, sendo α a única raiz da equação $f(x) = 0$ no intervalo $[a,b]$. Então,

$$|\alpha - x_n| \leq \frac{M_2}{2m_1}(x_n - x_{n-1})^2, \quad n = 1,2,3,\ldots$$

onde $\quad 0 < m_1 \leq |f'(x)|_{[a,b]} \quad$ e $\quad M_2 \geq |f''(x)|_{[a,b]}$.

3) Método da secante
A sucessão x_n gerada pelo método da secante é definida por:

$$x_{n+1} = \frac{x_{n-1} f(x_n) - x_n f(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \quad n = 1,2,3,\ldots.$$

Corolário : Seja x_n a sucessão gerada pelo método da secante e convergente para α, sendo α a única raiz da equação $f(x) = 0$ no intervalo $[a, b]$. Então,

$$|\alpha - x_n| \leq \frac{M_2}{2m_1} |\alpha - x_{n-1}||\alpha - x_{n-2}|, \quad n = 2, 3, 4, \ldots$$

onde $\quad 0 < m_1 \leq |f'(x)|_{[a,b]} \quad$ e $\quad M_2 \geq |f''(x)|_{[a,b]}$.

Resolução de Sistemas de Equações Lineares

Normas de Vetores e Normas de Matrizes
Dado $X = [x_1 \; x_2 \; \ldots \; x_n]^T$, vamos considerar as normas seguintes :

1) $\|X\|_\infty = \max\limits_{1 \leq i \leq n} |x_i|$

2) $\|X\|_1 = \sum\limits_{i=1}^{n} |x_i|$

As normas matriciais a) e b) definidas a seguir, são subordinadas às/induzidas pelas normas vectoriais 1) e 2), respectivamente.
Sendo A uma matriz quadrada de ordem n de elemento genérico "a_{ik}",

a) $\|A\|_\infty = \max\limits_{1 \leq i \leq n} \sum\limits_{k=1}^{n} |a_{ik}|$

b) $\|A\|_1 = \max\limits_{1 \leq k \leq n} \sum\limits_{i=1}^{n} |a_{ik}|$

Método iterativo geral para resolução de sistemas de equações lineares
Considere-se o seguinte sistema de equações lineares na forma matricial $AX = B$. Faça-se $A = N - P$, com N regular (invertível). O sistema é equivalente a $X = GX + H$, com $G = N^{-1}P$ e $H = N^{-1}B$. Se X^* é a solução do sistema $AX = B$ e $X^{(j)}$ são obtidos a partir da relação $X^{(j+1)} = GX^{(j)} + H$, $j = 0, 1, \ldots$, então, se $\|G\| \leq \lambda < 1$, então a sucessão de iteradas $X^{(j)}$ é convergente para X^*. Tem-se ainda :

$$\left\| X^* - X^{(j)} \right\| \leq \frac{\|G\|^j}{1 - \|G\|} \left\| X^{(1)} - X^{(0)} \right\|$$

$$\left\| X^* - X^{(j)} \right\| \leq \frac{\|G\|}{1 - \|G\|} \left\| X^{(j)} - X^{(j-1)} \right\|$$

$$\left\| X^* - X^{(j)} \right\| \leq \|G\|^j \left\| X^{(0)} \right\| + \frac{\|G\|^j}{1 - \|G\|} \|H\|$$

Métodos particulares

1) Jacobi
Fazer no método geral, $G = -D^{-1}(L+U)$ e $H = D^{-1}B$.

2) Gauss-Seidel
Fazer no método geral, $G = -(D+L)^{-1}U$ e $H = (D+L)^{-1}B$.

3) Jacobi com relaxação (parâmetro ω)
Fazer no método geral, $G = -\omega D^{-1}(L + \frac{\omega-1}{\omega}D + U)$ e $H = \omega D^{-1}B$.

4) Gauss-Seidel com relaxação (parâmetro ω)
Fazer no método geral, $G = -(L + \frac{1}{\omega}D)^{-1}(\frac{\omega-1}{\omega}D + U)$ e $H = (L + \frac{1}{\omega}D)^{-1}B$,

sendo, em todos os casos, L uma matriz triangular inferior em sentido estrito, D uma matriz diagonal e U uma matriz triangular superior em sentido estrito, tais que $A = D + L + U$.

Resolução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

$$\begin{cases} y'(t) = f(t,y), \quad t \in [a,b] \\ y(a) = \alpha \end{cases}$$

Método de Taylor de ordem n

$$\begin{cases} w_0 = \alpha \\ w_{i+1} = w_i + hT^{(n)}(t_i, w_i), \quad i = 0,1,...,N-1 \end{cases}, \quad \textit{h=(b-a)/N}, \quad t_i = t_0 + hi$$

onde

$$T^{(n)}(t_i, w_i) = f(t_i, w_i) + \frac{h}{2}f'(t_i, w_i) + ... + \frac{h^{n-1}}{n!}f^{(n-1)}(t_i, w_i).$$

Métodos de Runge-Kutta de ordem 2

Método de Heun

$$\begin{cases} w_0 = \alpha \\ w_{i+1} = w_i + \frac{h}{2}\left(f(t_i, w_i) + f\left(t_{i+1}, w_i + hf(t_i, w_i)\right)\right), \quad i = 0,1,...,N-1 \end{cases}.$$

Método de Euler-Cauchy

$$\begin{cases} w_0 = \alpha \\ w_{i+1} = w_i + h\left(f\left(t_i + \frac{h}{2}, w_i + \frac{h}{2}f(t_i, w_i)\right)\right), \quad i = 0,1,...,N-1 \end{cases}.$$